



HAL
open science

Les fluides de Cahn-Hilliard

Pierre Seppecher

► **To cite this version:**

Pierre Seppecher. Les fluides de Cahn-Hilliard. Mécanique [physics.med-ph]. Université du Sud Toulon Var, 1996. tel-00522242

HAL Id: tel-00522242

<https://theses.hal.science/tel-00522242v1>

Submitted on 30 Sep 2010

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.



Les fluides de Cahn-Hilliard

P. Seppecher

Ce mémoire a été rédigé pour la soutenance d'une

Habilitation à Diriger les Recherches

le 24 Janvier 1996,

devant le **Jury** composé de

G. Bouchitté, A. Di Carlo, R. Gatignol,
H. Gouin, G. Maugin, F. Murat, P. Suquet.

Rapporteurs:

A. Di Carlo, I. Fonseca, G. Maugin.

Remerciements

Je tiens à remercier tout d'abord Antonio di Carlo, Irène Fonseca et Gérard Maugin qui ont accepté de rapporter sur les travaux présentés dans ce mémoire.

Je remercie Guy Bouchitté, Renée Gatignol, Henri Gouin, François Murat, et Pierre Suquet d'avoir accepté de participer au Jury.

Certains des travaux présentés dans ce mémoire ont été réalisés grâce à la précieuse collaboration de Giovanni Alberti, Guy Bouchitté, Giuseppe Buttazzo, Henri Gouin et Francesco dell Isola.

Je remercie également Michel Dufour qui a gentiment accepté de corriger l'anglais de certains des articles présentés dans ce mémoire.

Table des matières

1	Présentation	3
2	La Modélisation Mécanique	11
2.1	Introduction	11
2.2	Thermodynamique	16
2.3	Modélisation des interfaces	21
2.4	Conditions aux limites	33
2.5	Forces d'arêtes	41
3	Situations particulières	71
3.1	Introduction	71
3.2	Film mince liquide	74
3.3	Bulles microscopiques	93
3.4	Ligne de contact en mouvement	101
4	Approche variationnelle	137
4.1	Introduction	137
4.2	Paroi rugueuse	143
4.3	Tension de ligne	167
4.4	Gouttes 1-D microscopiques	215
5	Digression	223
5.1	Relaxation et non localité	223



Chapitre 1

Présentation

La méthode classique pour étudier un fluide en situation diphasique est de considérer les deux phases comme deux milieux continus différents (deux fluides, compressibles ou non), chacun possédant une énergie (fonction convexe de la densité de masse). L'interface est une surface de discontinuité porteuse d'une énergie σ (la tension superficielle). Les interfaces fluide-paroi sont aussi porteuses des énergies σ_1 et σ_2 . Cette théorie est très connue et donne satisfaction dans la plupart des cas. L'équilibre, par exemple, est donné par la minimisation de l'énergie totale sous une contrainte de masse fixée, l'angle de contact θ formé par l'interface et la paroi (cf. Figure 1.1) est alors donné par la loi de Young

$$\cos(\theta) = \frac{\sigma_2 - \sigma_1}{\sigma} .$$

Il n'y a cependant pas de consensus sur la modélisation des milieux diphasiques dans des situations moins classiques, par exemple sur l'existence de termes de viscosité de surface, sur la définition d'un angle de contact en situation dynamique, sur l'existence de tension de ligne le long de la ligne de contact, sur l'interprétation de l'hystérésis de l'angle de contact . . .

En fait, on sait que les deux phases sont deux états d'un même fluide et que l'interface est la zone de forte variation de la densité qui les sépare. Cette zone est une couche très mince et le modèle classique de capillarité est le modèle asymptotique obtenu quand les longueurs caractéristiques d'un problème sont grandes devant l'épaisseur de la zone

interfaciale (c'est un modèle "macroscopique").

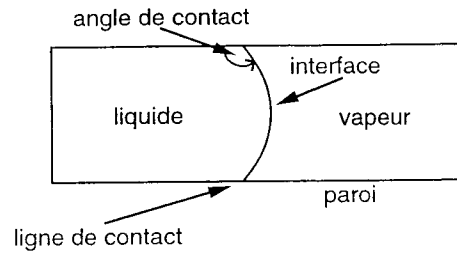


Figure 1.1: Un système diphasique en théorie classique

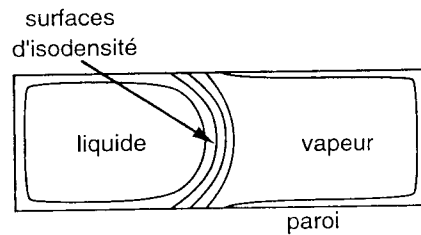


Figure 1.2: Un système diphasique en théorie de Cahn-Hilliard

Depuis les travaux de Gibbs on cherche à prévoir le comportement des interfaces à partir du comportement du fluide contenu dans la zone interfaciale. On se heurte alors à une difficulté fondamentale: on ne peut pas obtenir de tension superficielle si l'on suppose que le fluide contenu dans la zone interfaciale est un fluide classique. En effet si le tenseur des contraintes ne contient qu'un terme de pression à l'équilibre, cette pression ne peut qu'être constante (en l'absence d'efforts extérieurs) dans tout le fluide et le saut caractéristique de pression à la traversée de l'interface ne peut pas être retrouvé. Il faut utiliser un modèle de fluide capable d'exercer des tensions non isotropes

dans les zones où la densité de masse varie rapidement.

Le modèle de Cahn-Hilliard (cf. J. W. Cahn, J. E. Hilliard, *J. chem. Phys.*, 31, N.3, 688, 1959 et J. W. Cahn, *J. chem. Phys.*, 8, 66, 3667, 1977) répond à ce besoin¹. Les fluides de Cahn-Hilliard sont des fluides dont l'énergie volumique est la somme de deux termes, une fonction non convexe de la densité de masse $W(\rho)$ et un terme $\lambda(\nabla\rho)^2$ prenant en compte les effets de l'inhomogénéité du fluide. Le premier terme, correspondant par exemple à une énergie de Van der Waals en dessous de la température critique, tend à séparer le fluide en deux phases. Le deuxième tend à régulariser le champ de densité en transformant ses discontinuités en fines couches de transition. La figure 1.2 montre les surfaces d'isodensité dans une situation semblable à celle de la figure 1.1. La densité du fluide dans les phases est voisine des valeurs de contact de la fonction W et de sa bitangente (cf. figure 1.3).

Les travaux de P.Casal et H.Gouin (cf. P. Casal, *C. R. Acad. Sci. Paris*, 274, série A, 1571, 1972 et P.Casal, H.Gouin, *C. R. Acad. Sci. Paris*, t. 300, Série II, N.7, p. 231-233, 1985) ont montré que les fluides de Cahn-Hilliard doivent être modélisés en utilisant la théorie du second gradient développée par P.Germain (cf. *J. Mécan.*, 12, 235, 1973). C'est là que réside l'intérêt théorique de ces fluides: ils ne peuvent pas être modélisés dans le cadre de la théorie de Cauchy des milieux continus.

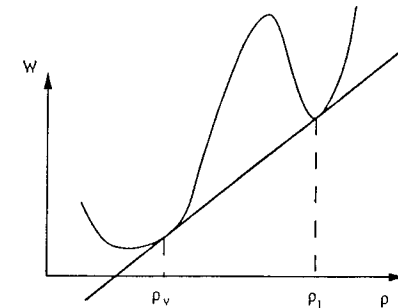


Figure 1.3: énergie volumique d'un fluide homogène.

¹Les fluides de Cahn-Hilliard sont aussi appelés fluides doués de capillarité interne ou fluides de Korteweg ou fluides de second gradient.

Les travaux que je présente dans ce mémoire cherchent à mettre en évidence les particularités des fluides de Cahn-Hilliard et à vérifier si ces particularités sont conformes à la réalité. Ces travaux sont classés par thèmes plutôt que de manière chronologique. Dans la partie 2 j'ai regroupé les études ayant trait à la modélisation mécanique des fluides de Cahn-Hilliard, c'est à dire au système d'équations et aux conditions aux limites qu'ils vérifient. On y trouve aussi une étude construisant la théorie du second gradient d'une manière analogue à la manière suivie par Cauchy pour construire la théorie (de Cauchy) des milieux continus. Dans les parties 3 et 4 j'ai regroupé les études de situations particulières mettant en évidence des comportements spécifiques des fluides de Cahn-Hilliard, la partie 4 contenant les résultats asymptotiques rigoureux obtenus par la Γ -convergence de l'énergie et donc limités à des cas d'équilibre. Le lien de la dernière partie avec les fluides de Cahn-Hilliard est plus ténu: l'étude qui y est présentée est une réflexion sur la façon dont la Γ -limite d'énergies locales peut être une énergie non locale, phénomène qui est rencontré dans l'une des situations étudiées dans la partie 4.

J'ai choisi, afin de rendre la lecture de ce mémoire plus facile, d'introduire chacune des parties, puis chacun des articles de manière détaillée et de limiter cette présentation générale à un bref résumé des résultats obtenus.

La partie 2 commence par un rappel des équations des fluides de Cahn-Hilliard obtenues en utilisant la théorie du second gradient. Cette théorie est particulièrement adaptée à l'étude des fluides de Cahn-Hilliard mais elle n'en donne pas une idée intuitive. Pour bien connaître la physique de ces fluides, il faut comprendre comment ils interagissent avec leur environnement (qu'il soit constitué du même matériau ou pas). En un mot, il faut connaître les conditions aux limites qui leur sont naturellement associées. Les conditions aux limites obtenues au paragraphe 2.4 sont non classiques: une distribution de force d'un type spécial est présente sur les parois d'un récipient, distribution non interprétable en terme de forces et dont les effets ont une grande importance pratique puisque qu'elle fixe l'angle de contact formé par une interface et une paroi.

La constatation d'une réticence d'une partie des mécaniciens à ad-

mettre la validité du système d'équations vérifiés par les fluides de Cahn-Hilliard (une réticence provenant d'un refus d'utiliser le principe des puissances virtuelles et donc la théorie du second gradient) m'a induit à rechercher une présentation différente du modèle, la plus proche possible de la présentation de Cauchy. Dans le paragraphe 2.5, nous construisons la théorie du second gradient à partir d'hypothèses sur la puissance des efforts extérieurs à la place d'hypothèses sur la puissance des efforts intérieurs. La construction explicite des deux tenseurs de contraintes de la théorie du second gradient par l'utilisation du "tetraèdre de Cauchy" est obtenue. La référence au principe des puissances virtuelles n'a pas pu être supprimée entièrement: c'est une caractéristique des fluides de Cahn-Hilliard que d'échanger des actions mécaniques qui ne sont pas assimilables à des mesures sur les parois (ce sont des distributions d'ordre 1, au sens mathématique) et qui ne peuvent donc être représentées par des "densités de force".

Les situations qui peuvent mettre en évidence les spécificités des fluides de Cahn-Hilliard sont celles comportant de petites distances caractéristiques. Au paragraphe 3.2, j'étudie l'équilibre d'un film liquide de faible épaisseur posé sur (ou sous) un plan horizontal ainsi que sa stabilité sous l'action de la pesanteur. La comparaison avec les résultats classiques de l'instabilité de Rayleigh-Taylor met en évidence une interaction spécifique entre l'interface et la paroi toute proche.

Le paragraphe 3.3 est consacré à l'étude de l'équilibre de toutes petites gouttes ou bulles. Un décalage entre l'énergie de ces gouttes et l'énergie prévue par la théorie classique de la capillarité est mis en évidence. Ce décalage est en concordance avec les mesures expérimentales.

Une troisième idée fut d'étudier le mouvement d'une interface sur une paroi plane. La théorie classique de capillarité est incapable de modéliser ce mouvement (elle prédit une dissipation infinie lors de ce mouvement!). L'étude présentée au paragraphe 3.4 est numérique. Elle montre l'influence de la vitesse sur l'angle de contact formé par l'interface et la paroi.

Un tournant dans mes recherches a eu lieu lorsque j'ai appris les résultats de Γ -convergence obtenus par L. Modica (*Ann. Inst. H. Poincaré, Anal. Non Linéaire*, 5, 453, 1987). Bien que limités aux

études d'équilibre, ces résultats sont très satisfaisants: ils correspondent parfaitement à la notion intuitive de convergence des modèles. Ils démontrent que les fluides de Cahn-Hilliard se comportent, à grande échelle, comme le décrit la théorie classique de la capillarité. La relative pauvreté du modèle limite est cependant un peu décevante: les phases γ sont incompressibles, la tension superficielle constante, il n'y a pas de tension de ligne sur la ligne de contact ni d'hystérésis de l'angle de contact... En fait la présentation asymptotique choisie par L. Modica n'est pas neutre et cache de nombreuses hypothèses sur les comportements des différentes quantités physiques qui interviennent. De nouveaux problèmes asymptotiques obtenus en changeant certaines de ces hypothèses sont étudiés dans la partie 4.

L'étude de l'équilibre dans un domaine dont une des parois est rugueuse (elle oscille avec une longueur d'onde comparable à l'épaisseur de l'interface) est faite au paragraphe 4.2. Une technique d'homogénéisation montre comment la rugosité influe sur l'angle de contact formé par l'interface et la paroi. La rugosité peut augmenter la mouillabilité de la paroi jusqu'à la rendre complètement mouillante².

Au paragraphe 4.3 on montre que les modèles de fluides de Cahn-Hilliard peuvent converger vers un modèle de capillarité avec tension de ligne. Cette étude, assez longue, a fait apparaître des problèmes mathématiques originaux. Les résultats obtenus montrent que la tension de ligne est liée à une transition de phases de surface et non à la ligne de contact. La ligne de séparation des phases de surface et la ligne de contact peuvent coïncider fréquemment mais cette coïncidence n'est jamais assurée a priori. L'énergie du système n'est pas une fonctionnelle locale du champ de densité à l'intérieur du domaine.

L'étude des gouttes (ou bulles) de très petite taille déjà entreprise au paragraphe 3.3 est reprise au paragraphe 4.4. Cette étude est pour l'instant limitée à la dimension un, c'est à dire qu'elle correspond en fait à l'étude de films minces. Nos résultats montrent que la masse se répartit suivant une mesure atomique (somme de masses de Dirac) et comment l'énergie de chacune des masses de Dirac dépend de sa masse.

Dans le paragraphe 5.1 on considère une famille de fonctionnelles

²On dit que la paroi est complètement mouillante si le liquide s'étale entièrement sur la paroi (angle de contact égal à π).

locales dont les relaxées sont, en général, non locales. Nos résultats montrent que ce phénomène est purement artificiel, dû à un choix non adéquat des espaces fonctionnels de travail. Après avoir défini les espaces de Sobolev convenables, nous identifions les relaxées (fonctionnelles locales) dans ces espaces et la relation entre ces relaxées et les relaxées habituelles.

Ce mémoire est basé sur les articles suivants (par ordre de présentation dans ce mémoire):

Thermodynamique des zones capillaires, P.Seppecher, *Annales de Physique*, vol. 13, p 13-22, 1988.

Etude des conditions aux limites en théorie du second gradient: cas de la capillarité, P.Seppecher, *C.R.Acad.Sci.*, t. 309, Série II, p. 497-502, 1989.

The relationship between edge contact forces and interstitial working allowed by the principle of virtual power, F.dell'Isola and P.Seppecher, *C.R.Acad.Sci.*, t 321, série IIb, 1995.

Edge Contact Forces and Quasi-Balanced Power, F.dell'Isola and P.Seppecher, *soumis à Meccanica*, 1995.

Equilibrium of a Cahn and Hilliard fluid on a wall: Influence of the wetting properties of the fluid upon the stability of a thin liquid film, P.Seppecher, *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 12, n.1, p.69-84, 1993.

Radius and surface tension of microscopic bubbles by second gradient theory, F.dell'Isola, H.Gouin and P.Seppecher, *C. R. Acad. Sci.*, t. 320, Série IIb, p. 211-216, 1995.

A numerical study of a moving contact line in Cahn-Hilliard theory, P. Seppecher, à paraître dans *International Journal of Engineering Science*, 1995.

Cahn and Hilliard fluid on an oscillating boundary, G.Bouchitté and P.Seppecher, in *Motion by Mean Curvature*, de Gruyter Ed., p. 23-42, 1992.

Un résultat de perturbations singulières avec la norme $H^{1/2}$, G.Alberti, G.Bouchitté and P.Seppecher, *C.R.Acad.Sci.*, t.319, Série I, p.333-338, 1994.

Phase transition with line tension effect, G. Alberti, G. Bouchitté, P. Seppecher, *soumis à Arch. Ration. Mech. An.*, 1995.

Transitions de phases avec un potentiel dégénéré à l'infini, application à l'équilibre de petites gouttes., C.Dubs, G.Bouchitté and P.Seppecher, *soumis aux C.R.Acad.Sci.*, 1995.

Energies with respect to a measure and applications to low dimensional structures, G. Buttazzo, G.Bouchitté, P. Seppecher, à paraître dans *Calcovar*, 1995.

Chapitre 2

La Modélisation Mécanique

2.1 Introduction

Les fluides de Cahn-Hilliard sont des fluides dont la densité volumique d'énergie libre e dépend de la densité de masse ρ ainsi que du gradient de cette densité $\nabla\rho$ ¹. Le principe d'isotropie indique que e ne peut dépendre que du module de $\nabla\rho$. Dans tous nos travaux nous n'étudions que la forme particulière de e :

$$e(\rho, \nabla\rho) = W(\rho) + \frac{\lambda}{2} \nabla\rho^2 \quad (2.1)$$

qui apparaît comme la première approximation de l'énergie d'un milieu non homogène en mécanique statistique et dont l'intérêt est évidemment la simplicité mathématique. La fonction W correspond à l'énergie libre volumique d'un milieu homogène, une énergie de type Van der Waals par exemple. Dans tous les cas que nous considérons, la fonction W est une fonction non convexe ce qui tend à séparer le fluide en deux phases. Le terme $\frac{\lambda}{2} \nabla\rho^2$ est un terme correctif prenant en compte la non homogénéité du fluide, le coefficient λ étant un coefficient physique appelé coefficient de capillarité. Ce terme tend à réduire l'inhomogénéité

¹D'une manière générale nous n'étudions que des situations isothermes et l'influence de la température peut être oubliée. Si la température intervient parfois dans ce mémoire, ce n'est qu'un paramètre extérieur modifiant la fonction e . En effet, la forme de la fonction e diffère fondamentalement suivant que la température est supérieure ou inférieure à la température critique.

du fluide.

L'étude des fluides de Cahn-Hilliard demande la remise en cause des notions les plus élémentaires de la mécanique des milieux continus. Les notions de forces de contact et de contraintes n'y sont pas les mêmes que dans la plupart des milieux étudiés par les mécaniciens. Les notions utilisées étant moins habituelles, l'intuition est plus difficile et nombre de questions se posent. Du point de vue de la modélisation thermo-mécanique, il faut approfondir i) la relation liant la densité d'énergie dépensée dans le milieu aux efforts qui y sont présents, ii) la représentation des forces de contact exercées par une partie du milieu sur une partie voisine et, en particulier, l'influence de la forme de la surface de séparation sur ces forces, iii) les conditions aux limites naturelles que l'on doit écrire lorsqu'on étudie le mouvement de ces milieux.

Les fluides de Cahn-Hilliard font partie d'un ensemble plus vaste de milieux continus: les milieux de second gradient, c'est à dire des milieux dont l'énergie dépend du second gradient du champ de déplacement (en effet la densité ρ est elle-même liée au gradient du déplacement). Les études de modélisation décrites dans cette partie se généralisent sans difficulté à ces milieux.

La nécessité de remettre en cause nos connaissances de base de mécanique des milieux continus apparaît rapidement lorsqu'on envisage un mouvement isotherme et non dissipatif d'un fluide de Cahn-Hilliard. En effet calculons la variation au cours du temps de l'énergie libre E d'une partie du fluide Ω que l'on suit dans son mouvement. On a

$$\dot{E} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} e \, dv = \int_{\Omega} \left(\frac{de}{dt} + e \nabla \cdot U \right) dv$$

où U désigne le champ des vitesses et en utilisant l'expression de e (2.1):

$$\dot{E} = \int_{\Omega} \left[\frac{dW}{d\rho} \frac{d\rho}{dt} + \lambda \nabla \rho \cdot \frac{d\nabla \rho}{dt} + \left(W(\rho) + \frac{\lambda}{2} \nabla \rho^2 \right) \nabla \cdot U \right] dv$$

En utilisant l'équation de conservation de la quantité de mouvement $\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot U = 0$, on obtient:

$$\dot{E} = \int_{\Omega} \left\{ \left[W(\rho) - \rho \frac{dW}{d\rho} - \frac{\lambda}{2} \nabla \rho^2 \right] \mathbf{1} - \lambda \nabla \rho \otimes \nabla \rho \right\} : \nabla U +$$

$$- \rho (\mathbf{1} \otimes \nabla \rho) : \nabla \nabla U \, dv \quad (2.2)$$

où $\mathbf{1}$, $:$, $:$ désignent le tenseur identité et les produits de contraction double et triple. D'autre part, le théorème de l'énergie cinétique indique que

$$\dot{E}^c = \mathcal{P}^{int} + \mathcal{P}^{ext} \quad (2.3)$$

où E^c , \mathcal{P}^{int} et \mathcal{P}^{ext} désignent respectivement l'énergie cinétique, la puissance des efforts intérieurs et la puissance des efforts extérieurs. En l'absence d'échanges thermiques le premier principe de la thermodynamique s'énonce:

$$\dot{E} + \dot{E}^c = \mathcal{P}^{ext}. \quad (2.4)$$

La comparaison de (2.4) et de (2.3) implique

$$\dot{E} = -\mathcal{P}^{int}. \quad (2.5)$$

L'incompatibilité est alors évidente entre les équations (2.2), (2.5) et l'expression habituellement admise de \mathcal{P}^{int} en fonction du tenseur des contraintes τ :

$$\mathcal{P}^{int} = - \int_{\Omega} \tau : \nabla U \, dv \quad (2.6)$$

Deux familles de méthodes peuvent être utilisées pour résoudre ce problème. L'une consiste à modifier l'équation (2.5), l'autre à modifier l'expression de \mathcal{P}^{int} . La première, due à Dunn et Serrin (cf. J.E. Dunn and J. Serrin, *Arch. Rational Mech. Anal.*, 88, 95, 1985 et J.E. Dunn, *New perspectives in Thermodynamics*, J. Serrin Ed., Springer Verlag, Berlin, p. 187-222, 1986), consiste à ajouter dans (2.5) ou dans (2.4) un apport d'énergie, dit travail interstitiel ("interstitial working"), dont la forme est déterminée par ce besoin de compatibilité². La deuxième (théorie du second gradient) suivie par P. Germain (cf. *J. Mécan.*, 12, 235, 1973), P. Casal (cf. *C.R. Acad. Sci. Paris*, 274, série A, 1571, 1972)

²Citons la méthode dite de "thermodynamique rationnelle" (cf. I. Müller, *Thermodynamics*, Pitman Ed., London., 1985), dans laquelle la forme du second principe est modifiée à la place de la forme du premier principe. Le flux d'entropie n'a plus la forme habituelle. Cela revient dans notre présentation à introduire des flux de chaleur non dissipatifs dans l'équation (2.5). Au nom de ce flux près, la méthode est la même que celle suivie par Dunn et Serrin.

et H.Gouin (cf. *C. R. Acad. Sci. Paris*, t. 300, Série II, N.7, p. 231-233, 1985) consiste à remettre en cause la forme communément admise pour la puissance des efforts intérieurs, en posant

$$\mathcal{P}^{int} = - \int_{\Omega} (b : \nabla U + c : \nabla \nabla U) dv, \quad (2.7)$$

expression naturelle quand on la compare avec (2.2). Une méthode voisine que nous développons au paragraphe 2.5 consiste à remettre en cause les hypothèses fondamentales faites par Cauchy pour construire le tenseur des contraintes, pour finir par obtenir la même expression (2.7) pour la puissance intérieure.

Les deux familles de méthodes peuvent paraître équivalentes: à ce point de notre propos, elles le sont. Mais la deuxième méthode est beaucoup plus puissante car, non seulement la forme de la puissance des efforts intérieurs est modifiée, mais aussi celle de la puissance virtuelle des efforts intérieurs

$$\tilde{\mathcal{P}}^{int} = - \int_{\Omega} (b : \nabla \tilde{U} + c : \nabla \nabla \tilde{U}) dv \quad (2.8)$$

pour tout champ de vitesse virtuelle \tilde{U} suffisamment régulier. Cette hypothèse permet d'obtenir l'expression du tenseur des contraintes apparaissant dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Elle permet surtout d'obtenir les bonnes conditions aux limites pour les milieux de second gradient, chose qu'à ma connaissance la méthode du travail interstitiel est incapable de faire. C'est la théorie du second gradient qui est utilisée au paragraphe 2.2 où l'on rappelle brièvement les équations thermomécaniques des fluides de Cahn-Hilliard.

Le lien entre les fluides de Cahn-Hilliard et la description classique des milieux diphasiques dans laquelle les interfaces sont considérées comme des surfaces de discontinuité (éventuellement porteuses de propriétés matérielles) est primordial pour la compréhension de notre travail. Les fluides de Cahn-Hilliard sont la description à une échelle très fine de zones de fortes transitions qui apparaissent comme des surfaces bidimensionnelles à une échelle macroscopique. Ce passage asymptotique des fluides de Cahn-Hilliard aux modèles que j'appellerai modèles capillaires classiques est décrit de manière formelle au paragraphe 2.3.

Tous nos résultats sur les fluides de Cahn-Hilliard seront interprétés à travers leurs conséquences sur le modèle capillaire classique.

Dans le paragraphe 2.4 nous étudions les conditions aux limites naturellement associées aux fluides de Cahn-Hilliard. L'une d'entre elles est d'un type nouveau et nous montrons son lien avec la donnée de l'angle de contact, angle formé par une interface et une paroi. L'angle de contact est une donnée physique nécessaire pour qu'un problème diphasique soit bien posé. Son interprétation physique n'est pas claire et son correspondant en théorie des fluides de Cahn-Hilliard est peu intuitif: c'est la donnée sur la paroi d'un effort qui n'est pas une force mais plutôt une distribution de force (au sens mathématique). C'est un aspect essentiel des fluides de Cahn-Hilliard que d'échanger à travers des surfaces des efforts qui ne sont pas des forces.

D'autre part nous montrons que des forces d'arêtes sont exercées sur toute partie du fluide dont la frontière contient des arêtes. Rappelons que ces forces d'arêtes sont interdites dans un milieu continu classique.

Dans le paragraphe 2.5 nous montrons comment la théorie du second gradient peut être reconstruite à partir d'hypothèses sur les efforts de contact. C'est une approche voisine de celle de Cauchy. Ce travail est né de deux constatations: i) de nombreux mécaniciens tiennent à ce que les efforts à l'intérieur d'un milieu continu soient décrits en terme de forces ii) la modélisation des milieux dans lesquels des forces d'arêtes sont présentes n'était pas connue (cf. W.Noll and E.G.Virga, *Arch. Rational Mech. Anal.*, vol.111, N.1, p.1-31, 1990). Nous avons montré qu'il ne pouvait être envisagé de forces d'arête sans introduction de distributions de forces (au sens mathématique), distributions déjà décrites par Germain sous le nom de "double forces". Qui dit distributions dit dualité, ou puissances virtuelles et nous sommes ramenés à la théorie du second gradient.

2.2 Thermodynamique

Dans cette partie nous établissons les équations locales vérifiées par un fluide visqueux de Cahn-Hilliard en situation isotherme. Ces résultats ont pour l'essentiel déjà été présentés dans ma thèse de l'Université Paris VI (*Etude d'une modélisation des zones capillaires fluides: interfaces et lignes de contact*, 1987). Nous les rappelons ici pour la cohérence de ce mémoire.

2.2.1 Lois de comportement

Comme nous n'étudions que des situations isothermes, les équations de bilan d'énergie et d'entropie ne nous intéressent que par les restrictions qu'elles entraînent sur les lois de comportement. La manière la plus directe pour obtenir ces restrictions est d'écrire l'inégalité de Clausius-Duhem. Celle-ci s'écrit, lorsque la température T est constante,

$$\Gamma = \nabla \cdot (TJ_s - J_e) - \mathcal{P}^{int} - \rho \frac{d(e/\rho)}{dt} \geq 0, \quad (2.9)$$

où J_s et J_e désignent respectivement le flux d'entropie et le flux de chaleur. Nous nous plaçons dans le cadre de la théorie du second gradient et admettons l'expression (2.7) pour \mathcal{P}^{int} . L'expression de $\rho \frac{d(e/\rho)}{dt}$ a déjà été calculée en (2.2) et en définissant les tenseurs d'ordre deux et trois, b^n et c^n , par:

$$b^n = \left(W(\rho) - \rho \frac{\partial W}{\partial \rho} - \frac{\lambda}{2} (\nabla \rho)^2 \right) \mathbf{1} - \lambda \nabla \rho \otimes \nabla \rho, \quad (2.10)$$

$$c^n = -\lambda \rho (\mathbf{1} \otimes \nabla \rho), \quad (2.11)$$

l'inégalité (2.9) s'écrit

$$\Gamma = \nabla \cdot (TJ_s - J_e) + (b - b^n) : \nabla U + (c - c^n) : \nabla \nabla U \geq 0.^3 \quad (2.12)$$

³Notre raisonnement précédent pour montrer la nécessité d'utiliser une modélisation non classique pour les fluides de Cahn-Hilliard utilisait des mouvements isothermes non dissipatifs. Pour les lecteurs que ce cadre trop restrictif n'aurait

Sous l'hypothèse habituellement admise $J_e = TJ_s$, la dissipation est purement intrinsèque et s'écrit:

$$\Gamma = (b - b^n) : \nabla U + (c - c^n) : \nabla \nabla U \geq 0. \quad (2.13)$$

Dans l'approximation de la thermodynamique linéaire Γ est une forme quadratique positive de $(\nabla U, \nabla \nabla U)$. Cependant, même dans ce cas particulier, les lois de comportement font intervenir un nombre très élevé de coefficients (n'oublions pas que le paramètre thermostatique vectoriel $\nabla \rho$ permet de nombreux couplages entre tenseurs d'ordre différent). C'est pourquoi nous supposons que le second gradient $\nabla \nabla U$ ne provoque aucune dissipation et qu'il n'y a pas d'anisotropie due à $\nabla \rho$. Les lois de comportement ne contiennent alors que les deux coefficients de viscosité classiques ν et ξ et la dissipation a la forme habituelle:

$$\Gamma = \nu \operatorname{tr}(\mathbf{ID})^2 + 2\xi \mathbf{ID} : \mathbf{ID}, \quad (2.14)$$

où $\mathbf{ID} = \frac{1}{2}(\nabla U + \nabla U^t)$ et les tenseurs de contraintes b et c vérifient les lois de comportement:

$$c = c^n, \quad b = b^n + \Pi \quad \text{avec } \Pi = \nu \operatorname{tr}(\mathbf{ID}) \mathbf{1} + 2\xi \mathbf{ID}. \quad (2.15)$$

2.2.2 Bilan des forces

Nous établissons ici l'équation locale de conservation de la quantité de mouvement, les conditions aux limites étant étudiées dans la partie 2.4. Nous utilisons le principe des puissances virtuelles sur un domaine ouvert Ω avec des champs de vitesse virtuels dont le support est intérieur à Ω . Ces champs étant nuls au voisinage du bord $\partial \Omega$ de Ω , la puissance

pas convaincu, notons que l'inégalité (2.12) est incompatible avec les hypothèses $J_e = TJ_s$ et $c = 0$ (i.e. la puissance des efforts intérieurs est le produit du tenseur des contraintes de Cauchy par le gradient du champ de vitesse). Il est clair que l'on peut lever cette incompatibilité en modifiant le flux d'énergie (cf. J.E. Dunn, J. Serrin, *Arch. Rational Mech. Anal.*, 88, 95, 1985 et J.E. Dunn, *New perspectives in Thermodynamics*, J. Serrin Ed., Springer Verlag, Berlin, p. 187-222, 1986), le flux d'entropie (cf. I. Müller, *Thermodynamics*, Pitman Ed., London., 1985) ou en introduisant un tenseur c non nul (théorie du second gradient).

des efforts extérieurs de contact est nulle. La puissance virtuelle des efforts extérieurs se résume à :

$$\tilde{\mathcal{P}}^{ext} = \int_{\Omega} f^{ext} \cdot \tilde{U} \, dv .$$

Le champ d'accélération étant noté γ , le principe des puissances virtuelles s'énonce :

$$\int_{\Omega} \rho \gamma \cdot \tilde{U} \, dv = \int_{\Omega} f^{ext} \cdot \tilde{U} \, dv - \int_{\Omega} (b : \nabla \tilde{U} + c : \nabla \nabla \tilde{U}) \, dv \quad (2.16)$$

pour tout champ \tilde{U} de classe C^{∞} à support intérieur à Ω . En utilisant le théorème de la divergence, cette équation devient

$$\int_{\Omega} [\rho \gamma - f^{ext} - \nabla \cdot (b - \nabla \cdot (c))] \cdot \tilde{U} \, dv = 0 \quad (2.17)$$

qui entraîne l'équation locale de bilan de la quantité de mouvement

$$\rho \gamma = \nabla \cdot (b - \nabla \cdot (c)) + f^{ext} \quad \text{dans } \Omega. \quad (2.18)$$

Cette équation a la forme de l'équation habituelle de bilan de la quantité de mouvement si l'on définit un tenseur de contrainte τ par

$$\tau = b - \nabla \cdot (c) \quad (2.19)$$

Si l'on utilise les lois de comportement (2.15), l'équation du mouvement d'un fluide de Cahn-Hilliard isotherme visqueux devient :

$$\rho \gamma = -\rho \nabla \left(\frac{\partial W}{\partial \rho} - \lambda \Delta \rho \right) + \nabla \cdot \Pi + f^{ext} \quad (2.20)$$

avec $\Pi = \nu \operatorname{tr}(\mathbb{D}) \mathbb{1} + 2\xi \mathbb{D}$.

2.2.3 Les tenseurs de contraintes

Les contraintes dans un fluide de Cahn-Hilliard ou plus généralement dans un milieu de second gradient sont donc déterminés par deux tenseurs de contraintes d'ordre deux et trois. On peut choisir le couple (b, c) ou le couple (τ, c) . Ils sont la représentation de la forme

linéaire $\tilde{\mathcal{P}}^{int}$ portant sur le couple $(\nabla \tilde{U}, \nabla \nabla \tilde{U})$. Cette représentation n'est pas unique car le tenseur $\nabla \nabla \tilde{U}$ n'est pas un tenseur quelconque : il est symétrique à gauche⁴. Le tenseur c est donc déterminé à un tenseur antisymétrique à droite près. De manière à supprimer cette indétermination on peut imposer à c une condition supplémentaire : on envisagera d'imposer soit i) la symétrie à droite soit ii) la symétrie à gauche. Le choix i) est le plus naturel par dualité. Le choix ii) est plus complexe (la possibilité de ce choix est démontrée dans P.Seppecher, *Etude d'une modélisation des zones capillaires fluides : interfaces et lignes de contact*, Thèse de l'Université Paris VI, 1987) mais présente des avantages que nous allons maintenant décrire :

Remarquons tout d'abord que l'indétermination sur c (qui par construction n'a pas d'influence sur \mathcal{P}^{int}) n'a pas d'influence sur l'équation de conservation de la quantité de mouvement (2.18). En effet l'ajout à c d'un tenseur antisymétrique à droite ne modifie pas la quantité $\nabla \cdot (\nabla \cdot (c))$.

Rappelons ensuite que le principe d'objectivité impose la nullité de $\tilde{\mathcal{P}}^{int}$ pour tout champ de vitesse rigide. Cela équivaut à la symétrie du tenseur b .

Remarquons enfin que τ dépend du choix que l'on a fait pour c . Seul le choix ii) assure la symétrie de τ . Or τ étant le tenseur qui apparaît dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement, on conserve au maximum les habitudes des mécaniciens des milieux continus par ce choix.

2.2.4 Flux supplémentaire d'énergie

L'équation de conservation de l'énergie s'écrit :

$$\dot{E} = -\mathcal{P}^{int} + \dot{Q} \quad (2.21)$$

où \dot{Q} désigne l'apport extérieur de chaleur. En supposant que l'apport de chaleur n'est dû qu'à la conduction et en notant J_e le flux de chaleur,

⁴Symétrique à gauche signifie symétrique en ses deux premiers indices. Notons que pour nous la composante d'indice ijk du tenseur $\nabla \nabla \tilde{U}$ est $\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{U}_k)$ et que le produit de contraction $c : \nabla \nabla \tilde{U}$ signifie $\sum_{i,j,k} c_{ijk} (\nabla \nabla \tilde{U})_{kji}$.

l'équation locale de conservation de l'énergie s'écrit:

$$\frac{de}{dt} + e \nabla \cdot U = b : \nabla U + c : \nabla \nabla U + \nabla \cdot (J_e) \quad (2.22)$$

Si l'on utilise le couple de tenseurs de contrainte (τ, c) à la place du couple (b, c) , cette équation s'écrit:

$$\frac{de}{dt} + e \nabla \cdot U = \tau : \nabla U + \nabla \cdot (h) + \nabla \cdot (J_e) \quad (2.23)$$

avec

$$h_i = \sum_{j,k} c_{kji} \frac{\partial U_k}{\partial x_j} \quad \text{pour tout } i \in \{1, 2, 3\} \quad (2.24)$$

Ainsi apparaît naturellement un flux supplémentaire d'énergie qui correspond au travail interstitiel introduit par Dunn et Serrin (cf. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 88, 95, 1985). Ce flux supplémentaire dépend du choix de représentation de c (cf. le paragraphe précédent). Cela est compensé par le fait que le terme $\tau : \nabla U$ dépend lui aussi de ce choix (la somme $\nabla \cdot (h) + \tau : \nabla U$ n'en dépend pas). Si l'on a opté pour le choix rendant τ symétrique alors h est uniquement déterminé.

2.3 Modélisation des interfaces

L'article qui suit commence par exposer la généralisation des résultats que nous venons d'établir au cas des mélanges des fluides de Cahn-Hilliard. Il fait ensuite le lien entre ce modèle et le modèle classique d'interface.

Si l'on admet que le fluide se sépare en zones de faibles gradient de densité (les phases) et en fines couches de transition entre les phases (les zones interfaciales), alors le terme correcteur $\lambda \nabla \rho^2$ peut être négligé dans les phases et celles-ci se comportent comme des fluides compressibles classiques. Reste à comprendre le lien entre les zones interfaciales et les interfaces bidimensionnelles du modèle classique. Ce lien est obtenu par une analyse asymptotique dans laquelle le rapport de l'épaisseur des zones interfaciales sur les autres longueurs caractéristiques tend vers zéro.

Ce passage d'une couche de transition à une interface bidimensionnelle a été très étudié mais toujours en supposant que la zone interfaciale était un milieu continu classique. Ce passage 3D-2D est à la base de la compréhension de la mécanique des interfaces depuis les travaux de Gibbs (cf. J.W.Gibbs, *The scientific Papers of J.W. Gibbs*, Dover Publications, INC New York, 1961). Bien qu'on ne l'utilise jamais pour étudier des milieux multiphasiques dans des situations pratiques, c'est en se référant plus ou moins explicitement à lui qu'on postule la forme des lois de comportement des interfaces. La vérification de sa cohérence est donc un objectif important. Or il est généralement admis (au moins implicitement) que la zone interfaciale est constituée d'un milieu continu classique (de Cauchy) et cela est incompatible avec la présence de tension superficielle dans le modèle limite. Il faut donc supposer que la zone est constituée de fluide de Cahn-Hilliard (ou d'un mélange de ces fluides). Par intégration à travers la couche des lois de bilan de la théorie du second gradient, on s'attendrait à obtenir un modèle bidimensionnel de type second gradient. L'intérêt du processus d'intégration que nous utilisons est de faire disparaître le flux interstitiel h . Ainsi le modèle limite que nous obtenons un modèle de milieu continu bidimensionnel "classique" (de premier gradient).

L'analyse asymptotique présentée ici est purement formelle. La partie 4 du mémoire sera consacrée à une analyse asymptotique rigoureuse.

L'article qui suit a été publié sous la référence: " *Thermodynamique des zones capillaires*, P. Seppacher, *Annales de Physique*, vol. 13, p 13-22, 1988. "

Attention: Les notations de cet article diffèrent de celles utilisées dans l'introduction.

THERMODYNAMIQUE DES ZONES CAPILLAIRES

P. SEPPECHER

Laboratoire de Modélisation en Mécanique, UA-229,
Université de Paris VI, T-66, 4, place Jussieu,
F-75230 Paris Cedex 05, France

Résumé - Nous considérons les interfaces comme des zones tridimensionnelles de faible épaisseur. Nous étudions le processus asymptotique qui permet de les assimiler à des surfaces porteuses de propriétés matérielles. Nous cherchons sous quelles hypothèses les lois vérifiées par ces surfaces sont les mêmes que celles obtenues par application des principes thermodynamiques à des milieux bidimensionnels. Nous montrons en particulier qu'il est difficile d'attacher une masse aux interfaces et que leur vitesse tangentielle doit avoir une définition purement thermodynamique.

Abstract - The interfaces are seen as thin three-dimensional layers. By an asymptotic process they may be considered as carrier surfaces of material quantities. Do these surfaces verify the same laws than those given by a direct application of the principles of thermodynamic to bidimensional materials ? Specially we show the difficulty to construct a model for an interface with mass density. We show that the definition for the tangential velocity of the interface must be purely thermodynamical.

1 - INTRODUCTION

Au premier abord, les interfaces apparaissent comme des surfaces de discontinuité - discontinuité de densité ou d'autres propriétés du milieu fluide. Les expériences les plus simples montrent cependant qu'une telle modélisation est insuffisante et qu'il est nécessaire de doter l'interface d'une densité superficielle d'énergie pour comprendre la présence de tension superficielle. Pour comprendre des phénomènes plus complexes, il faut imaginer de nouvelles propriétés. C'est ainsi que, pour expliquer l'écart entre les prédictions théoriques et les mesures des vitesses de chute d'une goutte plongée dans un fluide au repos, Reussinesq /1/ introduit des viscosités de surface, que Levich /2/ introduit des concentrations et des diffusions de surfactants à l'interface. Cox /3/ introduit des glissements relatifs des milieux de part et d'autre d'une interface au voisinage d'une ligne de contact pour expliquer que le mouvement de cette ligne ne provoque pas une dissipation infinie. Bien d'autres propriétés peuvent être envisagées. C'est pourquoi les théoriciens cherchent à donner un cadre dans lequel la forme des équations d'interface doit être recherchée. Ils cherchent en particulier à exprimer les contraintes imposées par les principes de la mécanique et de la thermodynamique.

La méthode la plus classique est de considérer l'interface comme un véritable milieu bidimensionnel. On parlera alors d'interface singulière. Ce milieu possède une densité surfacique d'énergie, éventuellement des densités de masse, d'entropie, des flux surfaciques de masse, d'énergie, d'entropie, ... et peut avoir des échanges avec les fluides présents de part et d'autre de l'interface. De nombreux auteurs /4/, /5/, /6/, /7/ ont

appliqué à un tel système, où voisinent densités surfaciques et densités volumiques, les principes de conservation de la masse, du torseur cinétique ainsi que les deux principes de la thermodynamique.

Une méthode plus réaliste, semble être de considérer que les propriétés du milieu fluide ne subissent pas de discontinuité mais varient continuellement et très rapidement à la traversée de l'interface. On parlera alors d'interface épaisse. Celle-ci est une zone tridimensionnelle de faible épaisseur qui n'apparaît comme une surface que macroscopiquement, c'est-à-dire au cours d'un processus asymptotique. Au cours de ce processus sont définies des quantités interfaciales analogues à celles définies sur les interfaces singulières. On peut alors se demander si les lois que vérifient ces paramètres sont équivalentes à celles obtenues par application des principes thermodynamiques aux interfaces singulières. En d'autres termes le processus asymptotique et l'application des principes thermodynamiques commutent-ils ?

L'étude de ce processus asymptotique n'est pas nouvelle. Gibbs /8/ a introduit les quantités en excès pour ramener sur une unique surface les conditions aux limites écrites de part et d'autre d'une interface épaisse. D'autres auteurs, plus récemment, ont montré comment, par intégration, des équations de bilan locales valables à l'intérieur de la zone capillaire, pouvaient se transformer en des équations écrites sur une surface géométrique /9/, /10/. Les équations obtenues sont de la même forme que celles obtenues par application des principes de conservation à une interface singulière.

Dans cette étude, nous reprenons cette méthode en utilisant, à l'intérieur de la zone capillaire, des équations qui permettent de comprendre la présence de tension superficielle : celles des mélanges de fluides doués de capillarité interne /11/. L'utilisation de ces équations rend plus délicate la technique d'intégration. Nous montrons qu'il est nécessaire de négliger la densité de masse totale de l'interface et qu'alors le choix d'une vitesse tangentielle adéquate pour l'interface rend valable la relation, habituellement postulée, liant le flux interfacial d'entropie au flux interfacial de chaleur. Ainsi, pour obtenir une description thermodynamique complète de l'interface, une seule hypothèse est nécessaire : celle d'une équation de Gibbs interfaciale dont la validité ne peut être qu'approximative au voisinage de l'équilibre.

2 - MELANGES DE FLUIDES DOUES DE CAPILLARITE INTERNE

Les équations des fluides newtoniens ou des mélanges de ces fluides utilisées à l'intérieur de la zone capillaire ne peuvent pas conduire à un modèle satisfaisant : à l'équilibre le tenseur des contraintes est toujours sphérique, la présence de tension superficielle n'est pas explicable. Il faut construire un modèle de mélange (car en général plusieurs constituants sont en présence au voisinage d'une interface) dont l'énergie augmente à l'approche des changements de densités. Il est donc naturel de supposer que l'énergie interne du milieu est fonction de son entropie, des densités des divers constituants, mais aussi des gradients de ces densités. L'étude d'un tel milieu s'est longtemps heurtée à une importante difficulté : une apparente incompatibilité avec le second principe de la thermodynamique. En fait nous avons montré /12/ qu'il y avait seulement incompatibilité avec la description classique des contraintes internes. En effet la théorie classique suppose que les efforts exercés par une particule élémentaire sur une particule voisine sont des forces de contact exercées sur la frontière de la particule. Cette hypothèse est incompatible avec une énergie dépendant des gradients de densité. L'utilisation du principe des puissances virtuelles dans le cadre de la théorie du second gradient /13/ est nécessaire.

Nous résumons ici les équations obtenues /12/, /14/ qui ne diffèrent des équations classiques des mélanges que par la présence d'une partie non sphérique dans le tenseur des contraintes non dissipatives et d'un flux supplémentaire d'énergie dans l'équation de l'énergie.

Le mélange est constitué de n constituants i de densités ρ^i , de vitesses v^i . On note ρ sa densité totale, v sa vitesse barycentrique. Les équations locales de conservation des masses s'écrivent :

$$(1) \quad \frac{d}{dt} \rho^i + \rho^i \nabla \cdot v + \nabla \cdot J^i = 0 \quad \text{pour tout } i \in \{1, \dots, n\}$$

$$\text{avec } \frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \nabla \quad \text{et } J^i = \rho^i (v^i - v)$$

$$(2) \quad \frac{d}{dt} \rho + \rho \nabla \cdot v = 0$$

Notons \mathbb{T} le tenseur des contraintes, f^{ext} les forces extérieures. L'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit :

$$(3) \quad \frac{d}{dt} (\rho v) + \rho v \nabla \cdot v - \nabla \cdot \mathbb{T} = f^{ext}, \quad \mathbb{T} \text{ est symétrique}$$

L'hypothèse que l'énergie interne u , dépend de l'entropie s , des densités ρ^i et de leurs gradients $\nabla \rho^i$ modifie la relation de Gibbs :

$$(4) \quad du = T ds + \sum_{i=1}^n \mu^i d\rho^i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda^{ij} \nabla \rho^j \cdot d(\nabla \rho^i)$$

Dans cette relation T est la température absolue du milieu, μ^i le potentiel chimique du constituant i , les coefficients λ^{ij} sont appelés coefficients de cocapillarité des constituants i et j .

$$\text{En notant} \quad \tilde{\mu}^i = \mu^i - \sum_{j=1}^n \nabla \cdot (\lambda^{ij} \nabla \rho^j)$$

$$p = Ts - u + \sum_{i=1}^n \tilde{\mu}^i \rho^i$$

$$\mathbb{T}^v = -p \mathbb{1} - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda^{ij} \nabla \rho^i \otimes \nabla \rho^j$$

$$\mathbb{T}^p = \mathbb{T} - \mathbb{T}^v$$

Les bilans d'énergie et d'entropie s'écrivent :

$$(5) \frac{du}{dt} + u \nabla \cdot v = -\nabla \cdot q + T : \nabla v - \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n \tilde{\mu}^i J^i \right) - \nabla \cdot \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda^{ij} (\nabla \cdot J^i + \rho^i \nabla \cdot v) \nabla \rho^j \right)$$

$$(6) \frac{ds}{dt} + s \nabla \cdot v = -\nabla \cdot (q/T) + \sigma ; \sigma \geq 0$$

σ est la production d'entropie, q le flux de chaleur. Il faut remarquer qu'on appelle habituellement flux de chaleur (notée alors, q) la quantité

que nous notons $(q + \sum_{i=1}^n \tilde{\mu}^i J^i)$. C'est grâce à ce changement (purement formel) qu'on retrouve les équations classiques des mélanges en posant $\lambda^{ij} = 0$ pour tout i et j .

L'expression de la dissipation est usuelle :

$$(7) T\sigma = -\frac{q}{T} \cdot \nabla T - J^i \cdot \nabla \tilde{\mu}^i + \mathbb{P}^0 : \nabla v$$

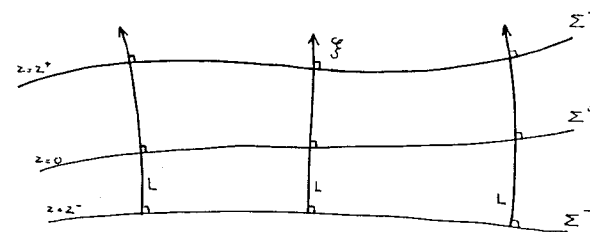
Il faut cependant noter que les lois de comportement obtenues dans le cadre de l'approximation linéaire de la thermodynamique des phénomènes irréversibles sont fortement modifiées par la présence dans les paramètres thermostatiques des paramètres vectoriels $\nabla \rho^i$.

Ce système d'équations permet - en théorie - d'étudier l'évolution d'un système multiphasique comme celle d'un fluide unique. Sa complexité le rend cependant peu utilisable directement. Il faut séparer le domaine d'étude en phases, zones où les équations des fluides newtoniens peuvent être utilisées, et en zones capillaires où ce système doit être utilisé.

3 - DESCRIPTION DES ZONES CAPILLAIRES

Soit L une dimension caractéristique de l'écoulement considéré, ρ^* une densité caractéristique du milieu. Dans les phases les gradients de densité sont d'ordre $\frac{\rho^*}{L}$ et l'on suppose que les coefficients λ^{ij} sont suffisamment petits pour que les termes $\lambda^{ij} \nabla \rho^j \cdot d(\nabla \rho^i)$ puissent être négligés dans l'équation (4). Dans les zones capillaires la distance caractéristique de variation des densités est l , les termes $\lambda^{ij} \nabla \rho^j \cdot d(\nabla \rho^i)$ ne peuvent plus être négligés. Il apparaît ainsi un petit paramètre $\epsilon = l/L$ et nous nous limitons dans cette étude à l'approximation d'ordre 0 en ϵ .

Les zones capillaires sont de petite dimension. Les zones interfaciales auxquelles nous nous intéressons plus particulièrement sont des couches d'épaisseur d'ordre l . Nous admettons que les gradients des densités des divers constituants y sont colinéaires (à l'ordre 0 en ϵ) et nous notons ξ leur direction commune. Les lignes du champ ξ , Σ les surfaces orthogonales c'est-à-dire les surfaces d'isodensité. On note Σ^+ et Σ^- des surfaces Σ encadrant la zone capillaire, Σ^0 une surface Σ choisie comme référence, z un coordonnée normale aux surfaces Σ et $h = \|\nabla z\|$. Ainsi la surface Σ^+ (resp. Σ^-, Σ^0) a pour équation $z = 0$ (resp. $z = z^-, z = z^+$).



Vue en "coupe" d'une zone interfaciale

On note W un champ de vitesse (dite géométrique) conservant les surfaces Σ et les lignes L . Seule la composante normale $W_n = W \cdot \xi$ est bien définie. On donne cependant une composante tangentielle à W en choisissant une composante tangentielle arbitraire pour W^0 , restriction de W à Σ^0 . Ce choix sera fixé pour la commodité de la modélisation. On note F_z l'application linéaire tangente à la projection de Σ^+ sur la surface Σ d'équation $z = z^+$, le long des lignes L . Pour toute quantité X on définit en tout point M^0 de Σ^0 :

$$\langle X \rangle = \int_{z^-}^{z^+} X \det(F_z) h^{-1} dz$$

$$\llbracket X \rrbracket = X(z^+) \det(F_{z^+}) - X(z^-) \det(F_{z^-})$$

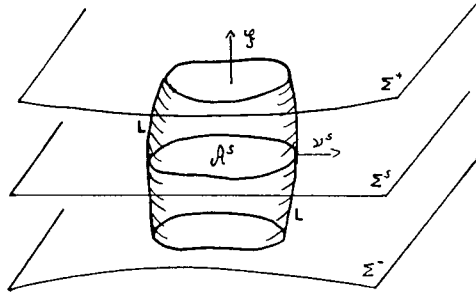
et pour tout tenseur Y d'ordre au moins 1 :

$$\langle Y \rangle = \int_{z^-}^{z^+} Y \cdot F_z^{-1} \det(F_z) h^{-1} dz$$

Les intégrales désignent des intégrales le long de la ligne L passant par M^0 . Remarquons que ces deux types d'intégration ne peuvent être identifiés à l'ordre 0 en ϵ que si l'on suppose que ∇z est d'ordre $1/L$, (hypothèse que nous ne ferons pas).

On montre /12/ que les surfaces Σ^+ et Σ^- peuvent être choisies de manière à ce que $\det(F_{z^+}) = \det(F_{z^-}) = 1$ et qu'ainsi le terme $\llbracket X \rrbracket$ apparaisse comme un terme de saut à travers l'interface : $\llbracket X \rrbracket = X(z^+) - X(z^-)$.

Soit \mathcal{V} une partie de Σ^0 se déplaçant avec la vitesse W^0 , V le volume engendré par les lignes L passant par \mathcal{V} et limité par les surfaces Σ^+ et Σ^- . ν^0 est la normale extérieure au bord $\partial \mathcal{V}$ de \mathcal{V} et n la normale extérieure au bord ∂V de V (cf. figure).



On a
$$\int_V X dv = \int_{\mathcal{A}^s} \langle X \rangle ds$$

$$\int_{\partial V} Y \cdot n ds = \int_{\mathcal{A}^s} \llbracket Y \cdot \xi \rrbracket ds + \int_{\partial \mathcal{A}^s} \langle Y \cdot \xi \rangle v^s dl$$

où ξ désigne la projection sur le plan tangent à Σ^s .

4- INTEGRATION DES LOIS DE BILAN

Les équations de bilan (1), (2), (3), (5), (6) peuvent se mettre sous la forme (8) où $\frac{\delta}{\delta t}$ désigne la dérivée suivant la vitesse W : $\frac{\delta}{\delta t} = \frac{\partial}{\partial t} + W \cdot \nabla$.

$$(8) \quad \frac{\delta}{\delta t} \psi + \psi \nabla \cdot W + \nabla \cdot J = \Phi$$

Cette équation peut être intégrée à travers la zone interfaciale suivant la technique utilisée par A.M. ALBANO, D. BEDEAUX, J. VLIÉGER /9/. Cependant il est ici nécessaire d'intégrer sur un volume V du type défini au paragraphe précédent et ceci de manière à ce que le flux supplémentaire d'énergie

$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda^{ij} (\nabla \cdot J^i + \rho^i \nabla \cdot V) \nabla \rho^j$ disparaisse lors de l'intégration. En d'autres termes, il faut intégrer le long des lignes L et c'est pourquoi il apparaît les deux types d'intégration $\langle \cdot \rangle$ et $\llbracket \cdot \rrbracket$. On obtient alors l'équation de bilan interfacial (9) où $\frac{\delta^s}{\delta t} = \frac{\partial}{\partial t} + W^s \cdot \nabla$ et ∇^s désigne l'opérateur de divergence surfacique de Σ^s .

$$(9) \quad \frac{\delta^s}{\delta t} \langle \psi \rangle + \langle \psi \rangle \nabla^s \cdot W^s + \llbracket J \cdot \xi \rrbracket + \nabla^s \cdot \langle J \cdot \xi \rangle = \langle \Phi \rangle$$

Dans l'étude d'un système multiphasique, l'équation (9) est utilisée comme condition aux limites pour le flux J de l'équation (8). On peut donc négliger les termes de l'équation (9) qui sont d'un ordre de grandeur inférieur aux flux $J(z') \cdot \xi$ et $J(z'') \cdot \xi$.

Soit ψ' la grandeur caractéristique de ψ dans les phases et t' le temps caractéristique, les termes de (8) sont d'ordre ψ'/t' , J est d'ordre $\psi'L/t'$. Si ψ reste d'ordre ψ' dans la zone interfaciale, $\langle \psi \rangle$ d'ordre $\psi'L$ peut être négligé dans l'équation (9). C'est grâce à cette remarque qu'il n'est pas utile de faire intervenir des quantités en excès et que l'arbitraire introduit par le choix des surfaces Σ^+ , Σ^s , Σ^- disparaît.

L'application de ce qui précède au bilan de masse totale (2) et au bilan de quantité de mouvement (3) conduit aux équations :

$$(10) \quad \frac{\delta^s}{\delta t} \langle \rho \rangle + \langle \rho \rangle \nabla^s \cdot W^s + \nabla^s \cdot \langle \rho(V - W) \rangle_{\parallel} = 0$$

$$(11) \quad \frac{\delta^s}{\delta t} \langle \rho V \rangle + \langle \rho V \rangle \nabla^s \cdot W^s - \nabla^s \cdot T^s + \llbracket \rho V \otimes (V - W^s) - T \rrbracket_{\parallel} = \langle f^{*s} \rangle$$

$$\text{avec } T^s = \langle T - \rho V \otimes (V - W) \rangle_{\parallel}$$

Ces deux équations montrent qu'il faut définir sur l'interface deux vitesses "matérielles", l'une liée au flux de masse $\langle \rho V \rangle$, l'autre liée à la quantité de mouvement interfaciale $\langle \rho V \rangle$. En particulier, on ne peut choisir W_{\parallel} tel que $\langle \rho(V - W) \rangle_{\parallel} = 0$ et $\langle \rho V \rangle = \langle \rho \rangle W^s$. Pour surmonter cette difficulté on peut supposer que ρ et V restent du même ordre de grandeur à l'intérieur et à l'extérieur des zones interfaciales et donc négliger $\langle \rho \rangle \langle \rho(V - W) \rangle$ dans (10) et $\langle \rho V \rangle$, $\langle \rho V \otimes (V - W) \rangle$ dans (11). On négligera aussi $\langle f^{*s} \rangle$, les équations (10) et (11) se réduisent à

$$(12) \quad \llbracket \rho(V - W^s) \rrbracket_{\parallel} = 0$$

$$(13) \quad \nabla^s \cdot T^s = \llbracket \rho V \otimes (V - W^s) - T \rrbracket_{\parallel}$$

Avec ces hypothèses le tenseur T^s (appelé tenseur des contraintes interfaciales) est symétrique, aucune vitesse "matérielle" n'est définie à l'interface et la composante tangentielle de W^s reste arbitraire. Le fait d'avoir négligé la masse totale interfaciale n'entraîne pas d'obligation de négliger les masses interfaciales des divers constituants dont on peut écrire le bilan sous la forme suivante :

$$(14) \quad \frac{\delta^s}{\delta t} \langle \rho^i \rangle + \langle \rho^i \rangle \nabla^s \cdot W^s + \nabla^s \cdot \langle J^i \cdot \xi \rangle + \llbracket \rho^i (V - W^s) + J^i \rrbracket_{\parallel} = 0$$

$$\text{avec } J^{is} = \langle \rho^i (V - W) + J^i \rangle_{\parallel}$$

Cette équation peut servir à décrire l'évolution de la quantité d'un surfactant présent à l'interface.

Le flux supplémentaire d'énergie $\sum_i \sum_j \lambda^{ij} (\nabla \cdot J^i + \rho^i \nabla \cdot V) \nabla \rho^j$ est négligeable à l'extérieur de la zone interfaciale, donc sur les surfaces Σ' et Σ'' . De plus il reste colinéaire au vecteur ξ , il n'apparaît pas dans le bilan interfacial d'énergie interne :

$$(15) \quad \frac{\delta^s}{\delta t} \langle u \rangle + \langle u \rangle \nabla^s \cdot W^s - T^s : \nabla^s W^s + \nabla^s \cdot J_e^s + \llbracket q - T \cdot (V - W^s) + (u + \frac{1}{2} \rho (V - W^s)^2) (V - W^s) + \sum_{i=1}^n (\mu^i J^i) \rrbracket_{\Sigma} = 0$$

$$\text{avec } J_e^s = \langle q - T \cdot (V - W^s) + \sum_{i=1}^n \mu^i J^i + u (V - W) \rangle_{\llbracket}$$

Le bilan interfacial d'entropie s'écrit :

$$(16) \quad \frac{\delta^s}{\delta t} \langle s \rangle + \langle s \rangle \nabla^s \cdot W^s + \nabla^s \cdot J_s^s + \llbracket q/T + s(V - W^s) \rrbracket_{\Sigma} = \langle \sigma \rangle$$

$$\text{avec } J_s^s = \langle q/T + s(V - W) \rangle_{\llbracket}$$

5 - THERMODYNAMIQUE DES INTERFACES

La relation de Gibbs (4) ne peut pas être intégrée. Nous sommes dans l'obligation d'admettre - et ce ne peut être qu'une approximation - que les paramètres $\langle \rho^i \rangle$ et $\langle s \rangle$ sont suffisants pour décrire l'état thermodynamique de l'interface. Nous admettons donc la relation de Gibbs interfaciale :

$$(17) \quad d \langle u \rangle = T^s d \langle s \rangle + \sum_{i=1}^n \mu^i d \langle \rho^i \rangle$$

La vitesse W^s ayant jusqu'à présent une composante tangentielle arbitraire, nous pouvons choisir celle-ci de telle manière que la relation (18) (habituellement postulée quelque soit le choix de W^s) entre le flux d'énergie et le flux d'entropie soit vérifiée. (les définitions (15) et (16) de J_e^s et J_s^s montrent que ces flux dépendent du choix de W^s)

$$(18) \quad J_e^s = \frac{q^s}{T^s} \quad \text{avec} \quad q^s = j_e^s - \sum_{i=1}^n \mu_i^s J_i^s$$

Ainsi nous définissons la vitesse tangentielle de l'interface, non plus comme une vitesse matérielle mais comme une vitesse "thermodynamique". Cette vitesse ne sera pas donnée par l'équation de quantité de mouvement, mais par les lois de comportement de l'interface.

Les équations (17) et (18) permettent d'obtenir une expression pour la dissipation $T^s \langle \sigma \rangle$ et d'écrire les lois de comportement de l'interface dans le cadre de l'approximation linéaire des phénomènes irréversibles. Nous n'écrirons pas celles-ci dans toute leur généralité. Regardons, par exemple, les lois obtenues pour une interface séparant deux fluides (indices 1 et 2) non miscibles en présence d'un surfactant (indice 3) insoluble dans les deux fluides, à l'équilibre thermique :

Notons avec les indices ' et '' les quantités de part et d'autre de l'interface : $\rho^{1'} = \rho^{3'} = 0$, $\rho^{2''} = \rho^{3''} = 0$.

Il n'y a pas de transfert de masse : $V_1 = V_1 = W_1^s$

L'équation de conservation de la masse du surfactant est :

$$(19) \quad \frac{\delta^s}{\delta t} \langle \rho^3 \rangle + \langle \rho^3 \rangle \nabla^s \cdot W^s + \nabla^s \cdot J^3 = 0$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$(20) \quad \nabla^s \cdot T^s = T^s \cdot \xi - T^s \cdot \xi$$

Les lois de comportement donnent alors T^s , J^3 , et W^s par

$$(21) \quad T^s = (\gamma^s + \nu^s \nabla^s \cdot W^s) (\mathbb{I} - \xi \otimes \xi) + \mu^s \nabla^s W^s \cdot (\mathbb{I} - \xi \otimes \xi)$$

$$(22) \quad J^3 = -K^s \nabla^s \mu^3 + K' \xi \cdot \Pi_{\xi} - K'' \xi \cdot \Pi_{\xi}$$

$$(23) \quad (V^s - W^s) = K' \nabla^s \mu^3 + K' \xi \cdot \Pi_{\xi} - K'' \xi \cdot \Pi_{\xi}$$

$$(24) \quad (V^s - W^s) = K'' \nabla^s \mu^3 + K'' \xi \cdot \Pi_{\xi} - K' \xi \cdot \Pi_{\xi}$$

Dans (21) γ^s est la tension superficielle, ν^s et μ^s les coefficients de viscosité de dilatation et de cisaillement de surface. Les équations (20) et (21) permettent d'écrire des généralisations des équations de Laplace et de Marangoni tenant compte des effets de viscosité de surface. Dans les équations (22), (23) et (24) K^s est le coefficient de diffusion du surfactant sur l'interface, K' et K'' sont des coefficients de frottement permettant le calcul de W^s ainsi que le calcul d'un éventuel "glissement" ($V_{\xi} - V_{\xi}$) à l'interface, enfin K' , K'' , K''' sont des coefficients de couplage (éventuellement nuls).

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- /1/ J. BOUSSINESQ. - Compt. Rend., 156, 983, 1035, 1124 (1913)
- /2/ V.G. LEVITCH. - Physico-Chemical hydrodynamics, Englewood Cliffs N.J. Prentice Hall, INC (1962).
- /3/ R.G. COX. - J. Fluid Mech., vol. 168, p. 169-220 (1986).
- /4/ D. BEDEAUX, A.M. ALBANO et P. MAZUR. - Physica, vol. 82A, p. 438-462.

- /5/ J. KOVAC. - *Physica*, 86A, p. 1-24 (1977).
- /6/ J.M. DELAYE. - *Thermohydraulics of two-phase systems for industrial design and nuclear engineering*, Hemisphere Publishing Corporation, Washington, p. 95-115 (1981).
- /7/ N. DAHER et G.A. MAUGIN. - *Acta Mechanica*, vol. 60, p. 217-240 (1986).
- /8/ J.W. GIBBS. - *The Scientific Papers of J.W. Gibbs*, Dover Publications, INC New York, Vol. 1, p. 219-274 (1961).
- /9/ A.M. ALBANO, D. BEDEAUX, J. VLIIEGER. - *Physica* 99A, p. 293-304, (1979).
- /10/ R. GATIGNOL. - *Revue Roumaine des Sciences Techniques. Mécanique Appliquée*, vol. 3 (1987).
- /11/ P. CASAL et H. GOVIN. - *C.R. Acad. Sc. Paris*, t. 300, Série II N°7, p. 231-234 (1985).
- /12/ P. SEPPECHER. - *Etude d'une Modélisation des zones capillaires fluides : Interfaces et lignes de contact*, Mémoire de Thèse. Université Paris VI (1987).
- /13/ P. GERMAIN. - *J. Méca.*, vol. 12, p. 235-274 (1973).
- /14/ R. GATIGNOL et P. SEPPECHER. - *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée Numéro Spécial 1986*, p. 225 - 247.

2.4 Conditions aux limites

Dans la section 2.2 nous avons évité de considérer les efforts extérieurs de contact exercés sur la partie Ω du fluide, en utilisant le principe des puissances virtuelles avec des champs de vitesses virtuelles nuls au voisinage du bord $\partial\Omega$. Pourtant la description de ces efforts est particulièrement intéressante, à la fois pour la compréhension physique du modèle et d'un point de vue pratique pour écrire des problèmes bien posés. Les efforts exercés par un milieu différent (une paroi en général) sur un fluide de Cahn-Hilliard modélisent les effets de paroi des phénomènes capillaires. Ces effets sont primordiaux dans la plupart des situations, tant statiques que dynamiques. La plupart des travaux présentés dans ce mémoire sont consacrés à l'étude de ces effets.

La forme de la puissance virtuelle des efforts extérieurs de contact n'est pas évidente en théorie du second gradient. A priori, il serait normal de ne faire intervenir que des distributions supportées par le bord du domaine. La méthode utilisée dans l'article qui suit peut donc sembler artificielle: nous supposons d'abord que la puissance virtuelle des efforts extérieurs est d'une forme comparable à celle de la puissance virtuelle des efforts intérieurs:

$$\tilde{p}^{ext} = \int_{\Omega} (a^{ext} \cdot \tilde{U} + b^{ext} : \nabla \tilde{U} + c^{ext} : \nabla \nabla \tilde{U}) dv \quad (2.25)$$

En utilisant deux fois le théorème de la divergence on obtient

$$\begin{aligned} \tilde{p}^{ext} = & \int_{\Omega} [a^{ext} - \nabla \cdot (b^{ext} - \nabla \cdot (c^{ext}))] \cdot \tilde{U} dv + \\ & + \int_{\partial\Omega} [(c^{ext} \cdot n) : \nabla \tilde{U} + (b^{ext} - \nabla \cdot (c^{ext})) \cdot n \cdot \tilde{U}] ds \end{aligned} \quad (2.26)$$

où n désigne la normale extérieure sur le bord $\partial\Omega$ (supposé être de classe C^2 par morceaux). Décomposons le tenseur $\nabla \tilde{U}$ en partie tangentielle et partie normale: $\nabla \tilde{U} = \mathbb{P} \cdot \nabla \tilde{U} + n \otimes (n \cdot \nabla \tilde{U})$, où \mathbb{P} désigne le tenseur de projection sur le plan de normale n : $\mathbb{P} = 1 - n \otimes n$. En utilisant le théorème de la divergence sur chaque face (partie C^2) du bord on obtient:

$$\begin{aligned} \tilde{p}^{ext} = & \int_{\Omega} f^{ext} \cdot \tilde{U} dv + \int_{\partial\partial\Omega} \mathcal{F}^{ext} \cdot \tilde{U} dl + \\ & + \int_{\partial\Omega} [F^{ext} \cdot \tilde{U} + \mathcal{G}^{ext} \cdot (n \cdot \nabla \tilde{U})] ds \end{aligned} \quad (2.27)$$

avec

$$\begin{aligned} f^{ext} &= a^{ext} - \nabla \cdot (b^{ext} - \nabla \cdot (c^{ext})), \\ F^{ext} &= (b^{ext} - \nabla \cdot (c^{ext})) \cdot n - \nabla^s \cdot ((c^{ext} \cdot n) \cdot \mathbb{P}) \\ \mathcal{F}^{ext} &= \nu \cdot c^{ext} \cdot n \\ \mathcal{G}^{ext} &= n \cdot c^{ext} \cdot n \end{aligned}$$

et où l'on a noté ∇^s l'opérateur de divergence surfacique sur $\partial\Omega$, ν la normale à $\partial\partial\Omega$ tangente à une face de $\partial\Omega$ (l'intégrale sur $\partial\partial\Omega$ est comptée deux fois: une pour chaque face dont $\partial\partial\Omega$ est l'arête).

Autant les quantités a^{ext} , b^{ext} et c^{ext} introduites dans l'expression (2.25) ont peu de sens physique, autant les quantités f^{ext} , F^{ext} , \mathcal{F}^{ext} et \mathcal{G}^{ext} correspondent à l'idée d'efforts de contact. Mais l'expression (2.27) ne pouvait être écrite qu'à partir de (2.25).

L'expression (2.27) donne à réfléchir: des forces d'arêtes \mathcal{F}^{ext} sont présentes dans le milieu. De telles forces sont interdites dans la mécanique classique des milieux continus. D'autre part la distribution de force \mathcal{G}^{ext} est particulière: c'est une distribution au sens mathématique et non simplement une mesure comme f^{ext} , F^{ext} ou \mathcal{F}^{ext} .

La distribution \mathcal{G}^{ext} étant d'un type nouveau, il m'a paru intéressant de comprendre son influence sur la statique d'un fluide de Cahn-Hilliard. C'est pourquoi dans l'article qui suit on montre que la donnée de \mathcal{G}^{ext} équivaut à la donnée d'une condition de Neuman non homogène sur le champ de densité. Par une étude numérique on voit que ce paramètre détermine l'angle de contact à l'équilibre (i.e. l'angle formé par une paroi et par l'interface dans une vue macroscopique de l'équilibre). Enfin on montre comment l'équilibre de la ligne triple peut être interprété en terme de forces: l'influence des forces d'arêtes n'est pas négligeable.

L'article qui suit a été publié sous la référence: "Etude des conditions aux limites en théorie du second gradient: cas de la capillarité, P. Seppécher, C.R. Acad. Sci., t. 309, Série II, p. 497-502, 1989".

Attention: Les notations de cet article diffèrent de celles utilisées dans l'introduction.

Mécanique des milieux continus/Continuum Mechanics
(Physique des surfaces et des interfaces/Surface and Interface Physics)

Étude des conditions aux limites en théorie du second gradient: cas de la capillarité

Pierre SEPPECHER

Résumé — On donne les conditions aux limites dans le cadre d'une théorie de second gradient où les contraintes de second ordre sont représentées par un unique tenseur d'ordre 3 symétrique en ses deux premiers indices. Dans le cas de la capillarité ces conditions sont liées aux interactions entre la paroi et le fluide. Elles permettent d'interpréter en termes de forces l'équilibre d'une ligne triple. L'une de ces conditions, d'un type nouveau, est la traduction en mécanique des milieux continus de la donnée — classique dans l'étude des problèmes diphasiques — d'un angle de contact à la ligne triple.

The limit conditions for a fluid described by the second gradient theory: the case of capillarity

Abstract — The limit conditions in the second gradient theory using a second order stress tensor symmetric in its two first indices are given. Two conditions give the density of forces exerted on walls and the density of forces exerted on edges. Another condition is of a new type. It is the continuum condition equivalent to the classical limit condition used in diphasic problems: a fixed angle at the contact line.

Abridged English Version — We apply the virtual power principle to a fluid whose volumic internal energy depends on the gradient of mass density. It has been shown ([3], [5]) that the second gradient theory removes any incompatibility between such a form of internal energy and the second principle of thermodynamics. This theory gives non-classical limit conditions [6]. These conditions are unimportant when studying the structure of the interfacial layer away from the walls. However they have to be known in order to study the structure of the contact line.

We write first the virtual power principle. The virtual power of acceleration \mathcal{P}^{acc} is represented by (1). The virtual powers of internal and external strengths are linear forms on the space of virtual velocities \tilde{V} . In the second gradient theory we choose for the expression (2) and (3) (the classic theory or first gradient theory is the restrictive case: $c = c^{ext} = 0$) where a , b and c are tensors of order one, two and three. The contraction products are described in note (1). The uniqueness of expression (2) is obtained by assuming that the three-order tensor c is symmetric in its two first indices [7]: it is a different choice of a representation for the second order strengths from P. Germain [6]. Moreover \mathcal{P}^{int} must be an objective quantity. So a is null and b is symmetric.

The contact strengths are usually taken into account in the virtual power of external strengths by surface integrals on the boundary $\partial\mathcal{D}$. Such integrals as well as line integrals on the edges $\partial\partial\mathcal{D}$ may be written as volume integrals of type (3). So we keep the simple expression (3) where the physical meaning of a^{ext} , b^{ext} and c^{ext} is not yet given.

Integrating by parts the terms with $\nabla\tilde{V}$ and $\nabla\nabla\tilde{V}$ in the application of the virtual power principle we obtain equation (4) which gives the local equations (5)-(8). Equation (5) is the classical balance law for momentum and the stress tensor π is symmetric. Equation (6) is a generalization of the classical limit condition: it gives the surface density of forces. Equation (8) is new: there is a line density of forces on edges. Equation (7) is of

Note présentée par Paul GERMAIN.

0249-6313/89/03090497 \$ 2.00 © Académie des Sciences

a new type and \mathcal{G}^{ext} cannot be interpreted in terms of forces. The case of capillarity will give an interpretation for it. For a fluid in a fixed rigid container condition $V=0$ on $\partial\mathcal{D}$ replaces conditions (6) and (8).

In the case of capillarity (a fluid with free energy: $\psi = \mathcal{E}(\rho, T) + (\lambda/2)(\nabla\rho)^2$ in non dissipative processes we have [5], [7] for π and c the expressions (9). Equations (5-8) become (10-13). Then we study the equilibrium in a rigid container and assume that the interactions between the fluid and the walls may be modelled by a surface density of free energy \mathcal{E}^s . The mass density at equilibrium minimizes E (14) and is solution of the system (15, 16). The comparison between system (10, 12) and system (15, 16) gives a first interpretation for \mathcal{G}^{ext} : $\mathcal{G}^{ext} = \rho \partial\mathcal{E}^s / \partial\rho n$.

The second gradient theory adds in the balance equation of energy an extra energy flux. Now the normal component of this flux on the walls (17) can be given. The mechanical nature of this flux clearly appears [4].

We have carried out a numerical study of the equilibrium in a rigid bidimensional container using for \mathcal{E} and \mathcal{E}^s simple forms: (\mathcal{E} and \mathcal{E}^s are polynomial functions of degree four and one). The effect of parameter $\partial\mathcal{E}^s / \partial\rho$ on the equilibrium is clear: the contact angle depends on it. The values obtained for this angle agree quite well with those obtained by calculating the interfacial energies (with a monodimensional model valid far from the contact line) and by applying Young's law [1]. The figures show a drop on a solid surface (Fig. 1), a meniscus in a solid container (Fig. 2) and the structure of a contact line (Fig. 3). (The lines drawn are the isodensity curves).

I. INTRODUCTION. — L'utilisation de la méthode des puissances virtuelles dans le cadre de la théorie du second gradient s'est avérée indispensable à l'étude des fluides doués de capillarité interne, c'est-à-dire des fluides dont l'énergie interne dépend du gradient de masse volumique. En effet l'apparente incompatibilité entre une telle forme d'énergie interne et le second principe de la thermodynamique disparaît avec l'utilisation d'une théorie de second gradient ([3], [5]).

Cette théorie développée par P. Germain [6] présente des conditions aux limites assez complexes. Ces conditions aux limites n'interviennent pas lorsqu'on s'intéresse au fluide loin des parois, en particulier lorsqu'on étudie la structure de l'interface séparant les phases liquides et gazeuses du fluide [7]. Mais leur connaissance est nécessaire si l'on cherche à connaître le comportement de ce fluide au voisinage des parois, la structure de la ligne triple paroi-gaz-liquide par exemple. Nous donnons dans une première partie une formulation relativement simple de ces conditions aux limites en utilisant une représentation des contraintes intrinsèques d'ordre 2 différente de celle utilisée par P. Germain [6]. Dans la deuxième partie nous montrons que ces conditions conviennent parfaitement à la modélisation d'un fluide doué de capillarité interne dont les interactions avec une paroi rigide sont représentées par une densité superficielle d'énergie. L'une de ces conditions décrit les propriétés de mouillabilité de la paroi, les autres décrivent les efforts exercés par la paroi sur le fluide. Ces conditions permettent d'autre part une interprétation simple, à la paroi, du flux supplémentaire d'énergie que la théorie du second gradient introduit naturellement dans le bilan d'énergie [5]. Les figures ont été obtenues par une étude numérique directe d'un problème de minimisation, elles permettent une visualisation des zones capillaires : interfaces et ligne triple.

II. LE PRINCIPE DES PUISSANCES VIRTUELLES EN THÉORIE DU SECOND GRADIENT. — Celui-ci s'écrit : $\mathcal{P}^{acc} = \mathcal{P}^{int} + \mathcal{P}^{ext}$, pour tout champ de vitesses virtuelles \tilde{V} . La puissance virtuelle d'accélération \mathcal{P}^{acc} est :

$$(1) \quad \mathcal{P}^{acc} = \int_{\mathcal{D}} \rho \Gamma \cdot \tilde{V} dv \quad \text{avec} \quad \Gamma = \frac{dV}{dt}$$

Les puissances des efforts intérieurs et extérieurs, \mathcal{P}^{int} et \mathcal{P}^{ext} , sont des formes linéaires sur l'espace des champs de vitesses virtuelles. Dans le cadre d'une théorie de second gradient on se limite à des vitesses deux fois continuellement différentiables :

$$(2) \quad \mathcal{P}^{int} = - \int_{\mathcal{D}} (a \cdot \tilde{V} + b : \nabla \tilde{V} + c : \nabla \nabla \tilde{V}) dv$$

$$(3) \quad \mathcal{P}^{ext} = \int_{\mathcal{D}} (a^{ext} \cdot \tilde{V} + b^{ext} : \nabla \tilde{V} + c^{ext} : \nabla \nabla \tilde{V}) dv$$

a, b, c sont les tenseurs des contraintes intrinsèques d'ordre 0, 1 et 2; on désigne par $\cdot, :$; les produits de concentration (1) et par ∇ l'opérateur de dérivation.

L'écriture (2) peut être rendue unique en imposant à c d'être symétrique en ses deux premiers indices (choix d'une représentation des contraintes d'ordre 2) [7]. Le principe d'objectivité impose à a d'être nul et à b d'être symétrique.

Dans l'expression (3) nous ne séparons pas les efforts extérieurs en une partie due au fluide extérieur à \mathcal{D} et une partie due aux efforts à longue portée provenant de l'extérieur du système étudié (tels que les efforts de pesanteur). Nous ne faisons pas non plus intervenir d'intégrales de surface ou de ligne pour représenter des efforts de contact. Ceux-ci peuvent très bien être représentés par l'expression (3). L'interprétation physique des termes de (3) intervient *a posteriori*.

En intégrant par parties les termes en $\nabla \tilde{V}$ et $\nabla \nabla \tilde{V}$ le principe des puissances virtuelles s'écrit :

$$(4) \quad \int_{\mathcal{D}} \{ \rho \Gamma - \nabla \cdot \pi - f^{ext} \} \cdot \tilde{V} dv + \int_{\partial\mathcal{D}} \{ n \cdot \pi - \nabla^s \cdot (c \cdot n)_{||} - F^{ext} \} \cdot \tilde{V} ds + \int_{\partial\mathcal{D}} \{ n \cdot c \cdot n - \mathcal{G}^{ext} \} \cdot (n \cdot \nabla \tilde{V}) ds + \int_{\partial\mathcal{D}} \{ v \cdot c \cdot n - \mathcal{F}^{ext} \} \cdot \tilde{V} dl = 0$$

où l'on a noté

$$\begin{aligned} \pi &= b - \text{div } c^{(1)}; \\ f^{ext} &= a^{ext} - \text{div} (b^{ext} - \text{div } c^{ext}); \\ F^{ext} &= n \cdot (b^{ext} - \text{div } c^{ext}) - \nabla^s \cdot (c^{ext} \cdot n)_{||}; \\ \mathcal{G}^{ext} &= n \cdot c^{ext} \cdot n; \quad \mathcal{F}^{ext} = v \cdot c^{ext} \cdot n. \end{aligned}$$

n est la normale extérieure à $\partial\mathcal{D}$, v la normale à $\partial\partial\mathcal{D}$ tangente à $\partial\mathcal{D}$, \mathbb{P} l'opérateur de projection sur $\partial\mathcal{D}$ ($\mathbb{P}\mathbf{I} - n \otimes n$), $\nabla^s = \mathbb{P} \cdot \nabla$; $X_{||}$ désigne la quantité $\mathbb{P} \cdot X$.

De (4) on déduit les équations locales :

$$\begin{aligned} (5) \quad & \rho \Gamma = \nabla \cdot \pi + f^{ext} \quad \text{sur } \mathcal{D} \\ (6) \quad & n \cdot \pi - \nabla^s \cdot (c \cdot n)_{||} = F^{ext} \quad \text{sur } \partial\mathcal{D} \\ (7) \quad & n \cdot c \cdot n = \mathcal{G}^{ext} \quad \text{sur } \partial\mathcal{D} \\ (8) \quad & \llbracket v \cdot c \cdot n \rrbracket \mathcal{F}^{ext} \quad \text{sur les arrêtes de } \partial\mathcal{D} \end{aligned}$$

($\llbracket \cdot \rrbracket$ désignant le saut à travers une arrête de $\partial\mathcal{D}$).

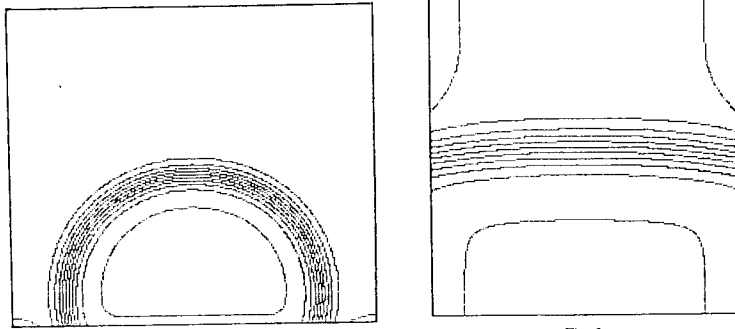


Fig. 1

Fig. 2

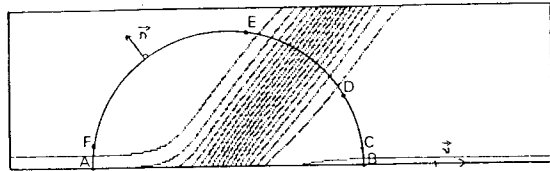


Fig. 3

Fig. 1. — Goutte posée sur une paroi peu mouillante.

Fig. 1. — Droplet on a poorly wettable wall.

Fig. 2. — Menisque dans un capillaire.

Fig. 2. — Meniscus.

Fig. 3. — Structure d'une ligne de contact.

Fig. 3. — Structure of a contact line.

Remarquons que le tenseur des contraintes π reste symétrique. Les vecteurs f^{ext} , F^{ext} , \mathcal{F}^{ext} peuvent être interprétés comme des densités volumiques, surfaciques et linéiques de forces appliquées sur \mathcal{D} , $\partial\mathcal{D}$ et $\partial\partial\mathcal{D}$. Dans le cadre d'une théorie de premier gradient ($c=0$) on retrouve les équations classiques. Dans le cas de parois rigides avec vitesse nulle à la paroi, la condition $v=0$ sur $\partial\mathcal{D}$ remplace les équations (6) et (8). \mathcal{G}^{ext} n'est pas lié à \tilde{V} dans l'application du principe des puissances virtuelles. Ce n'est pas une force mais plutôt une « double force » selon la terminologie de P. Germain [6]. Le cas de la capillarité va permettre d'en donner une interprétation.

III. CAS DE LA CAPILLARITÉ. — 1. Conditions aux limites. — Considérons un fluide dont l'énergie libre s'écrit $\psi = \mathcal{E}(\rho, T) + (\lambda/2)(\nabla\rho)^2$ (l'énergie libre du fluide homogène \mathcal{E} étant donnée par une loi de Van der Waals, par exemple; λ étant un coefficient constant). En l'absence de dissipation on obtient ([5], [7]) pour π et c les expressions suivantes :

$$(9) \quad \pi = -p\mathbf{1} - \lambda \nabla\rho \otimes \nabla\rho; \quad c = -\lambda\rho\mathbf{1} \otimes \nabla\rho$$

avec

$$p = \rho \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\rho} - \mathcal{E} - \frac{\lambda}{2}(\nabla\rho)^2 - \lambda\rho\Delta\rho.$$

Les équations (5-8) s'écrivent alors

$$(10) \quad \rho\Gamma = -\rho\nabla\left(\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\rho}\right) + \lambda\rho\nabla(\Delta\rho) + f^{ext} \text{ sur } \mathcal{D}$$

$$(11) \quad -p^*n + \lambda\rho\nabla^2(n \cdot \nabla\rho) = F^{ext} \text{ sur } \partial\mathcal{D}$$

$$(12) \quad -\lambda\rho(n \cdot \nabla\rho)n = \mathcal{G}^{ext} \text{ sur } \partial\mathcal{D}$$

$$(13) \quad [-\lambda\rho(n \cdot \nabla\rho)v] = \mathcal{F}^{ext} \text{ sur } \partial\partial\mathcal{D}$$

avec $p^* = p + \lambda(n \cdot \nabla\rho)^2 + 2\lambda\rho(n \cdot \nabla\rho)H$, H étant la courbure moyenne de $\partial\mathcal{D}$.

Dans le cas de l'équilibre ces équations peuvent aussi être obtenues directement par minimisation de l'énergie libre totale E [2].

Étudions l'équilibre d'un fluide de ce type contenu dans un récipient rigide et admettons que les interactions entre la paroi et le fluide se traduisent par une densité surfacique d'énergie libre $\mathcal{E}^s(\rho, T)$. La minimisation de E sur l'ensemble des champs ρ d'intégrale donnée donne le système d'équations :

$$(14) \quad E = \int_{\mathcal{D}} \left(\mathcal{E}(\rho, T) + \frac{\lambda}{2}(\nabla\rho)^2 \right) dv + \int_{\partial\mathcal{D}} \mathcal{E}^s(\rho, T) ds$$

$$(15) \quad -\frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\rho} + \lambda\Delta\rho = \text{Constante sur } \mathcal{D}$$

$$(16) \quad n \cdot \nabla\rho = -\lambda^{-1} \frac{\partial\mathcal{E}^s}{\partial\rho} \text{ sur } \partial\mathcal{D}.$$

Les équations (15) et (16) sont équivalentes aux équations (10) et (12) dans le cadre de l'équilibre avec $f^{ext}=0$ (les effets de pesanteur peuvent facilement être pris en compte en complétant l'expression de l'énergie libre E) et avec $\mathcal{G}^{ext} = \rho \partial\mathcal{E}^s / \partial\rho n$. \mathcal{G}^{ext} est donc une donnée nécessaire pour le calcul de l'équilibre.

2. Conditions aux limites pour l'énergie. — Dans le cadre d'une théorie de second gradient il apparaît naturellement dans l'équation d'énergie un flux supplémentaire d'énergie $h = \nabla V : C$ [5]. Dans le cas d'un fluide doué de capillarité interne [c'est-à-dire vérifiant (9)] on a $h = -\lambda\rho \text{div}(v) \nabla\rho$. En utilisant l'équation (16) (en admettant qu'elle reste valable hors équilibre) on obtient pour h la condition aux limites :

$$(17) \quad h \cdot n = \frac{\partial\mathcal{E}^s}{\partial\rho} \rho \text{div}(V) = -\frac{d\mathcal{E}^s}{dt} \text{ sur } \partial\mathcal{D}$$

c'est la donnée de l'énergie fournie au fluide par les interactions paroi-fluide. Il est donc clair que le flux h est un flux d'énergie mécanique et doit être, ainsi que l'ont fait J. E. Dunn et J. Serrin [4], nettement séparé du flux de chaleur.

3. Structure de la ligne triple. — En utilisant une forme simplifiée pour \mathcal{E} (polynôme de degré 4) et pour \mathcal{E}^s (polynôme de degré 1), nous avons étudié numériquement les solutions du problème (14) pour un domaine \mathcal{D} bidimensionnel. La forme choisie pour \mathcal{E} ne doit pas influencer qualitativement les résultats, elle permet lors de l'étude par éléments finis de ramener le problème à celui de la minimisation d'un polynôme de degré 4 à N variables et d'accélérer ainsi l'algorithme de résolution. L'organisation globale du champ de densité ρ correspond à l'organisation habituelle d'un milieu diphasique en présence de parois : formes de ménisques ou de gouttes posées (fig. 1 et 2). Les zones à fort gradient apparaissent comme des couches de faible épaisseur et de faible courbure.

Les densités surfaciques d'énergie des interfaces paroi-liquide, liquide-vapeur, vapeur-paroi peuvent donc être calculées par un modèle unidimensionnel. L'angle de contact calculé en utilisant la loi de Young [1] coïncide alors avec celui obtenu numériquement. Les équations (12) ou (16) sont les conditions aux limites locales correspondant à la donnée macroscopique d'un angle de contact à la ligne triple.

Les équations (11) et (13) donnent une interprétation de l'équilibre de la ligne triple en termes de forces. La figure 3 est une représentation en coupe d'une ligne triple pour une paroi plane et $\partial \mathcal{E}^s / \partial \rho$ constant. En négligeant les effets de pression dans les phases ([CD], [EF]) les efforts appliqués au demi-disque (A, B, E, A) sont : des densités surfaciques de force $-\rho n$ sur [BC], [DE], [FA] responsables des tensions superficielles des diverses interfaces, une densité surfacique de force $-\rho^* n$ sur [A, B] et des densités linéiques de force en A et B :

$$\mathcal{F}_A^{\text{ext}} = -\rho \frac{\partial \mathcal{E}^s}{\partial \rho} v \quad \text{et} \quad \mathcal{F}_B^{\text{ext}} = \rho \frac{\partial \mathcal{E}^s}{\partial \rho} v.$$

La théorie du second gradient permet une description continue de phénomènes jusque-là inaccessibles. Cette capacité démontrée par l'étude de l'équilibre de la ligne triple s'étend au cas du mouvement. Les équations (5-8) doivent permettre d'étudier le mouvement de cette ligne et de comprendre un certain nombre de problèmes que ce mouvement pose.

(¹) Les produits de contraction désignent des contractions sur les indices voisins. A titre d'exemple, en notation indicielle \mathcal{P}^{int} s'écrit :

$$\mathcal{P}^{\text{int}} = - \int_{\mathcal{D}} \left(\sum_{i=1}^3 (a_i \bar{V}_i) + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \left(b_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{V}_i \right) + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \left(c_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{V}_i \right) \right) dv$$

La notation div désigne une dérivation sur le dernier indice, par exemple :

$$(\text{div } c)_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_k} c_{ijk}$$

Note remise le 24 avril 1989, acceptée après révision le 8 juin 1989.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] J. W. CAHN, Critical point wetting, *Journal of Chemical Physics*, 66, n° 8, 1977, p. 3667.
- [2] P. CASAL, La théorie du second gradient et la capillarité, *C. R. Acad. Sci. Paris*, 274, série A, 1972, p. 1571-1574.
- [3] P. CASAL et H. GOUIN, Relation entre l'équation de l'énergie et l'équation du mouvement en théorie de Korteweg de la capillarité, *C. R. Acad. Sci. Paris*, 300, série II, 1985, p. 231-234.
- [4] J. E. DUNN et J. SERRIN, On the thermodynamics of interstitial working, *Arch. Rational Mech. Anal.*, 88, 1985, p. 95-133.
- [5] R. GATIGNOL et P. SEPPECHER, Modélisation de fluid-fluid interfaces with material properties, *Journal de Mécanique Théor. et Appl.*, n° spécial, 1986, p. 225-247.
- [6] P. GERMAIN, La méthode des puissances virtuelles en mécanique des milieux continus, *Journal de mécanique*, 12, n° 2, 1973, p. 235-274.
- [7] P. SEPPECHER, Étude d'une modélisation des zones capillaires fluides interfaces et lignes de contact, *These*, Université Paris-VI et E.N.S.T.A., avril 1987.

Laboratoire de Modélisation en Mécanique, U.R.A. n° 229,
Université Pierre-et-Marie-Curie, 4, place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05.

2.5. FORCES D'ARÊTES

41

2.5 Forces d'arêtes

Le désavantage de l'étude présentée dans le paragraphe précédent est le côté artificiel de la forme initiale postulée pour la puissance virtuelle des efforts extérieurs. D'autre part l'utilisation du principe des puissances virtuelles semble à certains mécaniciens quelque peu magique, physiquement mal justifiée ou devant se limiter au cas de problèmes variationnels. Ces mécaniciens tiennent à ce que les efforts à l'intérieur d'un milieu continu soient décrits en terme de forces. C'est le vieux conflit entre les approches duales de Newton et de d'Alembert et l'on entend dire que "d'Alembert n'avait pas compris la notion de force introduite par Newton".

Bien que persuadés de l'équivalence fondamentale entre les deux approches, nous avons donc recherché une approche "à la Cauchy" des milieux de second gradient, c'est à dire une approche construisant les tenseurs de contraintes à partir d'hypothèses sur les efforts extérieurs (à la place d'hypothèses sur la puissance des efforts intérieurs).

D'autre part un article récent (W.Noll and E.G.Virga, *Arch. Rational Mech. Anal.*, vol.111, N.1, p.1-31, 1990) nous a montré que la modélisation des milieux dans lesquels des forces d'arêtes sont présentes en était à ses balbutiements. Or les fluides de Cahn-Hilliard, d'après l'article précédent, sont un exemple d'un tel milieu. Dans les fluides de Cahn-Hilliard la présence de force d'arêtes est liée à la présence d'une distribution \mathcal{G}^{ext} . La question fut finalement la suivante: la présence de force d'arêtes implique-t-elle toujours la présence d'un autre type de distribution de forces? Les articles qui suivent apportent une réponse positive.

Malheureusement parler de distribution revient à parler de puissance virtuelle. Les puissances virtuelles sont donc incontournables. Dans le Compte Rendu à l'Académie des Sciences qui suit nous les utilisons de manière explicite alors que dans l'article *Edge contact forces and quasi-balanced power* nous nous contentons d'une forme faible: le quasi-équilibre de la puissance des efforts de contact pour tout champ de vitesse. Pour justifier et illustrer l'introduction d'une distribution d'efforts qui n'est pas une mesure nous donnons un exemple simple d'un milieu ayant des interactions mécaniques non locales à très courte portée et qui, dans une analyse limite dans laquelle la portée des forces

tend vers zéro, devient un milieu capable d'exercer de telles distributions.

Une fois admis le besoin d'une telle distribution, nous établissons des théorèmes analogues aux théorèmes de Noll⁵ et de Cauchy⁶ pour construire le couple (τ, c) de tenseurs représentant l'état des contraintes dans le milieu. Ces théorèmes montrent donc que le cadre naturel de description des milieux dans lesquels des forces d'arêtes sont présentes est la théorie du second gradient.

Il faut noter l'introduction d'une notion nouvelle: la notion de formes prescrites, un ensemble de formes étant dit ensemble de formes prescrites si ces formes sont celles prises par un nombre fini de surfaces données. En effet nous avons besoin d'une forme du théorème de Noll qui n'utilise pas l'hypothèse que la densité surfacique de force de contact est bornée uniformément pour toutes les surfaces de contact possibles. Nous limiterons donc cette hypothèse aux familles de surfaces prenant des formes prescrites.

Les articles qui suivent ont été publiés ou soumis à publication sous les références: "The relationship between edge contact forces and interstitial working allowed by the principle of virtual power, F.dell'Isola and P.Seppacher, C.R.Acad.Sci., t 321, série IIb, 1995." et "Edge Contact Forces and Quasi-Balanced Power, F.dell'Isola and P.Seppacher, soumis à Meccanica, 1995."

Attention: Les notations de ces articles diffèrent de celles utilisées dans l'introduction.

⁵Le théorème de Noll établit que la densité surfacique de force de contact ne dépend que de la normale à la surface au point étudié.

⁶Le théorème de Cauchy établit que la densité surfacique de force de contact dépend linéairement de cette normale.

The relationship between edge contact forces, double forces and interstitial working allowed by the principle of virtual power

Francesco DELL'ISOLA and Pierre SEPPECHER

Abstract- We consider continuous media in which contact edge forces are present. Introducing the notion of quasi-balanced contact force distribution, we are able to prove the conjectures made in (Noll, 1990) concerning the representation of contact edge forces. We first generalise the Noll theorem on Cauchy postulate. Then we adapt the celebrated Cauchy tetrahedron construction to find a representation theorem for stress states. Moreover we find the relationship between double forces Germain (Germain, 1973a,b), interstitial working (Dunn, 1985) and contact edge forces.

Relation entre forces d'arêtes, double forces et flux supplémentaire d'énergie induite par le principe des puissances virtuelles

Résumé- Nous étudions la modélisation de milieux continus dans lesquels des interactions d'arêtes ont lieu. En introduisant le concept de distribution de forces quasi-équilibrée, nous prouvons les conjectures énoncées dans (Noll, 1990) concernant l'expression des forces agissant sur ces arêtes. Nous généralisons le théorème de Noll et nous adaptons la démonstration du tétraèdre de Cauchy pour obtenir une représentation des états de contrainte. Notre travail montre le lien étroit entre double forces (Germain, 1973a,b), flux d'énergie supplémentaire (Dunn, 1985) et forces d'arêtes.

Version française abrégée - Il existe deux manières de modéliser un milieu continu. La première est de postuler une expression pour la puissance virtuelle des efforts intérieurs (Germain, 1973a,b) et d'obtenir ainsi la représentation des états de contraintes. La deuxième originellement développée par Cauchy est de postuler une expression pour la puissance virtuelle des efforts extérieurs. Cauchy, raisonnant sur des forces, n'a en fait utilisé que la puissance de ces efforts dans des champs constants. En postulant que les forces surfaciques de contact ne dépendent que de la normale à la surface de contact, il a montré que cette dépendance est linéaire (cf. (Germain, 1973c)). Son postulat a été démontré par (Noll, 1959) sous l'hypothèse d'une densité surfacique de forces uniformément bornée (Cela reste vrai avec des hypothèses plus faibles, voir notre théorème 2). Ces résultats ne sont valables qu'en l'absence de forces d'arêtes. Notre but est de montrer comment un raisonnement analogue à celui de Cauchy permet en présence de forces d'arêtes de définir un second tenseur des contraintes, nous plaçant ainsi dans le cadre d'une théorie de second gradient. Notre hypothèse fondamentale est que la puissance virtuelle des efforts de contact est quasi-équilibrée au sens de (Noll, 1959) (Noll, 1990) (équation (2)).

Nous disons que la forme (\bar{S}, x) de S en x est la même que la forme de S' en x' si les deux surfaces coïncident localement modulo une translation. Nous appelons coupure plane de S par un plan de normale u (notée $Cut((\bar{S}, x), u)$) la forme d'arête obtenue à l'intersection de S et du plan. Les domaines *admissibles* que nous considérons ont une surface *admissible* formée de faces C^∞ et d'arêtes C^∞ . Les sommets sont ignorés et en tout point intérieur d'une arête il existe un dièdre tangent à la surface d'angle différent de $0, \pi$ ou 2π . Un ensemble de formes contenu dans l'ensemble des formes prises par un nombre fini de surfaces *admissibles* est appelé ensemble de *formes prescrites*. De la même manière les coupures produites par un nombre fini de surfaces admissibles et de vecteurs unitaires sont appelées *coupures planes prescrites*. Ces définitions sont nécessaires pour énoncer des hypothèses de régularité ((i)-(iv) de la partie 2) suffisamment faibles pour permettre d'envisager des forces surfaciques non uniformément bornées.

Les forces de contact sont représentées par des densités de surface et de ligne (eq. (1)). Dans la partie 3 (théorème 1) nous montrons que la puissance virtuelle des

efforts de contact ne peut se résumer à la somme des puissances de ces forces (eq. (3)). La preuve est obtenue en appliquant l'inégalité (3) à un petit domaine autour de l'arête. Nous rappelons les résultats de Noll et Cauchy (théorème 2) valables en l'absence de forces d'arêtes. Notre démonstration, utilisant un petit cylindre de base carrée, se contente d'une hypothèse de majoration des forces de contact pour des formes prescrites.

Dans la partie 4 nous ajoutons aux forces de contact une densité surfacique de double forces G . L'hypothèse (2) s'écrit alors (6). Une démonstration analogue à celle du théorème 2 montre que G ne peut dépendre que de la normale à la surface de contact (théorème 3). Une démonstration analogue à celle de Cauchy nous permet de définir un tenseur d'ordre 3, C (eq. (9)) permettant de représenter G (théorème 4). La représentation des densités de forces (théorème 5) est alors obtenue comme conséquence du théorème 1. Le flux supplémentaire d'énergie q lié à C apparaissant dans l'équation de l'énergie correspond à la somme des puissances des forces d'arêtes, de la partie des forces de surfaces qui dépend de la courbure ainsi que des doubles forces.

1. INTRODUCTION - This paper is devoted to contact interactions in which contact edge forces are present. Studying such interactions, Noll and Virga pointed out the lack of physical ground for some of the numerous assumptions they used to represent stress state. Here we face this difficulty by considering the virtual power of contact forces. We assume (which is physically reasonable) that, for each velocity field U , the power P_G^c of contact forces is "quasi-balanced" (Noll, 1959). We show that edge forces can be present only in conjunction with double forces (Germain, 1973a,b) (whose power is related to the "interstitial working" (Dunn, 1985) (Dunn, 1986)). This relationship perfects the relationship between edge forces and the dependence of surface forces on surface curvature pointed out in (Noll, 1990)

2. HYPOTHESES AND NOTATIONS - We say that the shape of the oriented surface S at the point $x \in S$ is the same than the shape of S' at the point $x' \in S'$ if and only if it exists a neighbourhood of the origin in which $t_{-x}(S)$ coincides (as oriented surface) with $t_{-x'}(S')$ (t_u denoting the translation of vector u). We call *shape* of S at the point $x \in S$ the equivalence class of (S, x) in this relation and denote it (\widetilde{S}, x) . The shape of a plane P of normal n is simply denoted n . Let us consider a dihedron and denote by n_1 and n_2 the normals to the half-planes forming it, by ν_1 and ν_2 the external normals to these half-planes tangent to the planes and by τ the unit vector tangent to the edge such that $\nu_1 = \tau \times n_1$ and $\nu_2 = -\tau \times n_2$. On the edge of this dihedron, the shape (*dihedral shape*) is constant and is determined by n_1 , n_2 and τ . This shape is denoted (n_1, n_2, τ) . The angle $(-n_1, n_2)$ following τ is called *dihedral angle* of (n_1, n_2, τ) .

Let V and V' be two domains whose boundaries are the surfaces S and S' . Let S'' be the boundary of $V \cap V'$. At each point x in $S \cap S' \cap S''$ the shape of S'' depends only on the shape of S and S' . We denote it $Cut((\widetilde{S}, x), (\widetilde{S}', x))$. We will only use cuts of S with surfaces whose shape is a plane shape u . We call them *plane cuts* and denote them $Cut((\widetilde{S}, x), u)$.

We only consider as *admissible domains*, bounded domains whose boundary S (*admissible surface*) is a finite union of two-dimensional C^∞ manifolds with boundary (called *faces* of S) and such that the union of the boundaries of these faces is a finite

union of one-dimensional C^∞ manifolds with boundary (called *edges* of S). The set of all internal points of the faces (regular points of the surface) is denoted S^r and the set of all internal points of the edges (regular points of the edges) is denoted L^r . Moreover we assume that, everywhere in L^r , S is tangent to a dihedron whose angle is different from 0, π or 2π .

A set of shapes E is called a set of *prescribed shapes* if there exists a finite sequence $(S_i)_{i=1}^m$ of admissible surfaces such that $E \subset \bigcup_{i=1}^m \{(\widetilde{S}_i, x); x \in S_i\}$. It is called a set of *prescribed plane cuts* if there exist a finite sequence (S_i) of admissible surfaces and a finite sequence (u_j) of unit vectors such that $E \subset \bigcup_{i,j} \{Cut((\widetilde{S}_i, x), u_j); x \in S_i\}$.

We assume that: (i) the *contact forces* F^c exerted on V are represented by

$$(1) \quad F^c(V) = \int_{S^r} F(x, (\widetilde{S}, x)) ds + \int_{L^r} \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x)) dl$$

(ii) $F(x, (\widetilde{S}, x))$ or $\mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x))$ depend continuously on x on a given face or edge, (iii) on a given face S , for a given unit vector u nowhere parallel to the normal to S , $\mathcal{F}(x, Cut((\widetilde{S}, x), u))$ is a continuous function of the variable x , (iv) the families $\{F(x, f) : f \in E^r\}$ and $\{\mathcal{F}(x, f) : f \in E^e\}$ of functions of the variable x are equi-continuous on B : (where B is a bounded domain, E^r is a set of regular prescribed shapes, E^e is a set of prescribed edge shapes or prescribed plane cuts).

As a consequence the functions $F(x, (\widetilde{S}, y))$, $\mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, y))$ and $\mathcal{F}(x, Cut((\widetilde{S}, y), u))$ are uniformly continuous on $B \times (B \cap S)$, $B \times (B \cap L)$ and $B \times (B \cap S)$. Hence $F(x, (\widetilde{S}, x))$ and $\mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x))$ are uniformly bounded on every family of admissible surfaces included in a bounded domain and whose shapes are prescribed shapes or prescribed plane cuts. Notice that they are not uniformly bounded for all possible shapes. E.g. any continuous dependence on the curvature tensor is possible.

We strengthen the hypothesis of "quasi-balance" of contact forces usually used (Noll, 1990), (Noll, 1973) to get restrictions upon possible contact forces by assuming that the power P_G^c of contact forces distribution in a given C^∞ velocity field $U(x)$ is quasi-balanced (this hypothesis reduces to the previous one when considering constant fields U). Then, for every C^∞ field $U(x)$, we assume the existence of a constant K such that, for every V , the following inequality holds:

$$(2) \quad |P_G^c(V)| < K|V|$$

3. A NAIVE EXPRESSION FOR THE VIRTUAL POWER OF CONTACT FORCES - In this section assuming that contact force distribution is the sum of a surface density on S^r and a line density on L^r we prove that quasi-balance hypothesis

$$(3) \quad |P_G^c(V)| = \left| \int_{S^r} F(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot U(x) ds + \int_{L^r} \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot U(x) dl \right| < K|V|$$

is not compatible with non vanishing contact edge forces.

Theorem 1: *Inequality (3) implies that, at every regular point of an edge x_0 ,*

$$(4) \quad \mathcal{F}(x_0, (\widetilde{S}, x_0)) = 0$$



Proof: Let (n_1, n_2, τ) be the dihedral shape tangent to S at x_0 whose angle belongs to $]0, \pi[$ (The proof has to be slightly modified otherwise). We use the coordinate system $(x_0 = 0, e_1, e_2 = \tau, e_3 = \frac{n_1 + n_2}{\|n_1 + n_2\|})$. Let $\varepsilon > 0$; $V' = t_{\varepsilon^2 e_3}(V)$, $S' = t_{\varepsilon^2 e_3}(S)$, $L' = t_{\varepsilon^2 e_3}(L)$, $P_\varepsilon = [-c\varepsilon^2, c\varepsilon^2] \times [0, d\varepsilon] \times [0, 2\varepsilon^2]$ and $V^\varepsilon = V' \cap P_\varepsilon$. c and d may be chosen in such a way that, for ε small enough: i) L' meets ∂P_ε only on the lateral surfaces $\{x.e_2 = 0\}$ and $\{x.e_2 = d\varepsilon\}$, ii) S' meets ∂P_ε only on these lateral surfaces and on the lower surface $\{x.e_3 = 0\}$. We denote S_ε the boundary of V_ε and by L_ε the upper edge of V_ε ($L_\varepsilon = L' \cap P_\varepsilon$). Let us consider the vectors field $U(x) = (x.e_3) U_0$. In V_ε , $\varepsilon^{-2} U(x)$ is bounded independently of ε . Considering the measures of each faces and edges, we get from the inequality (3):

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^{-3} \left\{ \int_{L_\varepsilon} \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}_\varepsilon, x)) \cdot U(x) dl \right\} = 0$$

The result is obtained recalling our regularity assumptions. \square

Theorem 2 When edge forces are vanishing, there exists a continuous field $T(x)$ such that for all regular shape f tangent to the plane shape n

$$(5) \quad F(x, f) = F(x, n) = T(x) \cdot n.$$

Proof: The first part is known as Noll theorem. As we deal with forces which are not uniformly bounded we modify the proof of Noll theorem (Noll, 1959) by using a cylinder whose basis is a square instead of a circle. Then we use only prescribed shapes. Let x_0 be a regular point of S boundary of V and n_0 the normal to S at x_0 . Using the coordinate system $(x_0 = 0, e_1, e_2, e_3 = n_0)$. We define $C_\varepsilon = [0, \varepsilon] \times [0, \varepsilon] \times [-c\varepsilon^2, +c\varepsilon^2]$, $V_\varepsilon = V \cap C_\varepsilon$ and $S_\varepsilon = S \cap C_\varepsilon$. A c can be found such that, for ε small enough, S_ε does not meet the lower and upper faces $\{x_3 = \pm c\varepsilon^2\}$ of C_ε . Inequality (3) applied to C_ε and then to V_ε with constant fields U implies $F(x_0, n_0) = -F(x_0, -n_0)$ and then that $F(x_0, (\widetilde{S}, x_0)) = -F(x_0, -n_0)$. The second part of (5) is the well known result of Cauchy. \square

4. CONTACT DOUBLE FORCES (Germain, 1973a,b) - We assume now that contact force distribution is endowed with a more complex structure: we add a surface double force density G (i.e. the distribution $U \rightarrow \int_{S^r} G(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot \frac{\partial U}{\partial n_i}(x) ds$). We assume the same regularity properties for G as we did for F and \mathcal{F} . The quasi-balance assumption now reads:

$$(6) \quad \left| \int_{S^r} [G(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot \frac{\partial U}{\partial n_i}(x) + F(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot U(x)] ds + \int_{L^r} \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot U(x) dl \right| < K|V|$$

4.1. Dependence of double force density on the shape of the contact surface - We are now able to prove a theorem analogous to the theorem of Noll (Noll, 1959).

Theorem 3. For every shape f tangent to the plane shape n we have

$$(7) \quad G(x, n) = G(x, -n) \quad ; \quad G(x, f) = G(x, n)$$

Proof: Apply the inequality (6) to the domains C_ε and V_ε defined in the proof of theorem 2, using a vector field $U(x) = x \cdot n U_0$. \square

4.2. A theorem analogous to Cauchy theorem.

Theorem 4. It exists a continuous third order tensor field C such that at every point x_0 and for every plane shape n

$$(8) \quad G(x_0, n) = (C(x_0) \cdot n) \cdot n$$

Proof: Using an orthonormal coordinate system $(x_0 = 0, e_1, e_2, e_3)$, we define a tetrahedron V with faces S, S_1, S_2 and S_3 whose normals are $n, -e_1, -e_2$ and $-e_3$ and such that $x_0 \in S$. Let f_i be the shapes of the edge L_i . Let $V_\varepsilon, S_\varepsilon, S_{i\varepsilon}$ and $L_{i\varepsilon}$ be the image of V, S, S_i and L_i under an homothetic transformation of ratio ε . We use the field $U(x) = (x \cdot n) U_0$. We multiply by ε^{-2} the inequality (6) applied to the domain V_ε and evaluate the limit as ε tends to 0. We get

$$2 |S| G(0, n) = \sum_{i=1}^3 \{ \mathcal{F}(0, f_i)(n \cdot e_i) |L_i|^2 \} + 2 \sum_{i=1}^3 \{ G(0, -e_i) |S_i| (n \cdot e_i) \}$$

which reads $G(0, n) = (C(0) \cdot n) \cdot n$, C being the third order tensor defined by

$$(9) \quad C(x) = \frac{1}{2} \mathcal{F}(x, f_1) \otimes (e_2 \otimes e_3 + e_3 \otimes e_2) + \frac{1}{2} \mathcal{F}(x, f_2) \otimes (e_3 \otimes e_1 + e_1 \otimes e_3) + \frac{1}{2} \mathcal{F}(x, f_3) \otimes (e_1 \otimes e_2 + e_2 \otimes e_1) + \sum_{i=1}^3 \{ G(x, e_i) \otimes e_i \otimes e_i \}$$

Remarks: (i) Tensor C is not uniquely determined as only its right side products by symmetric two order tensors are determined. (ii) If \mathcal{F} is vanishing, there exists a vector field W such that $C(x) = W(x) \otimes Id$.

4.3. Representation theorem for contact forces - Assuming that $G(\cdot, f)$ and $\mathcal{F}(\cdot, d)$ are functions of class C^1 we can now solve the open problem pointed out by Noll and Virga when stating their assumption III on page 21 of (Noll, 1990).

Theorem 5. Let x be a regular point of an edge of S . Denoting by (n_1, n_2, τ) the tangent dihedral shape, $\nu_1 = \tau \times n_1$ and $\nu_2 = -\tau \times n_2$ we have

$$(10) \quad \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x)) = (C(x) \cdot n_1) \cdot \nu_1 + (C(x) \cdot n_2) \cdot \nu_2$$

Moreover it exists a second order tensor field T such that (n denoting the normal to S at a regular point x , Π the projector on the tangent plane and ∇^s the surface gradient)

$$(11) \quad F(x, (\widetilde{S}, x)) = T(x) \cdot n - \nabla^s \cdot ((C(x) \cdot n) \cdot \Pi)$$

Remark: the arbitrariness in C has no influence on the representation formula (10) as it can be easily verified that $n_1 \otimes \nu_1 + n_2 \otimes \nu_2$ is a symmetric tensor.

Proof: Because of divergence theorem $\int_{S^r} \nabla U : (C \cdot n) ds$ is quasi-balanced. Subtracting this term to the inequality (6), using (8) and using the divergence theorem on each face of S we find that the following quantities verify inequality (3):

$$\begin{aligned} \mathcal{F}'(x, (\widetilde{S}, x)) &= \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x)) - (C(x) \cdot n_1) \cdot \nu_1 - (C(x) \cdot n_2) \cdot \nu_2 \\ F'(x, (\widetilde{S}, x)) &= F(x, (\widetilde{S}, x)) + \nabla^s \cdot ((C(x) \cdot n) \cdot \Pi). \end{aligned}$$

Theorem 3 and 4 state that $\mathcal{F}'(x, (\widehat{S}, x))$ is vanishing and $F'(x, (\widehat{S}, x)) = T(x).n$. \square

5.CONCLUSION - Our representation theorems show that a continuous medium in which edge contact forces are present has to be described in the framework of second gradient theory (Germain, 1973a,b) which needs two stress tensors to represent contact forces and mechanical energy transport. In such a medium the interstitial working, due to the flux $q = \nabla U : C$ can be interpreted as the sum of three terms: i) the power of edge contact forces, ii) the power of a part of surface forces (the part depending on the curvature), iii) the power expended by double forces. The remark (ii) of section 4.2 makes explicit the possible expressions for interstitial work flux when edge forces are vanishing.

References

- J. E. Dunn and J. Serrin, On the Thermomechanics of Interstitial Working, Arch. Rational Mech. Anal., 88, N.2, 1985, p.95-133.
 J. E. Dunn, Interstitial Working and a Nonclassical Continuum Thermodynamics, New perspectives in Thermodynamics, J. Serrin Ed., Spinger Verlag, Berlin, 1986, p. 187-222.
 P. Germain, La méthode des puissances virtuelles en mécanique des milieux continus. Première partie: Théorie du second gradient, Journal de Mécanique, Vol. 12, N. 2, 1973, p. 235-274.
 P. Germain, The method of virtual power in continuum mechanics. Part 2: Microstructure, S.I.A.M. J. Appl. Math., Vol. 25, N. 3, 1973, p. 556-575.
 P. Germain, Cours de mécanique des milieux continus, tome I, Masson, Paris, 1973.
 W. Noll, The Foundations of Classical Mechanics in the Light of Recent Advances in Continuum Mechanics, Proceeding of the Berkeley Symposium on the axiomatic Method, Amsterdam, 1959, p. 226-281.
 W. Noll, Lecture on The Foundations of Continuum Mechanics and Thermodynamics, Arch. Rational Mech. Anal. 52, 1973, p.62-92.
 W. Noll and E. G. Virga, On edge interactions and surface tension, Arch. Rational Mech. Anal., vol.111, N.1, 1990, p.1-31.

F.d.I.: Dip. di Ingegneria Strutturale, Università di Roma "La Sapienza",
 Via Eudossiana 18, 00184 Roma, Italia;
 P.S.: Laboratoire d'Analyse Non Linéaire Appliquée,
 Université de Toulon et du Var, 83957 La Garde Cedex, France.

Edge Contact Forces and Quasi-Balanced Power

F.dell'Isola

Dipartimento di Ingegneria Strutturale e Geotecnica
 Università di Roma "La Sapienza", Via Eudossiana 18, 00184 Roma, Italia

and

P.Seppecher

Laboratoire d'Analyse Non Linéaire Appliquée
 Université de Toulon et du Var, 83957 La Garde Cedex, France

Abstract. We consider continuous media in which contact edge forces are present. Introducing the notion of quasi-balanced contact force distribution, we are able to prove the conjectures made by Noll and Virga [1] concerning the representation of contact edge forces. We first generalise the Noll theorem on Cauchy postulate. Then we adapt the celebrated tetrahedron construction due to Cauchy in order to find a representation theorem for stress states. Indeed we show that two stress tensors of order two and three are necessary for such a representation. Moreover we find the relationship between the notion of "interstitial working" introduced by Dunn and Serrin [2] and the notion of contact edge forces.

Sommario. Si considerano continui in cui sono presenti forze di contatto di spigolo. Una volta introdotta la nozione di distribuzione di forza di contatto quasi-bilanciata diventa possibile la dimostrazione delle congetture avanzate da Noll e Virga [1] riguardo la rappresentazione delle forze di spigolo. I nostri ragionamenti si basano sulla generalizzazione del teorema di Noll sul postulato di Cauchy e sulla rielaborazione della celebre costruzione del tetraedro di Cauchy. In tal modo è dimostrato un teorema di rappresentazione degli stati di tensione in cui appaiono due tensori uno del secondo, l'altro del terzo ordine. Come corollario di tale teorema di rappresentazione si determina la relazione fra la nozione di lavoro interstiziale (interstitial working) introdotta da Dunn e Serrin [2] e le forze di contatto di spigolo.

Key words: Continuum Mechanics, Contact Forces, Edge Forces, Interstitial Working

1 Introduction

A crucial concept in continuum mechanics is that of stress. Engineers working in strength of materials have used this concept so frequently that it has become as intuitive as the notion of force. However its introduction was not trivial, and was based on some fundamental assumptions whose weakening raises interesting problems. In this paper we address the case in which contact force interactions are due not only to a surface density, but also to a line density on the edges on the contact surface (if any).

Stress tensor and contact force are interrelated notions. Cauchy postulated (cf. [3],[4]) that the contact force exerted on a body can be represented by a surface density of forces on the contact surface depending only on the normal (and on the position). He then showed, using a family of tetrahedrons with vanishing size, that balance of force implies a linear dependence of surface density of contact force on the normal to the contact surface. The stress tensor is the representation of this linear function.

Noll [5] proved the Cauchy postulate assuming that the surface density of contact forces is bounded independently of the shape of the contact surface. In [1] Noll and Virga announced a generalisation under weaker hypotheses. In this paper, needing such a generalisation, we propose a proof (theorem 4) valid without assuming a priori that the contact force density is bounded independently of the shape of the contact surface.

The results of Cauchy and Noll strongly depend on the implicit assumption of vanishing contact edge forces. Noll and Virga in [1] developed a theory in which general edge contact interactions are considered. Here we limit ourselves to interactions between a body and its exterior so that the geometry of the problem is greatly simplified (for a discussion of the more general case see [6]). Moreover we limit our study to relatively regular contact surfaces (see section 2).

Noll and Virga [1] pointed out the lack of physical ground for some of the numerous assumptions they used to represent stress states. Here we face this difficulty by studying the power expended by contact forces. The theorem of kinetic energy states that the power of contact forces is balanced by the power of internal stresses, the power of inertial forces and the power of external body forces [3]. It is physically reasonable to assume that these three quantities are volume continuous. Therefore we assume that the power P_C^0 expended by contact force distribution against every C^∞ velocity field U is quasi-balanced: it exists a scalar K_U such that, for all body V , the inequality $P_C^0(V) < K_U |V|$ holds, $|V|$ denoting the volume of V .

The problem is now to determine a correct expression for the power of contact force. We first show that it cannot simply be the sum of the power of surface and edge forces. Then we show how the edge force can be present in conjunction with a supplementary mechanical energy supply. This supply corresponds to the "interstitial working" introduced by Dunn and Serrin [2] [7]. In the literature it is recognised that the modelling of some media needs the introduction of such a supply: this is the case, for instance, of Cahn-Hilliard fluids [8] [9]. However, to our knowledge, the hypothesis (made by Dunn and Serrin [2]) that this energy supply can be represented as a flux is nowhere justified. Moreover, the relationship between interstitial working and edge forces has not yet been pointed out, while we show in this paper that contact edge forces imply interstitial energy flux. We give also the possible forms of interstitial working when no edge force is present.

Instead of introducing the notion of interstitial working from the beginning, we prefer to describe mechanical contact interactions in terms of force distribution (which are not necessarily measures). This approach is close to the one of Dunn and Serrin. It seems to have the following advantages: i) we do not assume a priori that the supplementary energy supply is a flux, ii) the linear dependence of the supplementary energy supply on the velocity field is for us a basic assumption (for a discussion about this dependence, refer to [7]), so that the mechanical nature of interstitial working is clearly stated, iii) it makes clearer the nature of boundary conditions [10] [11].

Force distribution may be interpreted as the asymptotic limit of non local short range forces. Generally this limit is a distribution (in the mathematical sense) whose support is contained in the contact surface and whose order may be greater than zero. We give a trivial example of such an asymptotic analysis in section 4.1. Remark that the introduction of force distributions of order greater than zero is not new in continuum mechanics: e.g., in Cosserat [12] a surface density of couples (a special type of first order surface force distribution) is introduced.

From a mathematical point of view, the fundamental assumption of this paper (that surface and edge forces are present) can be stated as follows: the zero order part (with respect to the normal derivative) of contact force distribution is the sum of two measures absolutely continuous with respect to $\mathcal{H}^2(S^r)$ and $\mathcal{H}^1(L^r)$, where S^r is the regular part of the contact surface, L^r is the regular part of contact edges and \mathcal{H} denotes the Hausdorff measure. Indeed, a decomposition theorem for distributions whose support is a C^∞ manifold [13] uniquely determines the zero order part (with respect to transverse derivatives) of a contact distribution.

Section 3 is devoted to proving that such a sum of measures cannot be a quasi-balanced distribution unless the (line) measure on the edges vanishes.

In section 4 we add to the quoted sum of measures a distribution which is of order one in the transverse derivative. Such a term was first introduced by Germain [14] [15], who called it surface normal double traction. Under the assumption of quasi-balance of the contact force distribution we find the relationship between surface normal double traction and contact edge force. This relationship complements the relationship between edge force and the dependence of surface force on surface curvature pointed out in [1]. We show that: i) the transverse distribution depends only on the normal to the surface (Theorem 6), ii) there exists a three tensor field C (a hyper-stress tensor) which represents the transverse distribution (Theorem 7), iii) edge force is expressed in term of the tensor C , and depends on the shape of the contact edge only through the dihedron tangent to the surface (Theorem 8), iv) there exists a two-tensor field T (ordinary stress tensor) which determines that part of the surface contact force which depends linearly on the normal to the contact surface (Theorem 9), the remaining part being determined by C .

2 Hypotheses and notations

We want to describe contact forces exerted on a body through its boundary S (the contact surface). We are interested in their dependence on the shape of S . Then we have to define precisely what we call shape of S at a point $x \in S$.

We say that the shape of the oriented surface S at the point $x \in S$ is the same as the shape of S' at the point $x' \in S'$ if and only if there exists a neighbourhood of the origin O in which $t_{O-x}(S)$ coincides (as an oriented surface) with $t_{O-x'}(S')$ (t_u denoting the translation by the vector u).

Definition 1. We call shape of S at the point $x \in S$ the equivalence class of

(S, x) in the quoted relation. We denote it (\widetilde{S}, x) . Note that, according to this definition, rotations change shape.

Definition 2. *Plane shape:* The shape of a plane P at the point x depends only on the normal n to the plane. When there is no ambiguity we denote it simply by n .

Definition 3. *Dihedral shape:* Let us consider a non degenerate dihedron. We denote by n_1 and n_2 the normals to the half-planes forming it, and by ν_1 and ν_2 the external normals to these half-planes tangent to the planes. We denote by τ the unit vector tangent to the edge such that $\nu_1 = \tau \times n_1$ and $\nu_2 = -\tau \times n_2$. On the edge of this dihedron, the shape is constant and is determined by n_1, n_2 and τ . This shape is denoted by (n_1, n_2, τ) . Remark that $(n_1, n_2, \tau) = (n_2, n_1, -\tau)$. The angle $(-n_1, n_2)$ following τ is called dihedral angle of (n_1, n_2, τ) . This angle is different from $0, \pi$ or 2π .

Definition 4. *Cuts:* In this paper we will call domains the sets which are closures of open Kellog regular regions (see Truesdell [3]). Let V and V' be two domains whose boundaries are the surfaces S and S' . Let S'' be the boundary of $V \cap V'$. At each point x in $S \cap S' \cap S''$ the shape of S'' depends only on the shape of S and S' . We denote the shape of S'' by $Cut((\widetilde{S}, x), (\widetilde{S}', x))$.

Remark: We will only use cuts of S with surfaces whose shape is a plane shape u . We call them *plane cuts* and denote them by $Cut((\widetilde{S}, x), u)$. In the following proofs we will always deal with surfaces which are boundaries of Kellog regular regions, also when these surfaces are obtained by means of cuttings.

Definition 5. *Admissible domains:* We study a bounded continuum and we only consider subdomains whose boundary S (*admissible surface*) is a finite union of two-dimensional C^∞ compact manifolds with boundary (called *faces* of S) and such that the union of the boundaries of these faces is a finite union of one-dimensional C^∞ compact manifolds with boundary (called *edges* of S). The set of all internal points of the faces (*regular points of the surface* or points where S has *regular shape*) is denoted S^r and the set of all internal points of the edges (*regular points of the edges* or points where S has *edge shape*) is denoted L^r . Moreover we assume that, everywhere in L^r , S is tangent to a non degenerate dihedron.

Definition 6. *Sets of shapes:* Let S be an admissible surface. We denote by $\Phi^r(S)$ the set of all regular shapes on S and by $\Phi^e(S)$ the set of all edge shapes of S :

$$\Phi^r(S) = \{(\widetilde{S}, x); x \in S^r\} \quad \Phi^e(S) = \{(\widetilde{S}, x); x \in L^r\}$$

As vertices are not involved in our reasoning we will call *set of shapes* of a surface S the set $\Phi(S) = \Phi^r(S) \cup \Phi^e(S)$.

Definition 7. *Prescribed shapes:* A set of shapes E is called a set of prescribed shapes if there exists a finite set $\{S_1, \dots, S_m\}$ of admissible surfaces such that $E \subset \bigcup_{i=1}^m \Phi(S_i)$.

Examples: for $t \in]0, 1]$, the family of cubes C_t images of a cube C_1 under an homothetic transformation of ratio t have prescribed shapes; the family of cubes C_t image of a cube C_1 under a rotation of angle t around the axis u have not prescribed shapes; the family of spheres S_t of centre x_0 and radius t have not prescribed shapes.

A set of shapes E is called a set of *prescribed plane cuts* if there exist a finite sequence (S_i) of admissible surfaces and a finite sequence (u_j) of unit vectors such that:

$$E \subset \bigcup_{i,j} \{Cut(f, u_j); f \in \Phi^r(S_i)\}$$

Remark: These definitions are urged by the lack of topological structure on the set of shapes and by the need of considering surface contact forces depending continuously on curvature. Such forces will be bounded on a set of prescribed shapes but not on the set of all shapes.

Definition 8. *Contact force:* The contact forces F^c exerted on any admissible domain V through its boundary S will be determined by two vector functions F and \mathcal{F} defined respectively on any face or edge of V :

$$F^c(V) = \int_{S^r} F(x, (\widetilde{S}, x)) ds + \int_{L^r} \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x)) dl \quad (1)$$

Remark: we assume that F and \mathcal{F} depend only on the position x and on the shape of S at x .

Remark: We do not assume uniform boundedness of these forces with respect to all possible shapes.

Remark: A priori, \mathcal{F} may depend not only on the geometrical properties of the edge but also on the limit geometrical properties of the faces whose common boundary is the considered edge.

Regularity assumptions. In the same way as the Cauchy's construction of the stress tensor presumes the continuity of contact forces, our study needs the following regularity hypotheses:

i) On any face and edge of an admissible surface, $F(x, (\widetilde{S}, x))$ and $\mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x))$ depend continuously on x .

ii) Let E be a set of prescribed shapes or prescribed plane cuts. We partition E into the two disjoint subsets E^e and E^r which contain respectively the edge and regular shapes in E . We assume the equi-continuity of the families of functions $\{F(\cdot, f) : f \in E^r\}$ and $\{\mathcal{F}(\cdot, f) : f \in E^e\}$ that is, we assume that for all $\varepsilon > 0$, for all x_0 , there exists a ball $B_\eta(x_0)$ of radius $\eta > 0$ such that, $\forall x \in B_\eta(x_0)$,

$$\forall f \in E^r, \|F(x, f) - F(x_0, f)\| < \varepsilon \quad \text{and} \quad \forall f \in E^e, \|\mathcal{F}(x, f) - \mathcal{F}(x_0, f)\| < \varepsilon$$

iii) Let S be a given face of an admissible surface, let u be a unit vector nowhere parallel to the normal to S . We assume that $\mathcal{F}(x, Cut((\widetilde{S}, x), u))$ is a continuous



function of the variable x : $\forall \varepsilon > 0, \forall x_0 \in S, \exists \eta > 0 : \forall x \in S,$

$$\|x - x_0\| < \eta \implies \|\mathcal{F}(x, \text{Cut}(\widetilde{S}, x), u) - \mathcal{F}(x_0, \text{Cut}(\widetilde{S}, x_0), u)\| < \varepsilon.$$

Proposition 1: Let S and L be a face and an edge of an admissible surface, let u be a unit vector nowhere parallel to the normal to S and let B be a compact set. The function $F(x, (\widetilde{S}, y)), \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, y))$ and $\mathcal{F}(x, \text{Cut}(\widetilde{S}, y), u)$ are uniformly continuous on $B \times (B \cap S), B \times (B \cap L)$ and $B \times (B \cap S)$. To prove the first part of this proposition let us denote the translated surface $S' = t_{x-y}(S)$ and the translated point $t' = t_{x-y}(t)$. It is then enough to remark that

$$\begin{aligned} \|F(x, (\widetilde{S}, y)) - F(z, (\widetilde{S}, t))\| &= \|F(x, (\widetilde{S}', x)) - F(z, (\widetilde{S}', t'))\| \leq \\ &\leq \|F(x, (\widetilde{S}', x)) - F(t', (\widetilde{S}', t'))\| + \|F(t', (\widetilde{S}', t')) - F(z, (\widetilde{S}', t'))\| \end{aligned}$$

and to use the equi-uniform continuity (ii) and the uniform continuity (i). The same reasoning holds for $\mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, y))$ or for $\mathcal{F}(x, \text{Cut}(\widetilde{S}, y), u)$.

Proposition 2: The regularity hypotheses imply the uniform boundedness of $F(x, (\widetilde{S}, x))$ and $\mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x))$ on every family of admissible surfaces whose shapes are prescribed shapes or prescribed plane cuts.

Indeed, Proposition 1 implies that, for every admissible surface $S, F(x, (\widetilde{S}, y)), \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, y))$ and $\mathcal{F}(x, \text{Cut}(\widetilde{S}, y), u)$ are bounded respectively on $B \times (B \cap S'), B \times (B \cap L')$ and $B \times (B \cap S')$. The proposition is proved recalling the definition of prescribed shapes and prescribed plane cuts.

Remark: Proposition 2 states the relative compactness of the families $\{F(x, f) : f \in E^r\}$ and $\{\mathcal{F}(x, f) : f \in E^e\}$ (Corollary of Arzelá-Ascoli theorem [16]).

Remark: Our hypotheses do not imply the uniform boundedness of the forces for all possible shapes. For instance, we allow for any continuous dependence on the curvature tensor or on any other higher order shape operator of the contact surface.

3 A Seeming Impossibility For Edge Forces

An important assumption for obtaining restrictions upon the dependence of contact forces on shape is the hypothesis of "quasi-balance of contact forces" [1], [17]. It states that there exists a scalar K such that, for any admissible domain V the following inequality holds:

$$\|F^c(V)\| < K|V|. \quad (2)$$

We strengthen the preceding hypothesis, assuming that the power P_U^c of contact forces distribution in \mathfrak{a} , given C^∞ velocity field U is quasi-balanced. Then, for every C^∞ field U , we assume the existence of a constant K_U such that, for every admissible domain V , the following inequality holds:

$$|P_U^c(V)| = \left| \int_{S^r} F(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot U(x) ds + \int_{L^r} \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot U(x) dl \right| < K_U |V|. \quad (3)$$

Remark: The fact that this hypothesis is stronger than the preceding one can be verified by considering three linearly independent constant fields U . We do not need any assumption on the behaviour of K_U with respect to U .

Remark: The quasi-balance of torque can be obtained by considering three independent rigid motion velocity fields.

As hypothesis (3) is stronger than (2) it will imply strict restrictions upon possible dependence of contact forces on shape. Our goal is to study its consequences for the functions F and \mathcal{F} . We begin by considering edges whose shape is dihedral. In a second step we extend our result to generic edges.

3.1 FORCES ON DIHEDRAL EDGES

Theorem 1 *Inequality (3) is not compatible with the presence of contact line forces on dihedral edges: for each dihedral shape d*

$$\mathcal{F}(\cdot, d) \equiv 0. \quad (4)$$

Proof: Let $d = (n_1, n_2, \tau)$. We use orthogonal co-ordinate system (x_0, e_1, e_2, e_3) (with $e_2 = \tau$ and $e_3 = \frac{n_1 + n_2}{\|n_1 + n_2\|}$). For every positive integer N (large enough), we consider a domain V_N of boundary S_N . It is a thin slab with a grooved upper surface (see figure 1). This domain is a polyhedron conceived in such a way that the set of shapes of its boundary is finite and does not depend on N (This set contains exactly 7 different plane shapes and 16 different dihedral shapes). Its volume $|V_N|$ is of the same order as N^{-4} when N tends to infinity; the total area of its boundary $|S_N|$ is of the same order as N^{-2} . Let us define the following unions of edges: $L_N^1 = \{x \in S_N : (\widetilde{S}, x) = (n_1, n_2, \tau)\}$, $L_N^2 = \{x \in S_N : (\widetilde{S}, x) = (n_2, n_1, \tau)\}$ and $L_N^3 = L_N \setminus (L_N^1 \cup L_N^2)$. The total length of L_N^3 is of the same order as N^{-1} and the total lengths of L_N^1 and L_N^2 tend to 1. Then the forces on the double array of edges $L_N^1 \cup L_N^2$ are dominant. As the shapes of V_N are prescribed then contact force densities are bounded independently of N . Inequality (2) applied to V_N implies:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \int_{L_N^1} \mathcal{F}(x, (n_1, n_2, \tau)) dl + \int_{L_N^2} \mathcal{F}(x, (n_2, n_1, \tau)) dl \right\} = 0.$$

Using mean value theorem for each component of the last equality and again the continuity of \mathcal{F} with respect to x we get a special case of the action-reaction principle:

$$\mathcal{F}(x_0, (n_1, n_2, \tau)) = -\mathcal{F}(x_0, (n_2, n_1, \tau)). \quad (5)$$

Consider the field $U : x \rightarrow (x \cdot e_3) U_0$, U_0 being any vector. On V_N , $N^2 U$ is bounded independently of N . The same reasoning as before shows that inequality

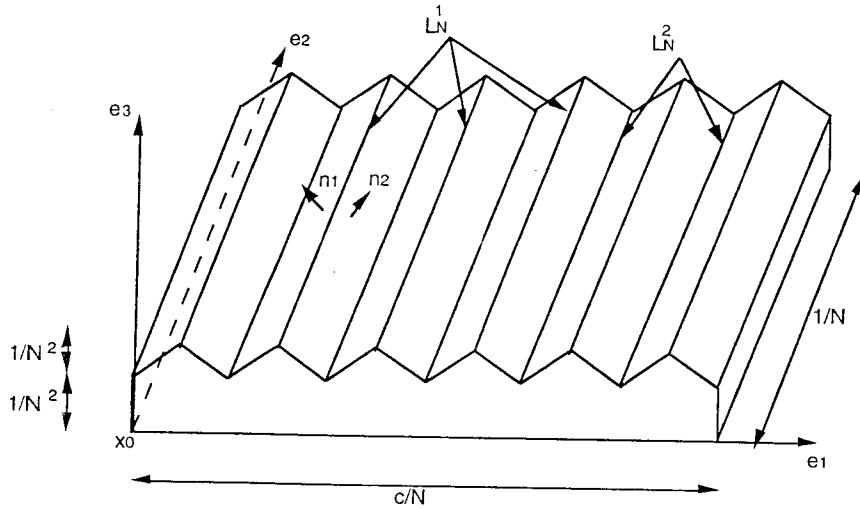


Figure 1. Grooved surface close to a plane

(3) implies:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} N^2 \left\{ \int_{L_N^1} \mathcal{F}(x, (n_1, n_2, \tau)) \cdot U(x) \, dl + \int_{L_N^2} \mathcal{F}(x, (n_2, n_1, \tau)) \cdot U(x) \, dl \right\} = 0.$$

On L_N^1 and L_N^2 , $N^2 U$ does not depend neither on N nor on x as it is equal respectively to U_0 and $2U_0$. Then, we obtain, because of arbitrariness of U_0 :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \int_{L_N^1} \mathcal{F}(x, (n_1, n_2, \tau)) \, dl + 2 \int_{L_N^2} \mathcal{F}(x, (n_2, n_1, \tau)) \, dl \right\} = 0.$$

Using the continuity of \mathcal{F} with respect to x , the mean value theorem for each component of the previous equality and equation (5) we get

$$\mathcal{F}(x_0, (n_1, n_2, \tau)) = 0.$$

□

Remark: This proof is not the simplest one (see the proof of Theorem 2). However we decide to present it here because it is suggestive: in our construction it is shown that a limit of pairs of opposite edge forces cannot be quasi-balanced. In fact we will see (section 4) that another type of force distribution has to be present on the

lower surface. Our construction illustrates the name "double forces" or "double normal traction" given by Germain [14] to such a distribution.

Remark: The existence of the constant K_U allows us to prove the equation after equation (5). In all subsequent reasonings K_U does not appear anymore, and its dependence on U is immaterial.

3.2 FORCES ON GENERAL EDGES

Theorem 2 Let S be an admissible surface, inequality (3) implies that, at every regular point of an edge x_0 , we have:

$$\mathcal{F}(x_0, (\widetilde{S}, x_0)) = 0. \quad (6)$$

(Inequality (3) is not compatible with the existence of contact edge forces)

Proof: Let V be an admissible domain whose boundary S contains an edge L , let x_0 be a regular point of this edge. S is tangent at the point x_0 to the dihedral shape (n_1, n_2, τ) . In this proof we consider the case when the dihedral angle belongs to $]0, \pi[$ (The proof has to be slightly modified if the angle is greater than π). We use the co-ordinate system (x_0, e_1, e_2, e_3) (with $e_2 = \tau$ and $e_3 = \frac{n_1 + n_2}{\|n_1 + n_2\|}$). For any $\varepsilon > 0$, let us translate V of vector $\varepsilon^2 e_3$: $V' = t_{\varepsilon^2 e_3}(V)$, $S' = t_{\varepsilon^2 e_3}(S)$, $L' = t_{\varepsilon^2 e_3}(L)$ and let us define V_ε as the intersection of the domain V' and of the parallelepiped $P_\varepsilon = [-c\varepsilon^2, c\varepsilon^2] \times [0, \ell\varepsilon] \times [0, 2\varepsilon^2]$ (cf. figure 2). The dihedral angle belongs to $]0, \pi[$ and the curvatures of the faces of S and of the edge L are bounded. Then c and ℓ may be chosen in such a way that, for ε small enough: i) L' meets ∂P_ε on the lateral surfaces $\{x.e_2 = 0\}$ and $\{x.e_2 = \ell\varepsilon\}$, then at every point x on $L' \cap P_\varepsilon$, $x.e_3 > 0$ holds, ii) S' meets ∂P_ε on lateral surfaces $\{x.e_2 = 0\}$, $\{x.e_2 = \ell\varepsilon\}$ and on the lower surface $\{x.e_3 = 0\}$. These properties are represented in figure 2. We denote by S_ε the boundary of V_ε and by L_ε the upper edge of V_ε ($L_\varepsilon = L' \cap P_\varepsilon$). The shapes of the boundary S_ε of V_ε are either prescribed shapes or prescribed plane cuts. Then the surface force density F and the line force density \mathcal{F} are bounded independently of ε .

Let us consider the vector field $U : x \rightarrow (x.e_3) U_0$, U_0 being any vector. The geometry of V_ε assures that $\varepsilon^{-2} U$ is bounded independently of ε . On the other hand, as U vanishes on the plane (x_0, e_1, e_2) , we do not have to consider the forces exerted on the edges which are included in this plane. Considering the measure of each face and edge, we get from inequality (3):

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^{-3} \left\{ \int_{L_\varepsilon} \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}_\varepsilon, x)) \cdot U(x) \, dl \right\} = 0.$$

The length of L_ε is $\ell\varepsilon$ to within higher order terms. On the other hand, there exists a positive scalar k (depending on the curvature of the edge at x_0 and on ℓ but independent of ε) such that

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^{-3} \int_{L_\varepsilon} (x.e_3) \, dl = k.$$

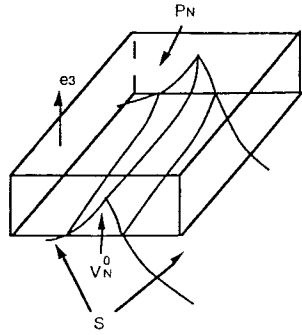


Figure 2. The vicinity of an edge

Let $\delta > 0$, the geometry of the domain and proposition 1 -consequence of the regularity assumptions- imply that, for ϵ small enough,

$$\forall x \in L_\epsilon, \quad \| \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}_\epsilon, x)) - \mathcal{F}(x_0, (\widetilde{S}, x_0)) \| < \delta .$$

Then

$$\left| k \mathcal{F}(x_0, (\widetilde{S}, x_0)) \cdot U_0 - \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^{-3} \left\{ \int_{L_\epsilon} \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}_\epsilon, x)) \cdot U(x) dl \right\} \right| < k \delta \| U_0 \| .$$

This result holds for any δ and for any U_0 , so that:

$$\mathcal{F}(x_0, (\widetilde{S}, x_0)) = 0 .$$

□

3.3 NOLL THEOREM

Theorem 2 states that there is no contact edge forces. Then Noll theorem can be proved. Here we give a proof valid in the case when the surface contact force density is not bounded independently of the considered contact surface (for instance, our assumptions do not exclude, a priori, a linear dependence of the contact force on the curvature of contact surface). We just have to modify the proof of Noll theorem reproduced in [3] by using a cylinder whose basis is a square instead of a circle. Then we use only prescribed shapes (in the sense defined in section 2). In the proof of Noll theorem as in the proof of Cauchy theorem we do not use assumption (3) but only assumption (2).

Theorem 3 *When no edge forces are present and under the regularity assumptions listed in section 2, for all regular shape f tangent to the plane shape n we have*

$$F(x, f) = F(x, n) . \tag{7}$$

Proof: Let S be the boundary of an admissible domain V and let x_0 be a regular point of S^r . We call n_0 the normal to S at x_0 . We use the co-ordinate system (x_0, e_1, e_2, e_3) (with $e_3 = n_0$). Let us consider the family of parallelepipeds $C_\epsilon = [0, \epsilon] \times [0, \epsilon] \times [-c\epsilon^2, +c\epsilon^2]$. We define $V_\epsilon = V \cap C_\epsilon$ and $S_\epsilon = S \cap C_\epsilon$. As the curvature of S is bounded in a neighbourhood of x_0 , a positive scalar c can be found such that, for ϵ sufficiently small, S_ϵ does not intersect the upper face ($S^+ = \{x_3 = c\epsilon^2\}$) or the lower face ($S^- = \{x_3 = -c\epsilon^2\}$) of C_ϵ . (cf. figure 3). The shapes of the boundary of V_ϵ are either prescribed shapes or prescribed plane cuts.

Inequality (2) when applied to C_ϵ implies:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^{-2} \int_{S^+} F(x, n_0) ds + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^{-2} \int_{S^-} F(x, -n_0) ds = 0$$

which together with regularity assumptions leads to

$$F(x, n_0) = -F(x, -n_0) \tag{8}$$

Inequality (2) when applied to V_ϵ implies:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^{-2} \int_{S_\epsilon} F(x, (\widetilde{S}, x)) ds + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^{-2} \int_{S^-} F(x, -n_0) ds = 0$$

which together with regularity assumptions lead to

$$F(x_0, (\widetilde{S}, x_0)) + F(x_0, -n_0) = 0 .$$

Equation (7) is then obtained when recalling (8). □

3.4 CAUCHY THEOREM

Theorem 2 states that there is no contact edge forces. Then the Cauchy's construction of stress tensor (refer to [3] [4]) is valid.

Theorem 4 *When no edge force is present, there exists a continuous two-tensor field T such that, for any plane shape n ,*

$$F(x, n) = T(x) \cdot n . \tag{9}$$

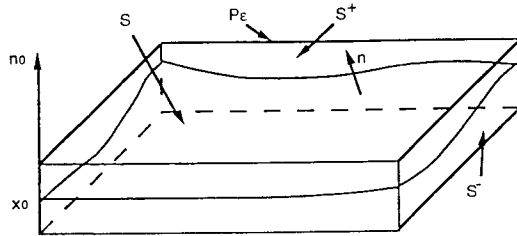


Figure 3. The domain used in the proof of Noll theorem

4 Contact Force Distribution of Order One with respect to Transverse Derivative

4.1 ON CONTACT FORCE DISTRIBUTIONS OF ORDER ONE WITH RESPECT TO TRANSVERSE DERIVATIVE, EXAMPLES, HYPOTHESES

The previous section has shown the impossibility of introducing contact edge forces under the assumption (3). The idea we will develop now is the following: the power of contact force distribution is actually quasi-balanced but the expression for this power used in inequality (3) is naive, the contact force distribution must be endowed with a more complex structure. We assume that $F(x, (\widetilde{S}, x))$ and $\mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x))$ represent only the zero order part of a more general distribution whose support is S . In this paper we add to the considered distribution another one whose order is one with respect to transverse derivative of test functions. More precisely we add a distribution whose value at a vector field U is $\int_{S^r} G(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot \frac{\partial U}{\partial n^i}(x) ds$.

A decomposition theorem [13] states that every distribution D whose support is a smooth surface (i.e. a C^∞ submanifold of codimension one) can be decomposed as follows:

$$DU = \sum_{i=0}^N D_i \left(\frac{\partial^i U}{\partial n^i} \right) \quad (10)$$

where D_i are uniquely determined surface distributions. We limit ourselves to distributions of order one ($N = 1$) and we postpone the discussion on the influence of higher order distributions until section 5.

Let us remark that, from a physical point of view, the introduction of a contact force distribution "1-transverse" can be interpreted as follows: in the balance of energy an additional term is needed which does not appear in the balance of forces. An alternative approach satisfying this need is due to Dunn and Serrin [2], who introduced directly a supplementary flux of energy ("interstitial working"). Our presentation, based on the concept of distributions has the following features: i) it does not assume a priori that the extra energetic term is a flux, ii) it shows the mechanical nature of this term, its linear dependence on the velocity field being a basic assumption, iii) it naturally yields general and physically meaningful boundary conditions [10].

Most mechanicians will not be surprised by the introduction of contact forces distributions (in the mathematical sense) as contact couples are needed already in the standard theories of beams and shells. Another example of "1-transverse" contact forces distribution found in the literature (this time for 3-D continua) is given by couple stresses introduced by Cosserat [12]. The microscopic meaning of a distribution of order greater than zero can be understood by considering the asymptotic limit of non-local short range interactions¹.

Then we relax the hypothesis formulated in section 3, in order to allow the presence of a "1-transverse" distribution on the boundary S of an admissible domain V . Contact forces interaction is described, in addition to $F(x, (\widetilde{S}, x))$ and $\mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x))$ introduced in section 2, by a surface density $G(x, (\widetilde{S}, x))$ on the regular part of the contact surface. The power $P_{\mathcal{E}}^1(V)$ of this interaction in a velocity field U is given by the following expression:

$$\int_{S^r} G(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot \frac{\partial U}{\partial n}(x) ds + \int_{S^r} F(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot U(x) ds + \int_{L^r} \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot U(x) dl.$$

We assume the same regularity properties for G as we did for F in section 2.

The assumption of "quasi-balance" of contact forces distribution becomes: for all C^∞ field U , there exists a scalar K_U such that, for any admissible domain V ,

¹ A trivial example of non-local short range forces converging to a "1-transverse" distribution:

Using the Cartesian co-ordinates (x_1, x_2, x_3) , the domain $V = \{x : x_1 < 0\}$ is divided from the external world by the plane $S = \{x : x_1 = 0\}$. Assume that the external forces exerted on V have short range $\varepsilon \ll 1$ (compared with some other characteristic length) and that these forces are represented by the volume density $f_\varepsilon(x) = f_0 \varepsilon^{-\gamma} \varphi(\varepsilon^{-1} x_1)$ where φ is a function whose support is a compact set included in $]-\infty, 0[$ and f_0 is a given vector. If $\gamma = 1$ and φ is a non negative function whose integral is equal to 1, the distribution tends, as ε tends to 0, to the vector measure on S whose surface density is f_0 : this is the classical case of surface force density. However, if $\gamma = 2$ and φ is the derivative of a non negative function whose integral is equal to 1, the distribution tends to a "1-transverse" distribution D such that $D(U) = \int_S f_0 \cdot \frac{\partial U}{\partial x_1} ds$. This force distribution i) is localized on S , ii) has no influence upon balance of forces, iii) supplies energy in presence of velocity fields in V , even when these fields vanish on S .

we have:

$$\left| \int_{S^r} G(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot \frac{\partial U}{\partial n}(x) ds + \int_{S^r} F(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot U(x) ds + \int_{L^r} \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot U(x) dl \right| < K_U |V|. \quad (11)$$

Remark: This assumption is less stringent on \mathcal{F} than the corresponding hypothesis (3). It will imply less Draconian restrictions upon edge contact forces.

Remark: The fact that (11) is stronger than the quasi-balance of forces (2) is still true (it can be verified by considering three linearly independent constant fields U). Again, we do not need any assumption on the behaviour of K_U with respect to U .

Remark: Note that, in each proof in this paper, we pass to the limit in inequality (11) with a fixed field U . That is why we do not need any assumption on the behaviour of K_U with respect to U .

4.2 DEPENDENCE OF TRANSVERSE DISTRIBUTION ON THE SHAPE OF THE CONTACT SURFACE, A THEOREM ANALOGUOUS TO NOLL THEOREM.

We first prove an action-reaction principle which, at this stage, concerns only plane shapes.

Theorem 5 *At every point x and for all plane shape n we have:*

$$G(x, n) = G(x, -n). \quad (12)$$

Proof: Using the co-ordinate system (x_0, e_1, e_2, e_3) (with $e_3 = n$), let us consider the domain $C_\varepsilon = [0, \varepsilon] \times [0, \varepsilon] \times [0, \varepsilon^2]$ and the vectors field $U : x \rightarrow x.n U_0$ where U_0 is a given vector. The shapes of ∂C_ε are prescribed shapes. Moreover $\varepsilon^{-2}U$ is bounded on C_ε independently of ε . Considering the area or length of each face or edge, the inequality (11) applied to C_ε implies:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^{-2} \int_{S^+} G(x, n) U_0 ds + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^{-2} \int_{S^-} G(x, -n) \cdot (-U_0) ds = 0$$

where S^+ and S^- denote the upper and lower faces of P_ε ($S^+ = \{x : x.e_3 = +\varepsilon^2\}$, $S^- = \{x : x.e_3 = 0\}$). The continuity properties and the arbitrariness of U_0 imply:

$$G(x_0, n) = G(x_0, -n)$$

□

We are now able to prove a theorem for "1-transverse" distributions analogous to the theorem of Noll [3] [17].

Theorem 6 *At every point x and for every regular shape f tangent to the plane shape n we have*

$$G(x, f) = G(x, n). \quad (13)$$

(G depends on the shape of the contact surface only through its normal).

Proof: The proof is close to that we have given for Noll theorem. At a regular point x_0 of the boundary S of an admissible domain, we consider the family of domains V_ε described in the proof of Noll theorem or in figure 3. We consider the vector field $U : x \rightarrow x.n_0 U_0$ where n_0 denotes the normal to S at x_0 and U_0 is any vector. The shapes of ∂V_ε are either prescribed shapes or prescribed plane cuts. Moreover $\varepsilon^{-2}U$ is bounded in V_ε independently of ε . The inequality (11) applied to V_ε leads to

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^{-2} \int_{S \cap C_\varepsilon} G(x, (\widetilde{S}, x)) \cdot U_0(n.n_0) ds + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^{-2} \int_{S^-} G(x, -n_0) \cdot (-U_0) ds = 0$$

As $n.n_0$ is a continuous function with respect to x on S , the regularity properties and arbitrariness of U_0 imply

$$G(x_0, (\widetilde{S}, x_0)) = G(x_0, -n_0) = G(x_0, n_0).$$

□

4.3 A CAUCHY THEOREM FOR HYPERSTRESS

Theorem 7 *It exists a continuous three-tensor field C such that, at any point x_0 and for any plane shape n ,*

$$G(x_0, n) = (C(x_0).n).n. \quad (14)$$

Proof: We follow the tetrahedron construction due to Cauchy. In an orthonormal co-ordinate system (x_0, e_1, e_2, e_3) , we define the tetrahedron V whose faces S, S_1, S_2 and S_3 are respectively normal to $n, -e_1, -e_2$ and $-e_3$ and whose height (in the n direction) is h . In our construction the origin of the co-ordinate system belongs to the face S . We denote respectively by $f_1 = (-e_2, -e_3, e_1)$, $f_2 = (-e_3, -e_1, e_2)$ and $f_3 = (-e_1, -e_2, e_3)$ the shapes of the edges L_1, L_2 , and L_3 . Let V_ε be the image of V under an homothetic transformation of ratio ε , we denote by $S_\varepsilon, S_{i\varepsilon}$ and $L_{i\varepsilon}$ the faces and edges images of S, S_i and L_i ($i = 1, 2, 3$) under this transformation. We consider the field $U : x \rightarrow (x.n)U_0$, where U_0 is any vector. As this field vanishes on S_ε , the inequality (11) applied to the domain V_ε implies

$$\left| \sum_{i=1}^3 \left\{ \int_{S_{i\varepsilon}} (x.n) F(x, -e_i) \cdot U_0 ds \right\} + \sum_{i=1}^3 \left\{ \int_{L_{i\varepsilon}} (x.n) \mathcal{F}(x, f_i) \cdot U_0 dl \right\} + \sum_{i=1}^3 \left\{ \int_{S_{i\varepsilon}} (-e_i.n) G(x, -e_i) \cdot U_0 ds \right\} + \int_{S_\varepsilon} G(x, n) \cdot U_0 ds \right| < K\varepsilon^3.$$

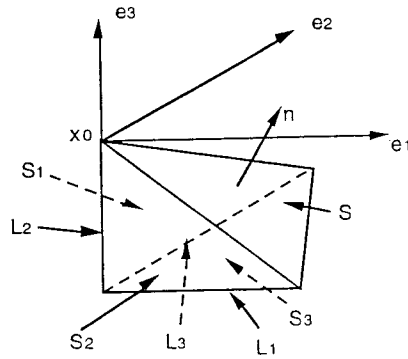


Figure 4. Cauchy's tetrahedron

Let us multiply this inequality by ε^{-2} and, changing variables in the integrals in order to transform them into integrals on the boundary of V :

$$\left| \varepsilon \sum_{i=1}^3 \left\{ \int_{S_i} (x, n) F(\varepsilon x, -e_i) \cdot U_0 ds \right\} + \sum_{i=1}^3 \left\{ \int_{L_i} (x, n) \mathcal{F}(\varepsilon x, f_i) \cdot U_0 dl \right\} + \sum_{i=1}^3 \left\{ \int_{S_i} (-e_i, n) G(\varepsilon x, -e_i) \cdot U_0 ds \right\} + \int_S G(\varepsilon x, n) \cdot U_0 ds \right| < K\varepsilon.$$

As $F(\cdot, f)$ and $\mathcal{F}(\cdot, f)$ are continuous, evaluating the limit as ε tends to 0, we get

$$\sum_{i=1}^3 \left\{ \mathcal{F}(x_0, f_i) \cdot U_0 \int_{L_i} (x, n) dl \right\} + \sum_{i=1}^3 \left\{ |S_i| (-e_i, n) G(x_0, -e_i) \cdot U_0 \right\} + |S| G(x_0, n) \cdot U_0 = 0$$

This being valid for any U_0 , we obtain:

$$2 |S| G(x_0, n) = \sum_{i=1}^3 \left\{ \mathcal{F}(x_0, f_i)(n, e_i) |L_i|^2 \right\} + 2 \sum_{i=1}^3 \left\{ G(x_0, -e_i) |S_i| (n, e_i) \right\}.$$

Using the geometrical relationships:

$$h = |L_1| (n, e_1) = |L_2| (n, e_2) = |L_3| (n, e_3),$$

$$2 |S| h = 2 |S_1| |L_1| = 2 |S_2| |L_2| = 2 |S_3| |L_3| = |L_1| |L_2| |L_3|$$

and theorem 5 we get

$$G(x_0, n) = \mathcal{F}(x_0, f_1)(n, e_2)(n, e_3) + \mathcal{F}(x_0, f_2)(n, e_3)(n, e_1) + \mathcal{F}(x_0, f_3)(n, e_1)(n, e_2) + \sum_{i=1}^3 \left\{ G(x_0, e_i)(n, e_i)^2 \right\}. \quad (15)$$

Thus we are led to define a three-tensor field C such that $G(x_0, n) = (C(x_0) \cdot n) \cdot n$. This tensor is not uniquely determined as only its right side products by symmetric two order tensors are determined. We may impose its right side symmetry, setting:

$$C(x) = \frac{1}{2} \mathcal{F}(x, f_1) \otimes (e_2 \otimes e_3 + e_3 \otimes e_2) + \frac{1}{2} \mathcal{F}(x, f_2) \otimes (e_3 \otimes e_1 + e_1 \otimes e_3) + \frac{1}{2} \mathcal{F}(x, f_3) \otimes (e_1 \otimes e_2 + e_2 \otimes e_1) + \sum_{i=1}^3 \left\{ G(x, e_i) \otimes e_i \otimes e_i \right\}. \quad (16)$$

or its left side symmetry, setting:

$$C(x) = \frac{1}{2} \mathcal{F}(x, f_1) \otimes (e_2 \otimes e_3 + e_3 \otimes e_2) - \frac{1}{2} (e_2 \otimes e_3 + e_3 \otimes e_2) \otimes \mathcal{F}(x, f_1) + \frac{1}{2} (e_2 \otimes \mathcal{F}(x, f_1) \otimes e_3 + e_3 \otimes \mathcal{F}(x, f_1) \otimes e_2) + \frac{1}{2} \mathcal{F}(x, f_2) \otimes (e_3 \otimes e_1 + e_1 \otimes e_3) - \frac{1}{2} (e_3 \otimes e_1 + e_1 \otimes e_3) \otimes \mathcal{F}(x, f_2) + \frac{1}{2} (e_3 \otimes \mathcal{F}(x, f_2) \otimes e_1 + e_1 \otimes \mathcal{F}(x, f_2) \otimes e_3) + \frac{1}{2} \mathcal{F}(x, f_3) \otimes (e_1 \otimes e_2 + e_2 \otimes e_1) - \frac{1}{2} (e_1 \otimes e_2 + e_2 \otimes e_1) \otimes \mathcal{F}(x, f_3) + \frac{1}{2} (e_1 \otimes \mathcal{F}(x, f_3) \otimes e_2 + e_2 \otimes \mathcal{F}(x, f_3) \otimes e_1) + \sum_{i=1}^3 \left\{ G(x, e_i) \otimes e_i \otimes e_i - G(x, e_i) \otimes e_i \otimes e_i + e_i \otimes G(x, e_i) \otimes e_i \right\}. \quad (17)$$

□

Remark 1: The tensor C will be called the hyperstress tensor.

Remark 2: Imposing the left side symmetry of C seems complicate [18] and artificial but Theorem 9 will show the advantage of such a definition.

Remark 3: Equation (15) reduces to $G(x_0, n) = \sum_{i=1}^3 \left\{ G(x_0, e_i)(n, e_i)^2 \right\}$ when \mathcal{F} is vanishing. As this expression is valid for every orthonormal vector basis (e_1, e_2, e_3) , then G does not depend on n : this is the only case in which the 1-transverse distribution can be non-zero with vanishing edge forces.

4.4 REPRESENTATION THEOREMS FOR CONTACT FORCES, CAUCHY STRESS TENSOR

In this section we add the following:

Hypothesis of C^1 regularity: For every given regular shape f and every dihedral shape d , $G(\cdot, f)$ and $\mathcal{F}(\cdot, d)$ are C^1 functions. In this way $C(x)$ is a field of class C^1 .

We now can show how our hypothesis (11), which implies hypothesis (2) put forward by Noll and Virga, allows us to propose a solution of the open problem pointed out by Noll and Virga when stating their assumption III on page 21 of [1], and to show that the example they treated in their section 9 actually exhausts all possible cases.

Theorem 8 Let S be the boundary of an admissible domain V . Let x be a regular point of an edge of S . Let (n_1, n_2, τ) be the tangent dihedral shape to S at x . Then the edge force density at x depends only on (n_1, n_2, τ) and is represented in terms of the second order stress tensor by

$$\mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x)) = (C(x).n_1).\nu_1 + (C(x).n_2).\nu_2 \quad (18)$$

where we denote $\nu_1 = \tau \times n_1$ and $\nu_2 = -\tau \times n_2$

Remark: The arbitrariness in C has no influence on the representation formula (18) as $n_1 \otimes \nu_1 + n_2 \otimes \nu_2$ is a symmetric tensor.

Theorem 9 It exists a continuous second order tensor field T such that

$$F(x, (\widetilde{S}, x)) = T(x).n - \nabla^s.((C(x).n).\Pi) \quad (19)$$

where Π denotes the projector on the tangent plane to the surface ($\Pi = Id - n \otimes n$) and ∇^s the surface divergence.

Remark: The arbitrariness in C has an influence on T . With the choice (17), the tensor T is symmetric.

Proof of theorems 8 and 9: Because of theorem 7, inequality (11) may be written

$$\left| \int_{L^r} (\mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x)).U(x)) dl + \int_{S^r} F(x, (\widetilde{S}, x)).U(x) ds + \int_{S^r} ((C(x).n).n).\frac{\partial U}{\partial n}(x) ds \right| < K_U |V|.$$

Due to the inequality

$$\left| \int_V \text{div}(\nabla U : C) dv \right| = \left| \int_{S^r} \nabla U : (C.n) ds \right| < H_U |V| \quad (20)$$

the quantity

$$\int_{S^r} \nabla U : (C.n) ds$$

is quasi-balanced. Then the scalar $K'_U = K_U + H_U$ is such that:

$$\left| \int_{L^r} (\mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x)).U(x)) dl + \int_{S^r} F(x, (\widetilde{S}, x)).U(x) ds + \int_{S^r} \{((C(x).n).n).\frac{\partial U}{\partial n}(x) - \nabla U(x) : (C.n)\} ds \right| < K'_U |V|.$$

Using now the decomposition $\nabla U : (C.n) = \frac{\partial U}{\partial n}.((C.n).n) + \nabla^s U : ((C.n).\Pi)$ where ∇^s denotes the surface gradient on S , we get

$$\left| \int_{L^r} (\mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x)).U(x)) dl + \int_{S^r} F(x, (\widetilde{S}, x)).U(x) ds + \int_{S^r} \nabla^s U(x) : ((C(x).n).\Pi) ds \right| < K'_U |V|.$$

We apply the divergence theorem on every face of S , so obtaining

$$\left| \int_{L^r} \mathcal{F}'(x, (\widetilde{S}, x)).U(x) dl + \int_{S^r} F'(x, (\widetilde{S}, x)).U(x) ds \right| < K'_U |V| \quad (21)$$

where we used the following definitions:

$$\begin{aligned} F'(x, (\widetilde{S}, x)) &= \mathcal{F}(x, (\widetilde{S}, x)) - (C(x).n_1).\nu_1 - (C(x).n_2).\nu_2 \\ F'(x, (\widetilde{S}, x)) &= F(x, (\widetilde{S}, x)) + \nabla^s.((C(x).n).\Pi). \end{aligned}$$

Because of the regularity hypotheses added in this section, F' and \mathcal{F}' verify the assumptions of section 3. Because of inequality (21), we may apply to them our results of section 3. Theorem 2 implies that $\mathcal{F}'(x, (\widetilde{S}, x))$ is vanishing and Theorem 4 establishes the existence of a continuous second order tensor field $T(x)$ such that

$$F'(x, (\widetilde{S}, x)) = T(x).n.$$

□

5 Conclusions

The most important concepts introduced in this paper are: i) the concept of quasi-balanced power of contact force distribution and ii) that of prescribed shapes. They allowed us to develop an system of axioms "à la Cauchy" for continua in which edge contact forces are present, fully justifying the conjectures of Noll and Virga [1].

In these media, stress states are described by two tensor fields, one (T) of order two and one (C) of order three. One may easily verify that the resultant contact force exerted on an admissible domain is only due to the tensor T . Then, in the local form of balance of forces, only the divergence of T appears [10]. In this sense T plays the role of Cauchy stress tensor. On the contrary T is not able to describe surface contact forces locally, even when the contact surface is plane. For this description and for the description of contact edge forces the tensor C is needed. This class of continua has already been described by Germain [14] who called them second gradient media. His starting assumption concerns the form of internal power and the form of the power of contact forces is obtained via D'Alembert principle of virtual powers. Our quasi-balance assumption of contact force distributions is a weak form of this principle.

It is easy to verify that the density of internal power is not equal to $T : \nabla U$ but that a supplementary term equal to $\text{div}(\nabla U : C)$ appears [10]. This term, due to a flux $q = \nabla U : C$, can be identified with the interstitial working introduced by Dunn and Serrin. Our results show that the interstitial work flux through a contact surface can be interpreted as the sum of three terms: i) the power of

edge contact forces, ii) the power of a part of surface forces (the part depending on C), iii) the power expended by the transverse distribution. We thus obtain a mechanical interpretation of interstitial working. The remark 3 of section 4.3 make explicit the possible expressions for interstitial work flux when edge forces are vanishing.

We obtained our results under the assumption that the transverse contact force distribution was of order one. As we did not give any physical justification for this hypothesis, one could wonder if the representation theorems we have found for surface and edge forces are simply consequences of this assumption. This is not the case. Indeed our theorems are true when the contact force distribution is of higher order with respect to transverse derivative: i.e. if in inequality (11) we substitute the expression of $P_{ij}^c(V)$ by

$$\int_{S_r} F(x, (\bar{S}, \bar{x})) \cdot U(x) ds + \int_{L_r} \mathcal{F}(x, (\bar{S}, \bar{x})) \cdot U(x) dl + \sum_{i=1}^N \int_{S_r} G_i(x, (\bar{S}, \bar{x})) \cdot \frac{\partial^i U}{\partial n^i}(x) ds$$

the functions G_i for $i > 1$ do not play any role in our demonstrations as we only use affine vector fields U .

We also assumed that there are no transverse distributions on the edges. One could wonder how our results are influenced by this assumption. If we add to $P_{ij}^c(V)$ the term $\sum_{i=1}^N \int_{L_r} H_i(x, (\bar{S}, \bar{x})) \nabla_T^i U(x) dl$, where ∇_T denotes transverse gradient on the edge whose tangent is τ ($\nabla_T = (Id - \tau \otimes \tau) \cdot \nabla$), then also the functions H_i for $i > 1$ do not play any role for the same reason. We did not yet studied the influence of a non vanishing H_1 on our results.

The remaining open problems are the study the influence of a non vanishing distribution of order one on the edges (H_1) and the study of the influence of forces concentrated at vertices (intersections of edges). Indeed the results expressed as theorems 6 and 7 are most likely due to the assumption of absence of forces concentrated at vertices in the same way as Noll theorem and Cauchy representation theorem are valid only when edge forces are vanishing. A general classification of quasi-balanced distributions seems an interesting development of this paper.

Acknowledgements

We thank C. Gavarini Director of the Dipartimento di Ingegneria Strutturale e Geotecnica dell'Università di Roma "La Sapienza" for having assured a visiting grant to one of the authors and A.Di Carlo, G.Maugin and W.Kosinski for their friendly criticism.

References

1. Noll W. and Virga E.G., On edge interactions and surface tension, Arch. Rational Mech. Anal., vol.111, N.1, p.1-31, 1990.

2. Dunn J.E. and Serrin J., On the Thermomechanics of Interstitial Working,, Arch. Rational Mech. Anal., 88, N.2, p.95-133, 1985.
3. Truesdell C., First course in Rational Continuum Mechanics, Academic press, New York, second edition 1994.
4. Germain P., Cours de mécanique des milieux continus, tome I, Masson, Paris, 1973.
5. Noll W., The Foundations of Classical Mechanics in the Light of Recent Advances in Continuum Mechanics, Proceeding of the Berkeley Symposium on the axiomatic Method, p. 226-281, Amsterdam, 1959.
6. Noll W., The geometry of contact separation and reformation of continuous bodies, Arch. Rational Mech. Anal., 122, N.3, p.197-212, 1993.
7. Dunn J.E., Interstitial Working and a Non Classical Continuum Thermodynamics, in New perspectives in Thermodynamics, J. Serrin Ed., Springer Verlag, Berlin, p. 187-222, 1986.
8. Casal P. et Gouin H., Relation entre l'équation de l'énergie et l'équation du mouvement en théorie de Korteweg de la capillarité, C. R. Acad. Sci. Paris, t. 300, Série II, N.7, p. 231-233, 1985.
9. Casal P., 'La théorie du second gradient et la capillarité', C. R. Acad. Sci. Paris, t. 274, Série A (1972) 1571-1574.
10. Seppecher P., Etude des conditions aux limites en théorie du second gradient: cas de la capillarité, C. R. Acad. Sci. Paris, t. 309, Série II, p. 497-502, 1989.
11. Modica L., Gradient theory of phase transitions with boundary contact energy, Pubblicazioni del Dipartimento di Matematica dell'Università di Pisa, N. 176, Gennaio 1987.
12. Cosserat E. and Cosserat F., Sur la théorie des corps déformables', Herman, Paris, 1909.
13. Schwartz L., Théorie des Distributions, Hermann Paris,(1973).
14. Germain P., La méthode des puissances virtuelles en mécanique des milieux continus. Première partie: Théorie du second gradient, Journal de Mécanique, Vol. 12, N. 2, p. 235-274, 1973.
15. Germain P., The method of virtual power in continuum mechanics. Part 2: Microstructure, S.I.A.M. J. Appl. Math., Vol. 25, N. 3, p. 556-575, 1973.
16. Abraham R., Marsden J.E. and Ratiu T., 'Manifolds, Tensor Analysis, and Applications', Applied Mathematical Sciences, 75, Springer Verlag, (1988).
17. Noll W., Lecture on The Foundations of Continuum Mechanics and Thermodynamics, Arch. Rational Mech. Anal. 52, p.62-92, 1973.
18. Seppecher P., Etude d'une modélisation des zones capillaires fluides: interfaces et lignes de contact, Thèse de l'Université Paris VI, Avril 1987.

Chapitre 3

Situations particulières

3.1 Introduction

Avant d'utiliser le modèle que nous avons décrit dans la partie précédente, il faut s'interroger sur ses domaines d'applicabilité.

Il est clair que le modèle des fluides de Cahn-Hilliard est un modèle simpliste au regard de la diversité des interfaces (suivant les propriétés électriques des fluides en présence, suivant leur miscibilité ou immiscibilité, la présence de surfactant, la présence de couches mono-moléculaires à comportement de type solide, ainsi que des différents types d'interaction avec d'éventuelles parois). Cela est le cas de la plupart des modèles de mécanique des milieux continus et cela n'empêche pas leur remarquable efficacité à traiter de nombreux cas d'intérêt pratique. Les résultats que nous décrivons dans cette partie doivent être interprétés avec prudence, considérés comme des résultats qualitatifs dont la validité est d'autant meilleure que les fluides en présence sont simples (c'est pourquoi nous n'étudions que le cas d'interfaces liquide-vapeur d'un fluide ne comportant qu'un seul constituant).

D'autre part l'épaisseur de la zone interfaciale est très faible et l'on peut s'inquiéter de l'utilisation de la mécanique des milieux continus dans de telles circonstances. Peut-on considérer l'interface elle-même comme un milieu continu tridimensionnel? Cette question entre dans le cadre plus général de l'interaction de la mécanique des milieux continus avec d'autres domaines scientifiques et en particulier avec la physico-

chimie: doit-on limiter l'intervention de la mécanique des milieux continus à ses domaines d'application habituels? Plusieurs remarques militent en faveur d'une attitude pragmatique. i) Le domaine d'application de la mécanique des milieux continus n'est pas connu avec précision, surtout dans des zones fortement hétérogènes. ii) La mécanique des milieux continus est utilisée quotidiennement dans des circonstances analogues. Citons un exemple proche de nos préoccupations: l'utilisation de la mécanique des milieux continus (l'approximation de lubrification) pour décrire le comportement du fluide dans un film précurseur d'une ligne de contact en mouvement (cf. P. G. De Gennes, *Reviews of Modern Physics*, 57, N.3, Part I, 827, 1985). L'épaisseur caractéristique de ce film précurseur est du même ordre de grandeur que les épaisseurs apparaissant dans cet article (100 Å). iii) Il est admis que seule la confrontation avec l'expérience permet d'éliminer un modèle physique non pertinent. Or les résultats connus sur le modèle de Cahn et Hilliard se limitent jusqu'à présent à montrer que ce modèle rejoint le modèle classique de capillarité à une échelle macroscopique.

En conclusion, pour étudier la pertinence du modèle, il est nécessaire d'étudier des situations qui le différencient du modèle classique. C'est l'objet des études qui sont décrites dans cette partie. Le modèle des fluides de Cahn-Hilliard semble converger vers le modèle classique lorsque l'épaisseur de l'interface est d'un ordre de grandeur inférieur à l'ordre de grandeur de toutes les autres longueurs caractéristiques. Il semble donc intéressant d'étudier des situations dans lesquelles il existe une autre très petite longueur caractéristique.

Dans le premier paragraphe nous étudions l'équilibre d'un film très mince posé sur (ou plutôt sous) une paroi plane. Lorsque ce film est suffisamment mince une interaction a lieu entre la paroi et l'interface fluide-vapeur. Cette interaction dépend des propriétés de mouillabilité de la paroi et modifie la stabilité du film.

Dans le deuxième paragraphe nous étudions l'équilibre de bulles de taille très petite (quand le rayon est proche du rayon de nucléation). Nous montrons comment la tension superficielle dépend de ce rayon. Cette dépendance mesurée depuis longtemps expérimentalement (cf. la formule de R.C.Tolman, *J.Chem. Phys.*, 16, p.758-774,1948) ne peut être expliquée en théorie classique des interfaces.

Dans le dernier paragraphe nous étudions le mouvement stationnaire d'une interface sur une surface plane. L'utilisation de la théorie classique de la capillarité pour décrire ce mouvement entraîne un résultat inacceptable: si les deux fluides de part et d'autre de l'interface sont visqueux, la dissipation est infinie. Il faudrait donc une énergie infinie pour provoquer ce mouvement que nous observons quotidiennement! On interprète habituellement ce phénomène en disant que le modèle classique n'est plus valable dans le voisinage de la ligne de contact. Il n'y a pas dans ce problème de petite longueur caractéristique à proprement parler mais le modèle de Cahn et Hilliard prédit que le modèle classique n'est plus valable à des échelles de l'ordre de l'épaisseur interfaciale. Notre étude est numérique, elle montre que le mouvement stationnaire de la ligne de contact est possible et établit une relation entre l'angle de contact et la vitesse.

Ces deux dernières études montrent que le modèle des fluides de Cahn-Hilliard donne des résultats qualitativement conformes à la réalité expérimentale dans des cas où la théorie classique des interfaces est inopérante.

3.2 Film mince liquide

Dans ce paragraphe, nous étudions l'équilibre d'un film mince de liquide en présence de sa vapeur et posé sur une paroi plane infinie et horizontale. Si le film est suffisamment mince les interactions entre la paroi et l'interface liquide-vapeur peuvent influencer la stabilité de l'équilibre. La description de ces interactions dépend du modèle utilisé.

Dans la théorie classique de la capillarité, il n'y a aucune interaction (à moins que des forces à longues portées soient introduites à travers la notion de pression de disjonction). La gravité est alors l'unique paramètre réglant la stabilité. On parle d'instabilité de Rayleigh-Taylor. Nous montrons que, dans la théorie de Cahn-Hilliard, une interaction a lieu sans qu'aucune force à longue portée ne soit introduite.

Pour éviter des problèmes d'écriture de conditions à l'infini, on suppose le fluide compris entre deux plans horizontaux $\{z = -A\}$ et $\{z = B\}$. La recherche de l'équilibre est un problème variationnel unidirectionnel. L'énergie par unité de surface de la couche est

$$F = \int_A^B (W(\rho) + \frac{\lambda}{2} (\nabla \rho)^2 + \rho g z) dz - m_{-A} \rho(-A)$$

où g désigne l'accélération de la pesanteur et m_{-A} est un coefficient lié aux propriétés de mouillabilité de la paroi $\{z = -A\}$. L'épaisseur du film liquide ne peut pas être fixée directement, aussi nous fixons la masse M par unité de surface de la couche, quantité qui lui est liée.

Le problème est rendu adimensionnel en utilisant comme énergie surfacique caractéristique σ l'énergie surfacique d'une interface plane loin de toute paroi et en l'absence de gravité et comme longueur caractéristique l'épaisseur L de cette interface. Il apparaît alors un petit paramètre sans dimension ε , représentatif du rapport des efforts de gravité sur les forces capillaires. La solution d'équilibre u_ε est ensuite recherchée sous forme d'un développement asymptotique en puissances de ε .

On étudie la stabilité linéaire de l'équilibre relativement à des perturbations bidimensionnelles périodiques d'amplitude Φ et de longueur d'onde $\sqrt{-\alpha}$. La recherche de la valeur de α pour laquelle la perturbation est neutre conduit à un problème aux valeurs propres. Les solutions de ce problème sont elles-aussi cherchées sous la forme de

développements asymptotiques en puissances de ε . On montre d'abord qu'en l'absence de paroi proche la première approximation pour α correspond au résultat classique de Rayleigh-Taylor. On obtient ensuite des estimations de α en l'absence de gravité mais pour une paroi proche, faiblement puis fortement mouillante.

Les résultats sont schématisés dans la figure 5 de l'article. On note une transition très rapide quand le paramètre de mouillabilité change de signe. Si l'on interprète ce résultat en terme de l'angle de contact que ferait l'interface avec la paroi (si contact il y avait), la stabilité dépend essentiellement du fait que cet angle soit inférieur ou supérieur à $\pi/2$. De plus l'influence de la paroi sur la stabilité dépend de l'épaisseur du film et décroît exponentiellement quand cette distance augmente. Cette décroissance semble être un point caractéristique des fluides de Cahn-Hilliard et être liée à la convergence exponentielle de la densité vers la densité d'une phase lorsqu'on s'éloigne de l'interface.

Dans la dernière partie on compare les effets de la gravité à l'influence de la paroi. Dans un cas typique on s'aperçoit que ces effets ne sont comparables que si l'épaisseur du film est de l'ordre d'une centaine d'Angström. Ce résultat reste vrai dans des conditions de microgravité. Par contre on montre que les effets de paroi deviennent prépondérants quand la température est proche de la température critique.



L'article qui suit a été publié sous la référence: " *Equilibrium of a Cahn and Hilliard fluid on a wall: Influence of the wetting properties of the fluid upon the stability of a thin liquid film*, P. Seppecher, *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 12, n.1, p.69-84, 1993 "

Attention: Les notations de cet article diffèrent de celles utilisées dans l'introduction.



Equilibrium of a Cahn-Hilliard fluid on a wall: influence of the wetting properties of the fluid upon the stability of a thin liquid film

P. SEPPECHER *

ABSTRACT. — A thin liquid film rests on a plane substratum. We study the linear stability of this equilibrium. Usually the stability properties depend upon gravity (as in the Rayleigh-Taylor instability) and not upon the thickness of the film or upon the wetting properties of the fluid. Using the Cahn-Hilliard model for multiphase fluid we show that such influences can be important. These influences decrease exponentially as the film thickness increases and become more important if the gravity is weak and the fluid is close to its critical point.

1. Introduction

We analyze the equilibrium of a thin film of liquid surrounded by its vapor and resting on an infinite plane (cf. Fig. 1). If the film of liquid is very thin the interactions between the wall and the liquid-vapor interface may influence the stability of the equilibrium. The description of such interactions depends upon the model used to describe the fluid.

There are no such interactions in the classical theory of capillarity (unless the notion of disjoining pressure is introduced, *i.e.*, long-range forces between the wall and the liquid-vapor interface). Then gravity is then the only parameter which influences the equilibrium governed by the Rayleigh-Taylor instability [Taylor, 1950].

Here, our goal is to study these interactions within the framework of Cahn-Hilliard theory [Cahn-Hilliard, 1959], [Casal, 1972], [Gatignol & Seppecher, 1986]. The Cahn-Hilliard model treats both phases (vapor and liquid) as a single fluid. Its free energy density depends not only on the mass density and the temperature but also on the gradient of the mass density. We will not introduce any long range force.

This model is of mathematical interest (problem of minimizing a surface considered as a limit of a more regular problem [Evans *et al.*, 1992], [Modica, 1987 *b*], study of non-convex functional, application of Γ -convergence [Bouchitte, 1990]). It is also of mechanical importance. As the consistency of this model with the second law of thermodynamics is not obvious, it has been shown that we should add an unusual energy flux into the energy balance equation [Dunn & Serrin, 1985] and that a suitable description of the

* Université de Toulon et du Var, B.P. n° 132, 83957 La Garde Cedex, France.

forces in such a fluid is obtainable by using the virtual power principle in the case of the second gradient theory [G & S, 1986], [Germain, 1973]. In this theory the usual stress tensor is no longer sufficient to describe the forces, an additional stress tensor (of order three) is needed. This extra stress tensor is not intuitive in origin. The boundary conditions in second gradient theory are very complex in the general case [G, 1973]. They can be summarized in case of a Cahn-Hilliard fluid on a rigid wall, by the classical stick condition and a second, unusual, condition: the normal derivative of the mass density is to be given on the boundaries [Seppecher, 1989]. The last condition may be viewed as giving information about the interactions between the fluid and the wall. It is connected with the wetting properties of the fluid on the wall: when a liquid-vapor interface is in contact with the wall the contact angle θ formed at the common line is associated with this data [Cahn, 1977], [Modica, 1987 a], [S, 1989].

The practical value of the model is not clear. The exponential convergence of the mass density to its values in the two phases has been criticized [De Gennes, 1985]. The accuracy of the continuum mechanics approximation in thin layers such as interfaces is not clear. This objection is irrelevant when the fluid is close to its critical point [Rowlinson & Widom, 1984]. On the other hand, the coefficients used in the model are not known. For example, the capillarity coefficient λ [cf. Eq. (1)] is assumed to be constant since it gives the model mathematical simplicity. Nevertheless this model is the simplest one which describes interfaces.

The dependence of the free energy density upon the gradient of mass density introduces a small characteristic length L (the characteristic thickness of the liquid-vapor interface). It has been shown that, for a fixed domain, the problem of the equilibrium of a Cahn-Hilliard fluid converges, as L tends to zero, to the classical problem of equilibrium with interfaces (The Plateau problem) [M, 1987 a]. So, we can expect different phenomena only when this limiting procedure cannot be performed, *i.e.*, if another characteristic length is very small. For example, if the wall is not plane but oscillates with a small wavelength we may expect a hysteresis phenomenon [Bouchitte & Seppecher, 1992], when studying the vicinity of a moving contact line we may expect the removal of the dissipation singularity [Seppecher, 1991]. In the problem we deal with here, we expect some new phenomena when the film is very thin. We emphasize that the study of problems which may predict different results to the classical model of capillarity is the only way to investigate the usefulness of the Cahn-Hilliard model.

In the first section we recall the one-dimensional solution for the equilibrium of a Cahn-Hilliard fluid [C, 1977]. Of the dimensionless variables of this equilibrium, three are especially significant: the first denoted by ϵ , is the ratio of gravity forces to capillarity strengths inside the interface; the second, denoted by a , is the ratio of the thickness of the liquid film to the thickness of the interface, the last, denoted by μ characterizes the wetting properties of the fluid at the wall. The sign of μ is particularly significant. If μ is positive we will call the fluid a wetting fluid, if μ is negative we will call it a slightly wetting fluid. These two cases correspond to a contact angle smaller or larger than $\pi/2$. The case where μ is close to zero, *i.e.* if the contact angle is close to $\pi/2$, is called the neutral case.

In the second section we study the linear stability of this equilibrium in three cases. In the first case the liquid film is much thicker than the interface ($a = \infty$). We show then that the first approximation for the critical wavenumber is the classical value given by the Rayleigh-Taylor theory. In the two other cases the thickness of the liquid film is finite and there is no gravity. We show that the equilibrium is unstable if $\mu < 0$, *i.e.*, if the fluid is slightly wetting. The equilibrium is stable if $\mu > 0$. The influence of the wall decreases exponentially as the thickness of the liquid film increases.

In the last part we compare the effects of gravity relative to the effects of the wall. We show that, in usual conditions, and even in micro-gravity conditions, the effects of the wall are insignificant. These effects may only become important for extremely thin (some hundred Angstroms). However, when the temperature is close to the critical temperature of the fluid, these effects may become important even for thick films.

2. The one-dimensional equilibrium

We consider a fluid resting between two infinite plane walls $\{z = -A\}$ and $\{z = B\}$ (Fig. 1). At a given temperature the free energy per unit volume of the fluid is:

$$(1) \quad E = W(\rho) + \frac{\lambda}{2} (\nabla \rho)^2$$

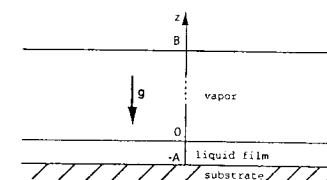


Fig. 1

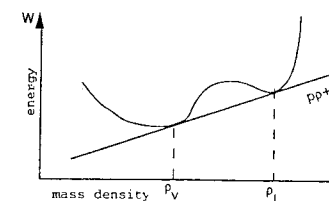


Fig. 2

where ρ is the density of the fluid, $W(\rho)$ is a non convex function (Fig. 2) and λ is a coefficient assumed to be a constant (the capillarity coefficient).

The surface energy of the layer is

$$(2) \quad F = \int_{-A}^B (W(\rho) + \lambda/2 (\nabla \rho)^2 + \rho g z) dz - m_{-A} \rho(-A) - m_B \rho(B)$$

where g is the acceleration due to gravity, and m_{-A} et m_B are coefficients related to the wetting properties of the walls.

A one-dimensional equilibrium solution is the function $\rho_e(z)$ which minimizes F , subject to the constraint $\int_{-A}^B \rho dz = M$.

As we intend only to study the influence of the wall $\{z = -A\}$ upon the equilibrium we assume that $m_B = 0$. M is the mass per unit area in the whole layer $\{-A < z < B\}$. This data fixes the thickness of the liquid layer. This mass constraint is needed to obtain the Euler equation associated with the minimization problem (2). Afterwards we will replace it with a given liquid film thickness.

The function ρ minimizing F is a solution of the differential equation

$$(3) \quad \partial W / \partial \rho - \lambda \partial^2 \rho / \partial z^2 + g z = \text{Const.}$$

where $\int_{-A}^B \rho = M$, $\partial \rho / \partial z = -m_{-A} / \lambda$ at $z = -A$ and $\partial \rho / \partial z = 0$ at $z = B$.

2.1. THE DIMENSIONLESS QUANTITIES AND ASSUMPTIONS

Let $\rho \rightarrow p \rho + q$ be the equation of the bitangent to the graph of the function W (Fig. 2) and ρ_v and ρ_L be the values of the mass density at the contact points. We denote by σ the quantity (which is a surface energy):

$$(4) \quad \sigma = \sqrt{2\lambda} \int_{\rho_v}^{\rho_L} (W(\rho) - p\rho - q)^{1/2} d\rho$$

Further, we set $\rho_d = ((\rho_L - \rho_v)/2)$ and $\rho_m = ((\rho_L + \rho_v)/2)$.

We choose as our characteristic length $L = (\rho_d)^2 \lambda / \sigma$ and define the dimensionless quantities

$$(5) \quad \begin{aligned} x &= \frac{z}{L}, & a &= \frac{A}{L}, & b &= \frac{B}{L}, & u &= \frac{\rho - \rho_m}{\rho_d}, \\ W &= \frac{(W(\rho) - p\rho - q)(\rho_d)^2 \lambda}{\sigma^2}, & \mu &= \frac{m_{-A}}{2\sigma}, \\ M_0 &= \frac{2M}{L\rho_d}, & \epsilon &= \frac{gL\rho_d^2 \lambda}{\sigma^2} \end{aligned}$$

The problem is then to minimize the functional

$$(6) \quad f = \int_{-a}^b \left(w(u) + \frac{1}{2} u'^2 + \epsilon u x \right) dx - \mu u(-a),$$

such that $\int_{-a}^b u dx = M_0$,

or to solve the differential equation

$$(7) \quad \frac{\partial w}{\partial u} - u'' + \epsilon x = \text{Const.}$$

with $\int_{-a}^b u dx = M_0$, $u'(b) = 0$ and $u'(-a) = -\mu$,

where u' and u'' denote du/dx and d^2u/dx^2 , respectively.

Let u_e be the solution of (7). The intervals where u_e are close to $+1$ or -1 coincide with the liquid and vapor phases, the zone where u_e varies from -1 to $+1$ coincides with the interfacial zone. We study the solutions which correspond to an equilibrium of a liquid film on the wall $\{x = -a\}$. We assume therefore that M_0 is such that the solution u_e is close to $+1$ near the wall $x = -a$ and close to -1 elsewhere (cf. Fig. 3 or 4 depending on the sign of μ). We assume that $u(0) = 0$ (this is not a restriction since the origin $x = 0$ may be chosen to be in the interfacial zone). With this choice for the origin, a and b are no longer free parameters for the problem but unknown quantities. The width $a + b$ of the layer is given but the ratio $a/(a+b)$ is related to the parameter M_0 . For large values of a and b we have approximately: $M_0 = a\rho_L + b\rho_v$. From now on we will choose a to be a parameter of our problem instead of M_0 .

The transition from the value $+1$ to the value -1 occurs in an interval of length of order one. The characteristic length L which we have chosen is the characteristic thickness of the interface.

We shall investigate the influence of the parameters a, μ, ϵ upon the equilibrium. Here a is the ratio of the liquid film thickness to the interface thickness; generally it is a large quantity; b is the ratio of the vapor phase thickness to the interface thickness. We assume that b is large enough for its influence to be negligible: $b = \infty$ (A finite value for b was necessary only to write the problem in the form (2)). ϵ is the ratio of the gravitational energy of the interfacial zone to the surface tension: it is a small quantity even in the case of large gravity. Finally μ is the ratio of the surface energy of the wall-liquid interface to the surface tension: this parameter is of order of one. Thus we have

$$b = \infty, \quad a \gg 1, \quad \epsilon \ll 1, \quad \mu = O(1).$$

2.2. BASIC EQUILIBRIUM SOLUTION

Under the conditions of no-gravity and with infinite boundaries ($\epsilon = 0, a = b = \infty, \mu = 0$) it is easy to integrate the Eq. (7) to give

$$(8) \quad x = h(u_0) \Leftrightarrow u_0(x) = h^{-1}(x)$$

where h is the primitive: $h(u) = \int_0^u (2w(t))^{-1/2} dt$.

This basic solution u_0 satisfies

$$(9) \quad \frac{\partial^2 w}{\partial u^2}(u_0) u_0' = u_0''' \quad [\text{by differentiation of (7)}]$$

and at the boundaries

$$(10) \quad u_0(\pm\infty) = \mp 1, \quad u_0'(\pm\infty) = 0, \quad u_0''(\pm\infty) = 0.$$

The surface energy of the fluid under these conditions is called the (dimensionless) surface tension, denoted by e^s . Its value is 1. This is due to our choice of σ as the characteristic quantity for the energy, σ is actually the surface tension:

$$(11) \quad e^s = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(w(u_0) + \frac{1}{2} u_0'^2 \right) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} u_0'^2 dx$$

$$e^s = \int_{-1}^{+1} (2w(u))^{1/2} du = 1.$$

2.3. THE EQUILIBRIUM WITH FINITE BOUNDARIES AND NO GRAVITY

If $\mu < 0$ the equilibrium solution $u_e(x)$ looks like that in Figure 3. There is a maximum in u_e at $x=c$ ($u_e'(c)=0$) ($c < 0$). As the value of a is large but still finite, $u_e''(c)$ is a small,

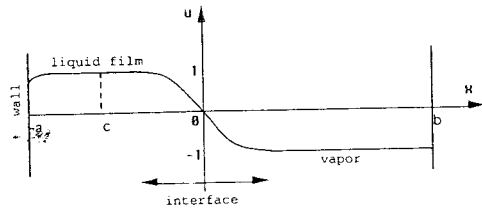


Fig. 3. - The density profile for a slightly wetting fluid.

non zero, negative quantity denoted by v . As b is equal to infinity, we have $u_e(b) = -1$, $u_e'(b) = 0$, $u_e''(b) = 0$.

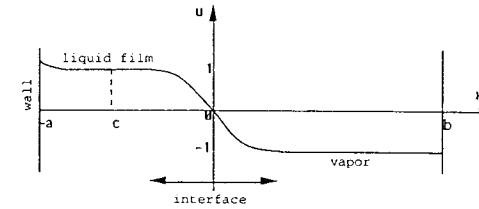


Fig. 4. - The density for a wetting fluid.

If $\mu > 0$ the equilibrium solution $u_e(x)$ is of the type presented in Figure 4. It is a decreasing function with a point of inflexion at $x=c$: $u_e''(c)=0$ ($c < 0$). As the value of a is large but finite, $u_e'(c)$ is a small, non zero, negative quantity denoted k . As b is equal to infinity, we have $u_e(b) = -1$, $u_e'(b) = 0$, $u_e''(b) = 0$.

We remark that these descriptions are valid only if μ is not close to zero. If $0 < \mu \ll 1$ the function u_e may have neither a maximum or a point of inflection. Also if $|\mu| = O(1)$ then c is approximately $a/2$ so we have $1 \ll |c|$, $1 \ll a - |c|$.

3. Stability

We study the linear stability of the equilibrium to two-dimensional perturbations. The equilibrium is stable if the variation of the surface energy due to a perturbation which is periodic in the horizontal coordinate is positive for every wavelength. Computing this variation and denoting by $\Phi(x)$ the amplitude of the perturbation, we look for the solutions (α, Φ) of the eigenvalue problem:

$$(12) \quad -\frac{\partial^2 w}{\partial u^2}(u_e) \Phi + \Phi'' = -\alpha \Phi, \quad \Phi'(-a) = \Phi'(b) = 0,$$

or, for the value α , for the minimum of the functional:

$$(13) \quad \alpha = \min_{\Phi} \Gamma(\Phi), \quad \Gamma = \frac{\int_{-a}^b ((\partial^2 w / \partial u^2)(u_e) \Phi^2 + \Phi'^2) dx}{\int_{-a}^b \Phi^2 dx}$$

where $\alpha > 0$ ($\alpha < 0$) means that the equilibrium is stable (unstable).

3.1. THE CASE OF INFINITE BOUNDARIES: THE RAYLEIGH-TAYLOR INSTABILITY

When the liquid-vapor interface is sufficiently distant from the wall then gravity is the only parameter which influences the stability.

Under conditions of no gravity ($\varepsilon=0$) the equilibrium density $u_0(x)$ is given by the equation (8) and u_0'' is equal to zero at the boundaries. Then the problem (12) has the following simple solution:

$$\alpha_0 = 0, \quad \Phi_0(x) = u_0'(x).$$

With gravity small ($0 < \varepsilon \ll 1$) we can compute the equilibrium solution as an asymptotic expansion in ε : $u_\varepsilon = u_0 + \varepsilon u_1 + \dots$, u_1 is given by

$$(14) \quad \frac{\partial^2 w}{\partial u^2}(u_0(x)) u_1 - u_1'' + \alpha = 0.$$

In the same way we look for the solution of the problem (12) as an asymptotic expansion in ε

$$\Phi = \Phi_0 + \varepsilon \Phi_1 + \dots, \quad \alpha = \alpha_0 + \varepsilon \alpha_1 + \dots$$

α_1 and Φ_1 are solutions of

$$(15) \quad \frac{\partial^3 w}{\partial u^3}(u_0) u_1 u_0' + \frac{\partial^2 w}{\partial u^2}(u_0) \Phi_1 - \Phi_1'' - \alpha_1 u_0' = 0.$$

By differentiation of (14) we get

$$\frac{\partial^3 w}{\partial u^3}(u_0) u_0' u_1 + \frac{\partial^2 w}{\partial u^2}(u_0(x)) u_1' - u_1''' + 1 = 0,$$

So that (15) becomes

$$-\frac{\partial^2 w}{\partial u^2}(u_0) u_1' + u_1''' - 1 + \frac{\partial^2 w}{\partial u^2}(u_0) \Phi_1 - \Phi_1'' - \alpha_1 u_0' = 0,$$

and using (9)

$$(16) \quad -u_0''' u_1' + u_0' u_1''' - u_0' + u_0''' \Phi_1 - u_0' \Phi_1'' - \alpha_1 u_0'^2 = 0.$$

Integrating this equation from $-\infty$ to $+\infty$ we get

$$-[u_0' + u_0'' u_1' - u_0' u_1'' + u_0' \Phi_1 - u_0'' \Phi_1]_{-\infty}^{+\infty} + \alpha_1 \int_{-\infty}^{+\infty} u_0'^2 dx = 0.$$

Finally, using (10) and (11), we have

$$\alpha_1 = +2.$$

The first approximation for α is then $\alpha = 2\varepsilon$. This is the classical result for Rayleigh Taylor instability: if ε is positive, *i.e.* if g is positive, the equilibrium of the interface is stable. If ε is negative this equilibrium is unstable and the critical wave number n_c is given by: $n_c = (-\alpha)^{1/2} = (-2\varepsilon)^{1/2}$ *i.e.* in dimensional the critical wave number is $\bar{n}_c = n_c/L$

or

$$(17) \quad \bar{n}_c = \frac{(-2\varepsilon)^{1/2}}{L} = \sqrt{\frac{|g|(\rho_L - \rho_V)}{\sigma}}$$

3.2. THE CASE OF A FINITE BOUNDARY AND NO GRAVITY FOR A SLIGHTLY WETTING FLUID: $m < 0$.

Now we study the case $\mu < 0$. The equilibrium solution $u_\varepsilon(x)$ is described in 2.3 where the parameters c and b are also defined.

We denote by $\Phi_0 \in H^1([-a, b])$ the function defined by

$$\begin{aligned} \Phi_0(x) &= 0, & \forall x \in [-a, c], \\ \Phi_0(x) &= u_\varepsilon'(x), & \forall x \in [c, b]. \end{aligned}$$

We have

$$\Gamma(\Phi_0) = \frac{\int_c^b ((\partial^2 w / \partial u^2) \Phi_0^2 + \Phi_0'^2) dx}{\int_c^b \Phi_0^2 dx}.$$

Since

$$\int_c^b (\frac{\partial^2 w}{\partial u^2} \Phi_0^2 + \Phi_0'^2) dx = \int_c^b (\frac{\partial^2 w}{\partial u^2} u_\varepsilon'^2 + u_\varepsilon''^2) dx = \int_c^b (u_\varepsilon''' u_\varepsilon' + u_\varepsilon'' u_\varepsilon'') dx = [u_\varepsilon'' u_\varepsilon']_c^b = 0,$$

then $\Gamma(\Phi_0) = 0$ and $\alpha \leq 0$ *i.e.* the equilibrium is unstable.

Let us now search for an approximation to α . Defining $\Psi = \Phi - \Phi_0$, we have

$$\alpha = \min_{\Psi} \frac{\int_c^b (\partial^2 w / \partial u^2) u_\varepsilon'^2 + u_\varepsilon''^2 dx + 2 \int_c^b (\partial^2 w / \partial u^2) u_\varepsilon' \Psi + u_\varepsilon'' \Psi' dx + \int_{-a}^b (\partial^2 w / \partial u^2) \Psi^2 + \Psi'^2 dx}{\int_{-a}^b (\Phi_0 + \Psi)^2 dx}$$

i.e.

$$\alpha = \min_{\Psi} \frac{2 \int_c^b (\partial^2 w / \partial u^2) u_\varepsilon' \Psi + u_\varepsilon'' \Psi' dx + \int_{-a}^b (\partial^2 w / \partial u^2) \Psi^2 + \Psi'^2 dx}{\int_{-a}^b (\Phi_0 + \Psi)^2 dx}$$

$$(18) \quad \alpha = \min_{\Psi} \frac{2[u'_e \Psi]_c^b - \int_{-a}^b ((\partial^2 w/\partial u^2) \Psi^2 + \Psi'^2) dx}{\int_c^b u_e'^2 dx + \int_c^b (2u'_e \Psi) dx + \int_c^b \Psi^2 dx}$$

As $a \gg 1$ we have $v \ll 1$ and the function Ψ minimizing the functional (18) is such that $\Psi \ll 1$ [Eq. (22) is an *a posteriori* justification of this assumption]. The first approximation for α is then given by

$$(19) \quad \alpha \cong \min_{\Psi} \frac{-2v \Psi(c) + \int_{-a}^b ((\partial^2 w/\partial u^2) \Psi^2 + \Psi'^2) dx}{\int_c^b u_e'^2 dx}$$

Defining $s^2 = \partial^2 w/\partial u^2(u_e(c))$ and taking a number d such that

$$(20) \quad 1 \ll d \ll |c|, \quad |c+a|,$$

Then u_e is almost constant in $]c-d, c+d[$. Therefore $\partial^2 w/\partial u^2(u_e)$ is almost constant: $\partial^2 w/\partial u^2(u_e) \cong s^2 = O(1)$. The function Ψ minimizing the functional decreases exponentially with the distance from c . The distance characterizing this decrease is of order one. We have the successive approximations

$$\alpha \cong \min_{\Psi} \frac{-2v \Psi(c) + \int_{c-d}^{c+d} (s^2 \Psi^2 + \Psi'^2) dx}{\int_c^b u_e'^2 dx}$$

and

$$(21) \quad \alpha \cong \min_{\Psi} \frac{-2v \Psi(c) + \int_{-\infty}^{+\infty} (s^2 \Psi^2 + \Psi'^2) dx}{\int_c^b u_e'^2 dx}$$

The function minimizing (21) is then given by:

$$(22) \quad \begin{cases} \Psi(x) = v/2s \exp(+s(x-c)), & \text{on }]-\infty, c], \\ \Psi(x) = v/2s \exp(-s(x-c)), & \text{on } [c, +\infty[. \end{cases}$$

moreover $\int_c^b u_e'^2 dx \cong \int_{-\infty}^{+\infty} u_e'^2 dx \cong e^s = 1$ so that

$$(23) \quad \alpha \cong -\frac{v^2}{2s}.$$

We now estimate the value of v . When $u \cong 1$ we have $w(u) \cong s^2(1-u)^2$. Let us denote $u_e(c) - u$ by δ . When $\delta \cong 0$, δ is given by the differential equation

$$(24) \quad \frac{\delta'^2}{2} = \frac{s^2 \delta^2}{2} + v \delta.$$

Its solution has the following form:

$$(25) \quad \delta(x) = \frac{v}{s^2} (\text{ch}(s(x-c)) - 1).$$

When $|\mu|$ is of order one we have $-c \cong a + c \cong a/2$, so δ is of order one at the wall and in the liquid-vapor interface. Thus we have

$$\frac{v}{s^2} \left(\text{ch} \left(\frac{sa}{2} \right) - 1 \right) = O(1)$$

with $v \ll 1$, $a \gg 1$, $s = O(1)$. Also

$$(26) \quad v = O \left(2s^2 \exp \left(-\frac{sa}{2} \right) \right).$$

$$(27) \quad \alpha = O(-2s^3 \exp(-sa)).$$

In order to write (27) in terms of dimensional quantities, let us introduce $\bar{\alpha} = \alpha/L^2$ and S the speed of sound in the liquid phase: $S^2 = \rho_L (\partial^2 W/\partial \rho^2) (\rho_L) = s^2 (\rho_L \sigma^2/\rho_d^4 \lambda)$. We have

$$(28) \quad \bar{\alpha} = -O \left(\frac{2 \rho_d^2 S^3}{\sigma \lambda^{1/2} \rho_L^{3/2}} \exp \left(-\frac{S}{\lambda^{1/2} \rho_L^{1/2}} A \right) \right).$$

3.3. THE CASE OF A FINITE BOUNDARY AND NO GRAVITY FOR A WETTING FLUID: $m > 0$.

Now we study the case $\mu > 0$. The equilibrium solution $u_e(x)$ is described in 2.3 where the parameters c and k are also defined. We denote by $\Phi_0 \in H^1([-a, b])$ the function defined by

$$\begin{aligned} \Phi_0(x) &= k, & \forall x \in]-a, c], \\ \Phi_0(x) &= u'_e(x), & \forall x \in [c, b]. \end{aligned}$$

As in the previous case let us take $\Phi = \Phi_0 + \Psi$:

$$(29) \quad \alpha = \min_{\Psi} \left\{ \left[\int_{-a}^c \left(\frac{\partial^2 w}{\partial u^2} k^2 \right) dx + 2 \int_{-a}^c \left(\frac{\partial^2 w}{\partial u^2} k \Psi \right) dx + \int_c^b \left(\frac{\partial^2 w}{\partial u^2} u_e'^2 + u_e''^2 \right) dx + 2 \int_c^b \left(\frac{\partial^2 w}{\partial u^2} u_e' \Psi + u_e'' \Psi' \right) dx + \int_{-a}^b \left(\frac{\partial^2 w}{\partial u^2} \Psi^2 + \Psi'^2 \right) dx \right] \left[\int_{-a}^b (\Phi_0 + \Psi)^2 dx \right]^{-1} \right\},$$

however

$$\int_c^b \left(\frac{\partial^2 w}{\partial u^2} u_e'^2 + u_e''^2 \right) dx = [u_e'' u_e']_c^b = 0,$$

and

$$\int_c^b \left(\frac{\partial^2 w}{\partial u^2} u_e' \Psi + u_e'' \Psi' \right) dx = [u_e'' \Psi]_c^b = 0,$$

and

$$\int_{-a}^b (\Phi_0 + \Psi)^2 dx \cong \int_{-a}^b (u_e')^2 dx \cong e^s = 1,$$

so

$$(30) \quad \alpha = \min_{\Psi} \left\{ \left(\int_{-a}^c \left(\frac{\partial^2 w}{\partial u^2} k^2 \right) dx + 2 \int_{-a}^c \left(\frac{\partial^2 w}{\partial u^2} k \Psi \right) dx + \int_{-a}^b \left(\frac{\partial^2 w}{\partial u^2} \Psi^2 + \Psi'^2 \right) dx \right) \right\}$$

The function Ψ minimizing this functional decreases exponentially with distance c in $[c, b]$ and $\Psi + k$ decreases exponentially with distance from c in $[-a, c]$. The characteristic distances for the decrease is of order one [cf. Eq. (32)].

With the same notation as in (20), (21) we have

$$\alpha \cong \min_{\Psi} \left\{ \int_{c-d}^c \left(\frac{\partial^2 w}{\partial u^2} (\Psi + k)^2 + (\Psi + k)'^2 \right) dx + \int_c^{c+d} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial u^2} \Psi^2 + \Psi'^2 \right) dx \right\}$$

i.e.

$$(31) \quad \alpha \cong \min_{\Psi} \left\{ \int_{-\infty}^c (s^2 (\Psi + k)^2 + (\Psi + k)')^2) dx + \int_c^{+\infty} (s^2 \Psi^2 + \Psi'^2) dx \right\}$$

The function minimizing (31) is then given by

$$(32) \quad \begin{cases} \Psi(x) = -k/2 (2 - \exp(+s(x-c))) & \text{in } [-\infty, c] \\ \Psi(x) = -k/2 \exp(-s(x-c)) & \text{in } [c, +\infty] \end{cases}$$

$$(33) \quad \alpha \cong \frac{sk^2}{2}$$

We now estimate k . With the same notation as in (24), when $\delta \cong 0$, δ is given by the differential equation

$$(34) \quad \delta'^2 = s^2 \delta^2 + k^2.$$

The solution has the following form:

$$(35) \quad \delta(x-c) = \frac{k}{s} \operatorname{sh}(s(x-c)).$$

When μ is of order one we have $-c \cong a + c \cong a/2$, so that δ is of order one at the wall and in the liquid-vapor interface. Thus

$$\frac{k}{s} \operatorname{sh}\left(\frac{sa}{2}\right) = O(1) \quad \text{with } k \ll 1, a \gg 1, \quad s = O(1).$$

Also

$$(36) \quad k = O\left(2s \exp\left(-\frac{sa}{2}\right)\right)$$

and

$$(37) \quad \alpha = O(2s^3 \exp(-sa))$$

i.e. in dimensional terms

$$\bar{\alpha} = O\left(2 \frac{s^3}{L^2} \exp(-sa)\right)$$

or

$$(38) \quad \bar{\alpha} = O\left(\frac{2 \rho_L^2 S^3}{\sigma \lambda^{1/2} \rho_L^{3/2}} \exp\left(-\frac{S}{\lambda^{1/2} \rho_L^{1/2}} A\right)\right).$$

3.4. THE CASE OF A FINITE BOUNDARY AND NO GRAVITY FOR THE NEUTRAL CASE $m \cong 0$

If $|\mu| \ll 1$ the approximations (26) and (26) are no longer appropriate.

When $\mu = 0$, the density profile u_e has a maximum when $x = -a$. The computations are similar to those in 3.2. The approximations (21) and (26) are suitably modified and we get the approximation:

$$(39) \quad \alpha \cong -O(4s^3 \exp(-2sa))$$

We now calculate the value of μ for which $\alpha=0$. If $\alpha=0$ the solution of (12) is $\Phi=u'_c$. Then $u''_c(-a)=0$ and the density profile has a point of inflexion at $x=-a$. $u'_c(-a)=k=-\mu$, where k may be estimated in the same way as led to (34), (35), (36). We get the approximation

$$(40) \quad \mu \cong O(2s \exp(-sa)).$$

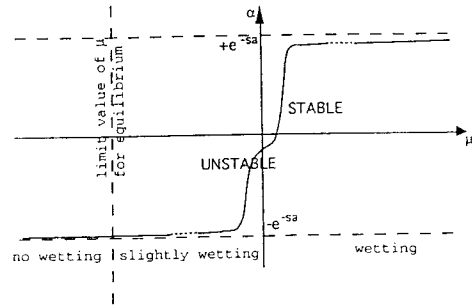


Fig. 5. - The influence of the wetting properties of the fluid upon its stability.

These results are recorded in Figure 5. We notice that outside of the vicinity of the zero, the actual value of μ is unimportant, the important parameter is the sign of μ .

4. A comparison of gravitational effects with wall proximity effects

4.1. THE CASE OF PURE WATER IN ORDINARY CONDITIONS OR IN MICRO-GRAVITY CONDITIONS

We use the units of internal capillarity (U.C.I.) defined in [Casal & Gouin, 1988]: the length unit is 5×10^{-10} m, the mass unit is $1,5 \times 10^{-25}$ kg, and the time unit is 7×10^{-13} s.

Following the computation by [C & G, 1988], using a van der Waals function for W , we get:

$$(41) \quad \begin{cases} \lambda = 1 \text{ U.C.I.}; & \sigma = 0.22 \text{ U.C.I.}; & \rho_d = 0.5 \text{ U.C.I.}; \\ L = 1 \text{ U.C.I.}; & g = 10^{-14} \text{ U.C.I.}; & S = 1.4 \text{ U.C.I.}; \\ & \varepsilon = 2 \times 10^{-14}. \end{cases}$$

The wall proximity effects are comparable with the gravitational effects when the liquid film thickness is of order of $L/S |\ln(\varepsilon)|$ i.e. when

$$A = O(22 \text{ U.C.I.}) = O(110 \text{ \AA}).$$

We emphasize that the effects of the proximity of the wall are weak in the case of liquid films of ordinary thickness. This result is true even in microgravity conditions:

For example, if the gravity is 10^{-6} g we have

$$\varepsilon = 2 \times 10^{-20}; \quad A = O(31 \text{ U.C.I.}) = O(160 \text{ \AA})$$

We remark that the use of continuum mechanics in such thin films is typical for the Cahn-Hilliard model and has already been discussed in the introduction.

4.2. THE VICINITY OF THE CRITICAL POINT

We follow here [Rowlinson & Widom, 1984]. These authors studied interfaces in the vicinity of the critical point. Every parameter of the fluid depends upon the "distance from the critical point": $T - T_c$. (Where T_c denotes the critical temperature of the fluid). The results of [R & W, 1984] are

$$(42) \quad \rho_L - \rho_V \sim |T - T_c|^\beta; \quad \frac{\partial^2 W}{\partial \rho^2}(\rho_L) \sim |T - T_c|^{-\gamma}; \quad \sigma \sim |T - T_c|^{\gamma + 2\beta}.$$

Thus, for the quantities we have defined,

$$(43) \quad S \sim |T - T_c|^{-\gamma/2}; \quad L \sim |T - T_c|^{-\gamma}; \quad \varepsilon \sim |T - T_c|^{-\gamma - \beta - \gamma}; \quad s \sim |T - T_c|^0.$$

The maximum film thickness for which the wall effects are substantial is

$$A \sim \frac{L}{S} \text{Ln}(\varepsilon) \sim |T - T_c|^{-\gamma} \text{Ln}(|T - T_c|).$$

The exponents are, according to mean field theory, $\beta=1/2$, $\gamma=1$, $\nu=1/2$, but are actually [R & W, 1984] closer to

$$\beta=0.32; \quad \gamma=1.24; \quad \nu=0.63.$$

The thickness A therefore diverges at the critical temperature. Moreover it diverges faster than does the characteristic thickness of the interface.

The wall effects which are negligible in usual conditions, may become very important when gravity is weak and when the temperature is close to the critical temperature.

There is some uncertainty about these results. The approximations (12)-(17) we used are accurate if $\varepsilon \ll 1$. But ε diverges at the critical temperature [see (43)]. We must therefore assume that some value of the temperature exists such that both approximations $\varepsilon \ll 1$ and (43) are valid.

On the other hand the model we use to describe the fluid is a very simple one which does not take into account long-range interactions. The exponential decrease of the wall's influence is a characteristic phenomenon for this model. It is associated with the exponential convergence of the density to the density in the phases, and this exponential convergence has been criticized [De G, 1985].

Acknowledgement

This study has been supported by the Centre National d'Études Spatiales. (Contract N° 91/C.N.E.S./0234.)

REFERENCES

- BOUCHITTE G., 1990, Singular Perturbations of Variational Problems Arising from a Two-Phase Transition Model, *Appl. Math. Optim.*, **21**, 289-314.
- BOUCHITTE G., SEPPECHER P., 1992, Phase transitions with contact energy on an oscillating boundary (to appear).
- CAHN J. W., 1977, Critical point wetting, *J. chem. phys.*, **8**, 66, 3667.
- CAHN J. W., HILLIARD J. E., 1959, Free energy of a non-uniform system, *J. chem. Phys.*, **31**, n° 3, 688-699.
- CASAL P., 1972, La théorie du second gradient et la capillarité, *C. R. Acad. Sci. Paris*, **274**, série A, 1571-1574.
- CASAL P., GOUIN H., 1988, Sur les interfaces liquide-vapeur non isothermes, *J. Mécan. Théor. et Appl.*, **7**, n° 6, 689-718.
- DE GENNES P. G., 1985, Wetting: statics and dynamics, *Reviews of Modern Physics*, **57**, n° 3, Part I, 827-863.
- DUNN J. E., SERRIN J., 1985, On the Thermodynamics of Interstitial Working, *Arch. Rational Mech. Anal.*, **88**, 95-133.
- ÉVANS L. C., SUNER H. M., SOUGANIDIS D. E., 1992, *The Allen Cahn equation and generalized motion by mean curvature* (Preprint).
- GATIGNOL R., SEPPECHER P., 1986, Modelisation of fluid-fluid interface with material properties, *J. Mécan. Théor. et Appl.*, Numéro special, 225-247.
- GERMAIN P., 1973, La méthode des puissances virtuelles en mécanique des milieux continus, *J. Mécan.*, **12**, 235-274.
- MODICA L., 1987 a, Gradient theory of phase transitions with boundary contact energy, *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, **5**, 453-486.
- MODICA L., 1987 b, Gradient theory of phase transitions and minimal interface criterium, *Arch. Rational Mech. Anal.*, **98**, 123-142.
- ROWLINSON J. S., WIDOM B., 1984, *Molecular theory of capillarity*, Clarendon Press, Oxford.
- SEPPECHER P., 1989, Étude des conditions aux limites en théorie du second gradient : cas de la capillarité, *C. R. Acad. Sci. Paris*, **309**, série II, 497-502.
- SEPPECHER P., 1991, Ligne de contact en mouvement, étude de la singularité dans le cas d'un transfert de masse, *10^e Congrès Français de Mécanique*, **3**, 307-310.
- TAYLOR G. I., 1950, The instability of liquid surfaces when accelerated in a direction perpendicular to their planes. I, *Proc. Roy. Soc. (A)*, **201**, 192-196.

(Manuscript received February 19, 1992;
accepted July 25, 1992.)

3.3 Bulles microscopiques

Dans ce paragraphe on s'intéresse à l'équilibre de bulles de très petite taille (quand le rayon de la bulle est du même ordre de grandeur que l'épaisseur caractéristique de l'interface). Pour de si petites bulles, le rayon R est en fait mal défini puisque l'incertitude sur la position de l'interface est du même ordre de grandeur. De la même manière l'énergie superficielle σ (celle qui est contenue dans l'interface) est mal définie puisque la séparation entre interface et bulle proprement dite n'est pas précise. Or des données expérimentales existent qui relient ces deux quantités pour de très faibles valeurs du rayon. Nous cherchons à interpréter ces données et à les comparer à des prédictions théoriques issues du modèle de Cahn-Hilliard. Ces données sont généralement obtenues par mesure de la différence des contraintes $p_l - p_v$ entre l'intérieur et l'extérieur de la bulle et par mesure de l'énergie W de nucléation de la bulle, or, dans la théorie classique des interfaces, ces deux quantités sont liées à R et σ grâce à l'utilisation de l'équation de Laplace¹:

$$p_l - p_v = -\frac{2\sigma}{R}$$

$$W = 4/3 \pi R^2 \sigma$$

Ainsi R et σ sont-ils estimés en résolvant ce système de deux équations:

$$\sigma = \left(\frac{3W(p_l - p_v)^2}{16\pi} \right)^{\frac{1}{3}}$$

$$R = \left(\frac{-3W}{2\pi(p_l - p_v)} \right)^{\frac{1}{3}}$$

Nous calculons les expressions de W et de $p_l - p_v$ en théorie de Cahn-Hilliard, puis nous définissons le rayon et la tension superficielle à travers les équations précédentes. Précisons que la différence des contraintes (pressions) $p_l - p_v$ ne doit pas être confondue avec la différence

¹L'équation de Laplace énonce que le saut de pression entre l'intérieur et l'extérieur de la bulle est égal au produit de la tension superficielle par la courbure moyenne de l'interface.

des pressions thermodynamiques: en effet, dans une bulle de très petite taille, l'homogénéité n'est pas atteinte et l'influence de la variation de densité (du Laplacien de ρ) ne peut pas être négligée. Notons que des calculs numériques ont été effectués par G. Rotoli en utilisant nos résultats (cf. G. Rotoli, *Report. Dip. Energetica, Univ. dell'Aquila, Italy*, 1994). Il montrent un comportement de la tension superficielle en fonction du rayon qualitativement en accord avec l'expérience.

L'article qui suit a été publié sous la référence: " *Radius and surface tension of microscopic bubbles by second gradient theory*, F. dell'Isola, H. Gouin and P. Seppecher, *C.R.Acad.Sci, t. 320, Série IIb, p. 211-216, 1995*".

Attention: Les notations de cet article diffèrent de celles utilisées dans l'introduction.

Mécanique des milieux continus/*Continuum Mechanics*
(Physique des surfaces et des interfaces/*Surface and Interface Physics*)

Radius and surface tension of microscopic bubbles by second gradient theory

FRANCESCO DELL'ISOLA, HENRI GOUIN and PIERRE SEPPECHER

Abstract – The classical theory of Laplace is not suitable for describing the behaviour of microscopic bubbles. The theory of second gradient fluids (which are able to exert shear stresses in equilibrium conditions) allows us to obtain a new expression for surface tension and radius of these bubbles in terms of functionals of the chemical potential. This relationship allows us to generalize the results of Cahn-Hilliard (1959) and Tolman (1948).

Rayon et tension superficielle des bulles microscopiques en théorie du second gradient

Résumé – La théorie de Laplace est inadaptée pour étudier les bulles de dimensions moléculaires. La théorie des fluides doués de capillarité interne nous permet de proposer une expression de la tension superficielle et du rayon des bulles comme fonctionnelles du potentiel chimique. Cette expression, en accord avec l'expérience, améliore les résultats obtenus par Cahn-Hilliard et Tolman.

Version française abrégée – Pour étudier le comportement d'un fluide fortement hétérogène on ajoute à l'expression de la densité d'énergie libre d'un fluide homogène un terme limité, le plus souvent, à un développement au second ordre en gradients (Cahn, 1959; Serrin, 1986). Les équations du mouvement de ces fluides sont obtenues par la théorie du second gradient (Casal, 1961; Germain, 1973).

Tolman (1948) a étudié la tension superficielle des bulles en fonction de leur rayon. Des mesures expérimentales ont été faites pour des bulles de dimensions quasi moléculaires (Fisher, 1980; Kumar, 1991). Pour de telles dimensions la théorie de Laplace est disqualifiée car la bulle de vapeur devient l'interface elle-même. Il est néanmoins important de donner une dimension et une énergie pour des germes microscopiques puis de les comparer à un modèle équivalent de type Laplace. On peut ainsi interpréter les résultats des expériences. Le modèle le plus simple de fluide de second gradient ne fait intervenir qu'une seule constante physique supplémentaire C . L'équation de l'équilibre est alors (1) (Serrin, 1986) où τ s'interprète comme le tenseur des contraintes, Ω , ρ et \mathcal{P} désignent respectivement le potentiel des forces de masse, la densité de masse et la pression thermodynamique. Si les forces de masse sont négligeables, l'équilibre isotherme d'une bulle supposée sphérique dans une phase liquide de densité ρ_l est représenté par une solution de l'équation (4). Pour chaque valeur de ρ_l dans une plage convenable on obtient un profil croissant unique et donc une valeur ρ_v de la densité au centre de la bulle. La règle de Gibbs est donc bien vérifiée. Nous comparons l'énergie libre d'un fluide homogène de densité ρ_0 contenu dans un domaine \mathcal{D} et l'énergie libre de la même masse de fluide dans \mathcal{D} formée par un liquide homogène contenant une petite bulle \mathcal{V} . Cela nous conduit aux expressions (7) et (8) pour l'énergie de nucléation W d'une bulle dans un domaine infini, respectivement en théorie de Laplace et en théorie de second gradient. Les conditions d'équilibre liquide-vapeur en théorie de Laplace permettent d'écrire W sous la forme (11). La série d'égalités (5), (6), (12), (13), (14) montre que ce résultat se généralise sous la forme (15) où R_m^2 désigne la valeur moyenne de r^2 relativement à la mesure ρ^2 . En théorie du second

Note présentée par Paul GERMAIN.

gradient, le tenseur des contraintes est sphérique à l'origine ainsi qu'à l'infini mais, alors qu'à l'infini la pression se confond avec la pression thermodynamique $p_l = \mathcal{P}(\rho_l)$, cela est faux à l'origine où $p_\nu = \mathcal{P}(\rho_\nu) - C \rho_\nu \Delta \rho_\nu$. En identifiant la différence de pression entre l'origine et l'infini ainsi que l'énergie de nucléation dans les deux théories, on obtient les définitions (17), (18) pour le rayon R et la tension superficielle σ de la bulle. Notre raisonnement est basé sur l'équation (1) obtenue par un modèle de mécanique des milieux continus. Il faut noter que van Kampen (1964) a obtenu la même équation par des considérations de mécanique statistique. L'équation (14) nous permet d'évaluer l'énergie de nucléation à partir du profil de densité donc de ρ_l . La détermination du rayon et de la tension de surface d'une bulle microscopique par identification de l'énergie de nucléation et du saut de pression donné par la théorie de Laplace avec les quantités correspondantes en théorie du second gradient n'a jamais été utilisée dans la littérature: par exemple Cahn (1959) et Evans (1979) ont utilisé une expression de la tension superficielle valable pour une interface plane uniquement et n'ont pas étudié la relation liant le rayon et la tension superficielle. Nos équations (17), (18) forment une telle relation sous forme implicite: le rayon et la tension superficielle dépendent tous deux du profil de densité qui lui-même dépend de ρ_l . Notre expression de la tension de la tension de surface se réduit quand le rayon de la bulle R tend vers l'infini (*i.e.* quand ρ_l tend vers la valeur ρ_l^P valable pour une interface plane) à l'expression usuelle (Cahn, 1959). L'étude des variations de la tension superficielle en fonction du rayon nécessite le choix d'une loi d'état. En utilisant les potentiels chimiques du type van der Waals proposés par van Kampen (1964), Rocard (1967) ou Peng (1976), des expériences numériques ont été menées par G. Rotoli (1994). Elles montrent que, pour des bulles de rayon voisin du rayon critique, la variation prévue de la tension superficielle correspond aux mesures expérimentales de Katz (1976) et Fisher (1980) ce qui n'est pas le cas pour les prévisions de Tolman (1947) et Kumar (1991).

1. INTRODUCTION. — The microscopic bubbles we consider in this paper contain enough molecules to be modelled as a continuous strongly non-homogeneous system. To the classical expression for the free energy valid for homogeneous continua has to be added a term depending on the variation of mass density. Usually the additional term is assumed to depend on the gradient of density only (Cahn, 1959; Serrin, 1986). Hence the expression for stress tensor differs from that valid for elastic fluids as even in equilibrium conditions shear components also appear. The form of balance equation of force valid for second gradient fluids is found in Germain (1973), Casal (1962). In 1948, Tolman established, using a Gibbs-like approach to Laplace theory, some relationships between the radius and the surface tension of bubbles in equilibrium with their liquid phase. This work produced many theoretical and experimental investigations concerning bubbles of quasi-molecular dimensions (Fisher, 1980; Kumar, 1991). In this case the theory of Laplace is not suitable as the vapour bubble consists mainly or exclusively of the interfacial phase. However, to interpret the experimental evidence it is still important to attribute a radius and an energy to microscopic germs: we do this by means of an *equivalent* model of Laplace type. We note that Cahn and Hilliard did not consider the mechanical aspect of the nucleation phenomenon. They only considered the thermodynamic pressure (*i.e.* the spherical part of stress tensor deriving from the classical expression for free energy) while in Casal (1985) is shown, for second gradient fluids, the existence of a capillary non-spherical stress tensor whose trace includes—but does not reduce to—quoted thermodynamic pressure. The analysis of some preliminary numerical calculations allows us to conclude that the theory of second

gradient fluids, reinterpreted through a comparison with Laplace theory, leads to predictions closer to the experimental evidence than those available in the literature for radii close to the critical one. A further improvement is conceivable considering non-constant capillarity coefficient as suggested by De Gennes (1981).

2. EQUILIBRIUM OF BUBBLES AND GIBBS RULE BY THE SECOND GRADIENT THEORY. — The balance equations of force for capillary fluids are available in the literature (*see e.g.* Serrin, 1986). The most simple model taking into account the non-homogeneity effects introduces a unique additional physical constant C (Casal, 1985). Its value in mks units is very small: its effects are notable only inside interfaces. Balance of forces, in equilibrium conditions, reads (τ , ρ , Ω denoting stress tensor of non-dissipative capillary fluids, mass density and potential of body forces):

$$(1) \quad \operatorname{div} \tau - \rho \operatorname{grad} \Omega = 0$$

with

$$\tau = -p \operatorname{Id} + C \operatorname{grad} \rho \otimes \operatorname{grad} \rho, \quad \text{where } p = \mathcal{P} - C \frac{(\operatorname{grad} \rho)^2}{2} + C \rho \Delta \rho,$$

\mathcal{P} and Δ are the thermodynamic pressure and the Laplace operator. Equation (1) implies:

$$(2) \quad \operatorname{grad} \mathcal{P} + \rho \operatorname{grad} (\Omega - C \Delta \rho) = 0.$$

Assuming isothermal equilibrium conditions, this last relationship becomes:

$$(3) \quad \mu(\rho) - C \Delta \rho + \Omega = \text{const.}$$

where μ is the specific free enthalpy (*i.e.* the chemical Gibbs potential) relative to the fluid in a homogeneous state with mass density ρ and temperature T . If Ω is negligible, the equilibrium of a bubble surrounded by its liquid phase with density ρ_l is represented by a spherically symmetric profile of density verifying (Rocard, 1952; Cahn, 1959):

$$(4) \quad C \frac{d^2 \rho}{dr^2} + 2 \frac{C}{r} \frac{d\rho}{dr} = \mu(\rho) - \mu(\rho_l).$$

Equation (4) is to be supplemented with appropriate boundary conditions: (a) because of spherical symmetry, the derivative of ρ vanishes at the origin; (b) as we have assumed that the bubble is surrounded by a homogeneous liquid the same condition holds at infinity. If ρ_l^P is the density of the liquid phase in the equilibrium state with plane interface and the function μ is smooth enough then the theory of Fuchs equations (Valiron, 1950) implies that: (i) for every ρ_l in an interval $[\rho_m, \rho_l^P]$ equation (4) and conditions (a)-(b) uniquely determine an increasing mass density profile $\rho(r)$ and in particular its value ρ_ν at the origin: we say that $\rho(r)$ verifies the capillary fluids version of the *Gibbs Phase Rule*; (ii) ρ is twice differentiable at the origin; (iii) as $(d\mu/d\rho)(\rho_l) > 0$, ρ converges at least exponentially to ρ_l when r tends to infinity. Denoting with a prime the radial derivative and with ψ the free energy per unit volume equation (4) implies:

$$(5) \quad C \rho'' \rho' + \frac{2C}{r} \rho'^2 = \mu(\rho) \rho' - \mu(\rho_l) \rho'$$

$$(6) \quad \frac{C}{2} \rho'^2 + \int_0^r \frac{2C}{x} \rho'^2(x) dx = \psi(\rho) - \psi(\rho_\nu) + \mu(\rho_l)(\rho_\nu - \rho)$$

3. NUCLEATION ENERGY OF BUBBLES. – We deal here with bubbles which are small with respect to a typical size of the liquid phase. More precisely, a mass density field ρ , whose mean value is ρ_0 , in a domain \mathcal{D} of volume $\nu(\mathcal{D})$ represents a small bubble if ρ_l and $\varepsilon \ll 1$ exist such that $B := \{x \in \mathcal{D} / |\rho(x) - \rho_l|/\rho_0 > \varepsilon\}$ satisfies $\nu(B)/\nu(\mathcal{D}) < \varepsilon$. We note that, as $\int_{\mathcal{D}} (\rho - \rho_0) dV = 0$, $|\int_{\mathcal{D}} (\rho_0 - \rho_l)/\rho_0| = O(\varepsilon)$. We now evaluate (in the absence of capillarity effects and at the first order of approximation in ε) the difference between the free energy of such a small bubble configuration and the homogeneous configuration of density ρ_0 . This difference, which is part of the nucleation energy of the bubble, is $w = \int_{\mathcal{D}} (\psi(\rho) - \psi(\rho_0)) dV$.

As $\int_{\mathcal{D}} \rho_0 dV = \int_{\mathcal{D}} \rho dV$, the energy $w = \int_{\mathcal{D}} (\psi(\rho) - a\rho - \psi(\rho_0) + a\rho_0) dV$ does not depend on the choice of the constant a . The total energy is well defined but its localization is somewhat arbitrary. This indetermination is related to the arbitrariness in the choice of chemical potentials. With the choice $a = \mu(\rho_l)$ the energy is localized inside B . Indeed, using the previous estimation for $\rho_0 - \rho_l$ we obtain:

$$w = \int_B (\psi(\rho) - \mu(\rho_l)(\rho - \rho_l) - \psi(\rho_l)) dV + O(\varepsilon^2).$$

To the non-capillary part of nucleation energy of a bubble in an unbounded domain we have to add the interfacial (capillary) energy. In the Gibbs-Laplace theory we have for bubbles of radius R and surface tension σ :

$$(7) \quad W = 4\pi R^2 \sigma + 4/3 \pi R^3 [\psi(\rho_\nu) - \psi(\rho_l) + \mu(\rho_l)(\rho_l - \rho_\nu)].$$

In the theory of second gradient fluids, following Cahn and Hilliard, we have:

$$(8) \quad W = \int_{\mathcal{D}} [\psi(\rho) - \psi(\rho_l) + \mu(\rho_l)(\rho_l - \rho) + \frac{C}{2} (\text{grad } \rho)^2] dV$$

Let $\mathcal{P} := \rho\mu - \psi$ denote the thermodynamic pressure. The conditions

$$(9) \quad \mu(\rho_l) = \mu(\rho_\nu),$$

$$(10) \quad \mathcal{P}(\rho_l) - \mathcal{P}(\rho_\nu) = -\frac{2\sigma}{R},$$

valid – for isothermal equilibrium – only in Laplace theory, transform equation (7) into:

$$(11) \quad W = 4/3 \pi R^2 \sigma$$

and imply that the nucleation energy of the bubble is the third of the creation energy of its interface. We can extend this result to the theory of second gradient fluids. Let $\phi(\rho) := \psi(\rho) - \mu(\rho_l)(\rho - \rho_l)$; multiplying equation (6) by r^2 , integrating it over $[0, \infty]$, and using (6) again, we obtain:

$$(12) \quad \int_0^\infty r^2 \left(\frac{C}{2} \rho'^2 - \phi(\rho) \right) dr + \int_0^\infty r^2 \left[\phi(\rho_\nu) + \int_0^r \frac{2C}{x} \rho'^2(x) dx \right] dr = 0$$

$$(13) \quad \int_0^\infty r^2 \left(\frac{C}{6} \rho'^2 + \phi(\rho) \right) dr + \left[\frac{r^3}{3} \left(\phi(\rho) - \frac{C}{2} \rho'^2 \right) \right]_0^\infty = 0.$$

Because of (i)-(iii) of section 2 the last addend vanishes so that we obtain

$$(14) \quad W = 4\pi \int_0^\infty r^2 \left(\phi(\rho) + \frac{C}{2} \rho'^2 \right) dr = \frac{4}{3} \pi \int_0^\infty C r^2 \rho'^2 dr$$

Denoting R_m^2 the mean value of r^2 with respect to the measure $\rho'^2 dr$, equation (14) reads

$$(15) \quad W = \frac{4}{3} \pi R_m^2 \int_0^\infty \frac{C}{2} \rho'^2 dr$$

For a large enough bubble (*i.e.* when ρ_l tends to ρ_l^f): (i) R_m is the radius (ii), equation (15) reduces to (11), as surface tension for plane interfaces is $\int_0^\infty C \rho'^2 dr$.

4. COMPARISON BETWEEN LAPLACE AND SECOND GRADIENT THEORIES. EQUIVALENT BUBBLES. – In second gradient theory the stress tensor in the centre of a spherical bubble takes the value $\tau = -p_\nu \text{Id}$ where $p_\nu = \mathcal{P}(\rho_\nu)$. As equation (4) implies $C \rho_\nu \Delta \rho_\nu = \rho_\nu (\mu(\rho_\nu) - \mu(\rho_l))$ we have

$$(16) \quad p_\nu - p_l = \psi(\rho_l) - \psi(\rho_\nu) + \mu(\rho_l)(\rho_\nu - \rho_l).$$

Let us note that this difference is not equal to the corresponding difference of thermodynamic pressures as, for microscopic bubbles, $\mu(\rho_l)$ differs from $\mu(\rho_\nu)$. As experimental results (Fisher, 1980) deal with measures of stresses, then we have to use $p_\nu - p_l$ instead of $\mathcal{P}(\rho_\nu) - \mathcal{P}(\rho_l)$ in the comparison between Laplace and second gradient theory. We can now define the surface tension and the radius of a bubble by identifying the nucleation energies and the pressure differences computed in both theories. Indeed

$p_\nu - p_l = 2\sigma/R$ and $(4/3)\pi \int_0^\infty C r^2 \rho'^2 dr = (4/3)\pi R^2 \sigma$ imply

$$(17) \quad R = \left[2C \int_0^\infty r^2 \rho'^2 dr \right]^{1/3} [\psi(\rho_l) - \psi(\rho_\nu) + \mu(\rho_l)(\rho_\nu - \rho_l)]^{-1/3}$$

$$(18) \quad \sigma = \left[\frac{C}{4} \int_0^\infty r^2 \rho'^2 dr \right]^{1/3} [\psi(\rho_l) - \psi(\rho_\nu) + \mu(\rho_l)(\rho_\nu - \rho_l)]^{2/3}$$

5. CONCLUSIONS. – Let us notice that our treatment is based on equation (1) obtained by a continuum model. However, van Kampen (1964) has obtained the same differential equation using ideas and methods of statistical mechanics. Equation (14) has allowed us to evaluate the nucleation free energy of a bubble, once the mass density profile is known, *i.e.* once the liquid phase density ρ_l has been assigned. Equation (16) allows us to understand the difference between thermodynamic and stress pressure. These two equations do not depend on a particular constitutive law and determine the radius and surface tension for a microscopic bubble. This is done by identifying the pressure jump and nucleation energy of Laplace theory with the corresponding quantities in second gradient theory. This method has never been used in the literature: for example, Cahn (1959) and Evans (1979) used for surface tension the expression valid for plane interfaces, and did not investigate the relationship between surface tension and radius. Our equations (17)-(18) give such a relationship in an implicit form: in fact, both surface tension and radius depend on the density profile, which, in turn, depends on ρ_l . When the radius tends to infinity,

Our expression for surface tension reduces to that for plane interfaces. We observe that the relationship between σ and R depends on thermodynamic potential. Some numerical experiments were performed by Rotoli (1994), using our equations (17)-(18) and van der Waals-type potential proposed by van Kampen (1964), Rocard (1967), Peng (1976). He was able to observe that, for bubbles whose radius is close to the critical one, the predicted variations of the surface tension (for water and cyclohexane at 20°C) are in good agreement with the experimental observations (Katz, 1976; Fisher, 1980). This is not the case for the theoretical treatment proposed by Tolman (1947) and Kumar (1991).

The author thanks Dr. Giacomo Rotoli for letting him know his preliminary results and Prof. A. Di Carlo for his criticism.

Note remise le 22 août 1994, acceptée après révision le 6 janvier 1995.

REFERENCES

- J. W. CAHN and J. E. HILLIARD, Free energy of a non uniform system III, *J. Chem. Phys.*, 31, 1959, pp. 688-699.
 P. CASAL, *La capillarité interne, Cahier du groupe Français de rhéologie*, CNRS VI, No. 3, 1961, pp. 31-37.
 P. CASAL and H. GOUIN, Relation entre l'équation de l'énergie et l'équation du mouvement en théorie de Korteweg de la capillarité, *C. R. Acad. Sci. Paris*, 300, Series II, 1985, pp. 231-234.
 P.-G. DE GENNES, Some effects of long range forces on interfacial phenomena, *J. Physique-Lettres*, 42, 1981, pp. L-377, L-379.
 R. EVANS, The nature of the liquid-vapour interface and other topics in the statistical mechanics of non-uniform, classical fluids, *Adv. In Phys.*, 28, No. 2, 1979, pp. 143-200.
 L. R. FISHER and J. N. ISRAELACHVILI, Determination of the capillary pressure in menisci of molecular dimensions, *Chem. Phys. Letters*, 76, No. 2, 1980, pp. 325-328.
 P. GERMAIN, La méthode des puissances virtuelles en mécanique des milieux continus, *Journal de mécanique*, 12, 1973, pp. 235-274.
 J. W. GIBBS, *Collected works*, 1, Yale Univ. Press, 1948.
 J. L. KATZ, P. MIRABEL, C. J. SCOPPA and T. L. VIRKLER, Condensation of a supersaturated vapor III. The homogeneous nucleation of CCl₄, CHCl₃, CCl₃F and C₂H₂Cl₄, *J. Chem. Phys.*, 65, 1976, pp. 382-392.
 F. J. KUMAR, D. JAYARAMAN, C. SUBRAMANIAN and P. RAMASAMY, Curvature dependence of surface free energy and nucleation kinetics of CCl₄ and C₂H₂Cl₄ vapours, *J. of material Sci. Letters*, 10, 1991, pp. 608-610.
 D. PENG and D. B. ROBINSON, A new two-constant equation of state, *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 15, 1976, pp. 59-64.
 Y. ROCARD, *Thermodynamique*, Masson, Paris, 1967, chapitre V.
 G. ROTOLI, A numerical study of spherical bubble density profiles, Report, dip. Energetica, Univ. dell'Aquila, Italy, 1994.
 J. SERRIN Ed., *New perspectives in thermodynamics*, Springer-Verlag, Berlin, New York, 1986, pp. 187-260.
 R. C. TOLMAN, Consideration of the Gibbs theory of surface tension, *J. Chem. Phys.*, 16, 1948, pp. 758-774.
 G. VALIRON, *Equations fonctionnelles, applications*, Masson, Paris, 1950.
 N. G. VAN KAMPEN, Condensation of a classical gas with long range attraction, *Phys. Review*, 135, No. 2A, 1964, pp. A362-A369.

F. d. I. : Dip. di Ingegneria Strutturale, Università di Roma "La Sapienza",
Via Eudossiana 18, 00184 Roma, Italia;

H. G. : Mécanique Fondamentale et Appliquée, Faculté des Sciences et Techniques,
Université d'Aix-Marseille III, Case 322, avenue Escadrille-Normandie-Niemen, 13397 Marseille Cedex 20, France;

P. S. : Laboratoire d'Analyse Non Linéaire Appliquée,
Université de Toulon et du Var, 83957 La Garde Cedex, France.

3.4. LIGNE DE CONTACT EN MOUVEMENT

101

3.4 Ligne de contact en mouvement

Dans ce paragraphe on étudie le mouvement d'une interface relativement à un paroi plane. Notre but est de comprendre comment ce mouvement est possible, avec quelle dissipation il se produit et comment l'angle de contact varie suivant la vitesse.

L'angle de contact formé par une interface et une paroi avec laquelle elle est en contact est un paramètre physique très important (en dépendent, par exemple: la forme d'une goutte posée sur un plan, la hauteur atteinte par un fluide dans un tube capillaire, la difficulté à extraire un fluide d'un milieu poreux). Ce paramètre modélise les interactions mécaniques entre la paroi et le fluide à l'équilibre. Quand l'interface est en mouvement relativement à la paroi ces interactions ne peuvent pas être modélisées de manière simple. On sait que les hypothèses que i) les deux phases sont visqueuses et ii) qu'elles ne glissent pas sur la paroi, conduisent à une singularité de force à la ligne de contact. La raison fondamentale de ce phénomène est que la condition de non glissement des fluides à la paroi ajoutée à la loi de conservation de la masse implique une discontinuité du champ des vitesses à la ligne de contact: le champ des vitesses ne peut donc appartenir à l'espace fonctionnel H^1 . Or la dissipation totale dans le milieu est équivalente à la norme H^1 , elle est donc infinie. Il y a donc là un paradoxe dû à la modélisation: une énergie infinie serait nécessaire pour déplacer une interface le long d'une paroi. Cela est contraire à l'expérience quotidienne. Notons que ce problème demeure quand le transfert de masse est autorisé à travers l'interface. Un autre point est aussi paradoxal, bien que moins souvent remarqué: le saut de pression divergerait au voisinage de la ligne de contact. Or ce saut est lié à la courbure de la surface (par la loi de Laplace), l'angle formé par la tangente à l'interface et la paroi divergerait aussi, situation qui n'a pas de sens physique.

Les méthodes utilisées habituellement pour résoudre ce paradoxe consistent à relaxer certaines hypothèses de comportement: l'un des fluides est supposé non visqueux ou les fluides sont autorisés à glisser sur la paroi. On peut encore admettre que l'interface n'atteint pas la paroi mais qu'un film mince de liquide (le film précurseur) la recouvre (dans ce cas le problème est en fait repoussé à l'extrémité du film).

Dans l'article qui suit on utilise le modèle de Cahn et Hilliard (qui

présente l'avantage de n'avoir pas été conçu pour résoudre ce paradoxe). Le premier problème est de restreindre l'étude au voisinage de la ligne de contact. On sépare donc trois zones. La première est la zone extérieure dans laquelle l'inertie, les efforts extérieurs ainsi que la géométrie complète du problème sont influents. La deuxième est la zone intermédiaire où ces paramètres sont d'influence négligeables mais où la théorie classique des interfaces est encore valable. La troisième est la zone interne, petit voisinage de la ligne de contact où la théorie des fluides de Cahn-Hilliard doit être utilisée.

Dans la zone intermédiaire une solution analytique est recherchée en supposant que l'interface est quasi plane (formant un angle Φ avec la paroi), que les phases sont faiblement compressibles et que le transfert de masse à travers l'interface est négligeable dans cette zone. La solution obtenue tient compte d'un éventuel flux de masse D (effet d'un éventuel transfert de masse à travers l'interface dans la zone interne). Ainsi la solution dépend de deux paramètres D et Φ que nous interprétons comme traduisant l'influence de l'écoulement externe sur l'écoulement au voisinage de la ligne de contact. Cette solution est utile pour écrire les conditions aux limites du problème interne.

Le problème interne est alors un problème de type Stokes stationnaire pour un fluide de Cahn-Hilliard. Les conditions aux limites étant de type Dirichlet pour le champ de vitesse, de type Neumann pour le champ de densité. De plus la masse totale M contenue dans le domaine est donnée.

La solution est recherchée par une méthode numérique consistant à minimiser l'énergie et la dissipation alternativement. Les paramètres M , D , et Φ sont adaptés de manière à ce que, sur la frontière avec la zone intermédiaire, la tangente à l'interface fasse un angle Φ avec la paroi et que la courbure de l'interface ainsi que le transfert de masse soient nuls.

Le champ de densité dans la zone interne, dans un cas typique, est représenté dans la figure 4 de l'article, les lignes de courant correspondantes étant représentées dans la figure 5. On voit comment la singularité est supprimée, de plus les variations importantes de direction de l'interface restent confinées au voisinage de la paroi et l'angle de contact apparent semble bien défini (il correspond à l'angle Φ). Cet angle dépend de la vitesse de l'interface relativement à la paroi, cette



dépendance est illustrée dans la figure 6 (le nombre capillaire C_a est le paramètre sans dimension représentatif de cette vitesse).

Diverses théories de l'angle de contact dynamique considèrent deux angles, l'un apparent (dans une vue macroscopique), l'autre local. Souvent cet angle local est supposé être égal à l'angle statique. Les résultats de notre étude s'opposent à ces théories, en effet seul l'angle apparent, dépendant de la vitesse semble bien défini, aucun angle égal à l'angle statique n'apparaît.

L'article qui suit a été accepté pour publication sous la référence: "A numerical study of a moving contact line in Cahn-Hilliard theory, P. Seppacher, *International Journal of Engineering Science*, 1995".

Attention: Les notations de cet article diffèrent de celles utilisées dans l'introduction.

Moving Contact Lines in the Cahn-Hilliard Theory

Pierre Seppecher

*Laboratoire d'Analyse Non Linéaire Appliquée,**Université de Toulon et du Var, BP 132, 83957 La Garde (France)**e-mail: seppeche@malte.univ-tln.fr*

Abstract. We establish the equations of motion of an isothermal viscous Cahn-Hilliard fluid and we investigate the dynamics of fluids having moving contact lines under this theory. The force singularity arising in the classical model of capillarity is no more present. This removal is due to a mass transfer across the interface combined with a finite thickness of the interface. A numerical simulation of the flow in the immediate vicinity of the contact line shows the connection between the static contact angle, the dynamic contact angle and points out the influence of the velocity.

Key words: Contact line, Dynamic contact angle, Cahn Hilliard fluid

1 Introduction

Capillary phenomena are important in many circumstances. For instance the shape of the interface of a drop lying on a smooth horizontal surface depends on gravity and surface tension. But to compute this shape, one needs to know another parameter: a boundary condition for the interface must be written. In general, the angle made by the interface and the surface is given. This contact angle is the parameter which models the physical interactions between the surface and the fluids. These interactions may have great influence upon the statics or the dynamics of the fluids. For instance they are responsible for the rising of a fluid in a capillary tube. When the interface is moving with respect to the surface, these interactions cannot be modelled in a simple way: it is well known [1], [2], [3] that the assumptions that the phases are both viscous fluids and that the no-slip condition holds on the boundary, lead to a force singularity at the contact line. The fundamental reason for this paradox is that the no-slip condition combined with the balance of mass across the interface implies a discontinuity of the velocity field at the contact line: the velocity cannot belong to the functional space H^1 . The total dissipation which is equivalent to the H^1 -norm is infinite. It must be noted that the problem remains when allowing mass transfer across the interface [4]. Another problem must be emphasized: the curvature of the interface is related to the pressure jump and, according to the theory, this jump tends to infinity when approaching the contact line. Such a situation is physically impossible.

There are different ways to overcome this difficulty. A first one is to consider that a thin film made by one of the phases covers the surface so that the interface does not reach the surface [5]. Then the apparent contact line can be studied using classical continuum mechanics but the difficulty arises again at the tip of the film.

The second one, the most popular, is to relax the no-slip condition by introducing a new parameter, the slip length [6], [7], [8], [9]. This parameter as well as the dynamic contact angle must be determined experimentally. They may depend on the velocity of the contact line. The difficulty is to make a distinction between the contact angle and an apparent contact angle [10] [11].

The third one, frequently used, is to assume that one of the phases is a perfect fluid. The paradox disappears. The flow in the viscous phase near the contact line is a rolling-like motion. But, however small the viscosity coefficients of the phases may be, the dissipation is infinite. Assuming that one of these coefficients vanishes means passing carelessly to the limit in a singular perturbation problem. Some important phenomena may be missed.

Finally, the continuum model used may be questioned. It is itself an approximation which may not be valid in the vicinity of the contact line. Then one may use molecular simulations [12] or a continuum model able to describe the interface as a layer of finite thickness. This is the way chosen in this paper. We use the Cahn-Hilliard model (or the Van der Waals model). This model was not built in order to solve the contact line paradox; its parameters can be estimated from situations irrelevant to the problem. It is clear that it is a simple model likely

superseded in most practical situations but it is the first continuum model which describes the flow at a moving contact line.

The statics of the Cahn-Hilliard fluid is well known. But the nature of the internal forces in such a fluid is not trivial. One needs the second gradient theory [13] or the theory of continua with edge forces [14] to understand it. In the following section we establish the equations and boundary conditions for a viscous isothermal Cahn-Hilliard fluid. In section 3 we restrict our study to the vicinity of a contact line. We define the zone (the inner zone) where the Cahn-Hilliard model will be used. In an intermediate zone where the classical model can be used we develop an analytic solution. Then in section 4 we show how this intermediate solution matches the external and inner solutions and fixes the boundary conditions for the inner problem. We point out the dimensionless parameters for the inner problem. This problem is nonlinear. We study it by numerical simulation which is the subject of section 5 where we split the problem into two minimization problems. The minimization of the dissipation is a linear problem solved in a classic way while the minimization of the energy is a nonlinear problem solved by a steepest-descent method. The dependence of the dynamic contact angle upon the velocity of the contact line is clearly exhibited.

2 The Isothermal Viscous Cahn-Hilliard Fluid

2.1 FREE ENERGY, DISSIPATION AND CONSTITUTIVE LAWS

The model of Cahn and Hilliard [15] is the simplest continuum model for multi-phase fluids. It is assumed that the volume free energy E of a fluid whose mass density is denoted ρ is the sum of a non-convex volume energy $W(\rho)$ and a term taking into account the non-homogeneity of the fluid.

$$E = W(\rho) + \frac{\lambda}{2} (\nabla \rho)^2 \quad (2.1)$$

The function W is a two-well positive function vanishing only for $\rho \in \{\rho_v, \rho_l\}$. Because of the shape of W , the fluid tends to divide into two phases $\rho = \rho_v$ and $\rho = \rho_l$ and the term $(\lambda/2) (\nabla \rho)^2$ tends to reduce the variation of the field ρ , turning the interface into a thin layer and endowing it with an energy (the surface tension).

The most interesting theoretical feature of this model is the fact that it is not compatible with classical continuum mechanics [16]. A direct way to point out this fact is to write the Clausius-Duhem inequality without making any assumption upon internal forces power P^{int} , energy flux J_e or entropy flux J_s . Under isothermal conditions ($T = Constant$) this inequality reads

$$\Gamma = T \nabla \cdot (J_s - \frac{J_e}{T}) - P^{int} - \rho \frac{d(E/\rho)}{dt} \geq 0. \quad (2.2)$$

Let us define the following tensors of order two and three:

$$\tau^n = \left(W(\rho) - \rho \frac{\partial W}{\partial \rho} - \frac{\lambda}{2} (\nabla \rho)^2 \right) \mathbb{I}d - \lambda \nabla \rho \otimes \nabla \rho, \quad C^m = -\lambda \rho (\mathbb{I}d \otimes \nabla \rho), \quad (2.3)$$

where \mathbb{Id} denotes the identity tensor. Using the balance of mass ($\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot (V)$) we can compute $\frac{d(E/\rho)}{dt}$ and we get:

$$\rho \frac{d(E/\rho)}{dt} = \tau^n : \nabla \tilde{V} + C^n : \nabla \nabla \tilde{V} \quad (2.4)$$

where $:$ and $:$ denote the contraction products of tensors of order two and three.

It is then clear that inequality (2.2) is incompatible with the assumptions that the entropy flux is equal to the energy flux divided by the temperature and that the power of internal forces is the product of Cauchy stress tensor times velocity gradient. This incompatibility can be removed by changing i) the form of the energy flux [16], or ii) the form of the entropy flux following Müller [17], or iii) the form of the power of internal forces [18], [19], [20].

These different ways are formally equivalent but we claim that the last is the most natural one as, for a Cahn-Hilliard fluid, internal forces cannot be represented by the Cauchy stress tensor alone. Indeed a fundamental postulate in Cauchy's construction of the stress tensor (using a tetrahedron) is that no line forces are present on the edges of a domain: this postulate is violated by a Cahn-Hilliard fluid [21]. On the other hand, when studying the equilibrium of a Cahn-Hilliard fluid i.e. the minimization of free energy, an extra boundary condition appears which cannot be explained by means of the Cauchy stress tensor.

Then we assume that $J_e = T J_s$ and that P^{int} has the form

$$P^{int} = -\tau : \nabla \tilde{V} - C : \nabla \nabla \tilde{V}.$$

The Clausius-Duhem inequality becomes

$$\Gamma = (\tau - \tau^n) : \nabla \tilde{V} + (C - C^n) : \nabla \nabla \tilde{V} \geq 0. \quad (2.5)$$

In the approximation of linear thermodynamics the dissipation Γ is a non-negative quadratic form of $(\nabla \tilde{V}, \nabla \nabla \tilde{V})$. Even with this approximation the general constitutive laws involve many coefficients so we admit that there is no dissipation due to $\nabla \nabla \tilde{V}$ and no anisotropy due to the presence of the thermostatic parameter $\nabla \rho$. Then the constitutive law involves only two viscosity coefficients ν and ξ and the dissipation has the usual form

$$\Gamma = \nu \text{tr}(\mathbb{ID})^2 + 2\xi \mathbb{ID} : \mathbb{ID}, \quad (2.6)$$

where $\mathbb{ID} = \frac{1}{2}(\nabla \tilde{V} + \nabla \tilde{V}')$ and stress tensors τ and C verify the constitutive laws:

$$C = C^n, \quad \tau = \tau^n + \Pi \quad \text{with } \Pi = \nu \text{tr}(\mathbb{ID}) \mathbb{Id} + 2\xi \mathbb{ID}. \quad (2.7)$$

2.2 BALANCE OF FORCES AND BOUNDARY CONDITIONS

The easiest way to write the balance of forces and the boundary conditions for a Cahn-Hilliard fluid is to use the virtual power principle in the framework of the second gradient theory [13]. An alternative (and equivalent) way, closer to Cauchy's approach, is to consider the fluid as a continuum in which edge forces are present [14]. This makes the nature of the boundary conditions clearer. The external medium (the container) exerts on the fluid three types of contact force distributions (in this paper we do not need to consider any body force): a surface density of forces on the whole boundary, a line density of forces on the edges of

the boundary (if any), and a surface density of double forces (i.e. a distribution of order one with respect to transverse derivatives) on the boundary (see [14] for a discussion upon the nature of this distribution).

We admit that the no-slip condition holds on the whole boundary. Then, when the boundary is not moving, the velocity of the fluid \tilde{V} vanishes on the boundary. The power of contact force distribution \mathcal{P}^{ext} is reduced to the power of double forces and takes the form

$$\mathcal{P}^{ext} = \int_{\partial\mathcal{D}} H \cdot (\tilde{n} \cdot \nabla \tilde{V}) ds \quad (2.8)$$

where \tilde{n} denotes the external normal to the boundary $\partial\mathcal{D}$. Let $\tilde{\gamma}$ be the acceleration of the fluid, the principle of virtual powers reads

$$\int_{\mathcal{D}} \rho \tilde{\gamma} \cdot \tilde{v} dv = \int_{\partial\mathcal{D}} H \cdot (\tilde{n} \cdot \nabla \tilde{v}) ds - \int_{\mathcal{D}} (\tau : \nabla \tilde{v} + C : \nabla \nabla \tilde{v}) dv \quad (2.9)$$

for all fields \tilde{v} such that $\tilde{v} = 0$ on $\partial\mathcal{D}$. Using the divergence theorem, this equation becomes

$$\int_{\mathcal{D}} \left[\rho \tilde{\gamma} - \nabla \cdot (\tau - \nabla \cdot (C)) \right] \cdot \tilde{v} dv - \int_{\partial\mathcal{D}} \left[H - \tilde{n} \cdot C \cdot \tilde{n} \right] \cdot (\tilde{n} \cdot \nabla \tilde{v}) ds = 0 \quad (2.10)$$

which implies the local balance of forces

$$\rho \tilde{\gamma} = \nabla \cdot (\tau - \nabla \cdot (C)) \quad \text{in } \mathcal{D}, \quad (2.11)$$

and the boundary condition

$$\tilde{n} \cdot C \cdot \tilde{n} = H \quad \text{on } \partial\mathcal{D}. \quad (2.12)$$

Taking the constitutive laws (2.7) into account, the equations of motion of the isothermal viscous Cahn-Hilliard fluid read

$$\rho \tilde{\gamma} = -\rho \tilde{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial W}{\partial \rho} - \lambda \Delta \rho \right) + \nabla \cdot (\Pi) \quad \text{in } \mathcal{D}, \quad (2.13)$$

$$\tilde{H} = -\lambda \rho (\tilde{n} \cdot \tilde{\nabla} \rho) \tilde{n} \quad \text{on } \partial\mathcal{D}. \quad (2.14)$$

The last equation shows that a Cahn-Hilliard fluid can only support double forces which are perpendicular to the boundary. This is due to the fact that the free energy depends only on ρ (it is a model of fluid) and to our assumption that the dissipation does not depend on $\nabla \nabla \tilde{V}$. This phenomenon is analogous to the fact that a perfect fluid cannot support contact forces which are not perpendicular to the boundary. In a sense our model is a model of a "semi-perfect" fluid. Defining G by $\tilde{H} = -\lambda \rho G \tilde{n}$, equation (2.14) reads

$$\tilde{n} \cdot \tilde{\nabla} \rho = G \quad \text{on } \partial\mathcal{D}. \quad (2.15)$$

Before using the system of equations (2.13), (2.15), let us see its connection with the classical theory of capillary phenomena.

2.3 CONNECTION WITH THE CLASSICAL THEORY OF CAPILLARITY

The connection between the model of Cahn-Hilliard and the classical model of capillarity has been established rigorously in the static case [22].

The model has its own characteristic length L (see definition (4.9) of L). This length is actually characteristic of the thickness of the interface. It is in general much smaller than the characteristic size of the container: a small dimensionless

parameter is introduced. Then an asymptotic study of the model of Cahn-Hilliard is possible. This study was carried out first by Cahn and Hilliard [23] and rigorously, using the notion of Γ -convergence, by Modica [22]. This study has only been made in the static case where the problem is to find a minimizer ρ of the free energy. The boundary condition (2.15) is taken into account by an extra energy term: $-\int_{\partial D} \lambda G \rho \, ds$. Some standard assumptions on the behaviour of all physical quantities with respect to the small parameter (see [24], [25] or [26] for examples where these assumptions do not hold) are necessary to find the expected limit model which can be summarized by:

- i) the fluid is divided into two incompressible homogeneous phases \mathcal{A} and \mathcal{B} whose mass densities are ρ_v and ρ_l ,
- ii) a surface energy $\sigma = \int_{\rho_v}^{\rho_l} \sqrt{2\lambda W(\rho)} \, d\rho$ is associated with the surface \mathcal{I} dividing \mathcal{A} and \mathcal{B} (the interface).
- iii) surface energies $\sigma_{\mathcal{A}}$ and $\sigma_{\mathcal{B}}$ are associated with the boundaries $\partial D \cap \mathcal{A}$ and $\partial D \cap \mathcal{B}$ of the phases. Let $\rho_1 < \rho_2 < \rho_3 < \rho_4$ be the four solutions of the equation

$$\sqrt{2\lambda^{-1}W(\rho)} = |G| \quad (2.16)$$

Then $\sigma_{\mathcal{A}}$ and $\sigma_{\mathcal{B}}$ are given by

$$\sigma_{\mathcal{A}} = -\lambda G \rho_2 + \int_{\rho_v}^{\rho_2} \sqrt{2\lambda W(\rho)} \, d\rho \quad \text{if } G > 0, \quad (2.17)$$

$$\sigma_{\mathcal{A}} = -\lambda G \rho_1 + \int_{\rho_1}^{\rho_v} \sqrt{2\lambda W(\rho)} \, d\rho \quad \text{if } G < 0, \quad (2.18)$$

$$\sigma_{\mathcal{B}} = -\lambda G \rho_4 + \int_{\rho_l}^{\rho_4} \sqrt{2\lambda W(\rho)} \, d\rho \quad \text{if } G > 0, \quad (2.19)$$

$$\sigma_{\mathcal{B}} = -\lambda G \rho_3 + \int_{\rho_3}^{\rho_l} \sqrt{2\lambda W(\rho)} \, d\rho \quad \text{if } G < 0, \quad (2.20)$$

The static contact angle Φ_s is then determined by the Young law:

$$\cos(\Phi_s) = \frac{\sigma_{\mathcal{A}} - \sigma_{\mathcal{B}}}{\sigma} \quad (2.21)$$

Example: When $G = 0$ we have $\rho_1 = \rho_2 = \rho_v$ and $\rho_3 = \rho_4 = \rho_l$, so $\sigma_{\mathcal{A}} = \sigma_{\mathcal{B}} = 0$, hence

$$\Phi_s = \frac{\pi}{2} \quad (2.22)$$

When equation (2.16) has not four solutions or when equation (2.21) has no solution, the wetting is complete. We will not consider these cases in this paper.

To our knowledge no result has been obtained in the dynamical case. We think that this asymptotic model is likely to be valid far from a moving contact line. This paper is devoted to the study of the vicinity of the contact line.

3 Description of a Moving Contact Line

3.1 GEOMETRICAL DESCRIPTION, LOCALIZATION

We consider a contact line moving on a plane rigid surface and we divide the domain in three parts. The first part called "external zone" is the region far away from the contact line where the whole geometry of the domain and the external forces determine the flow. The classical model of capillarity can be used there. We are not interested in the flow in this region while we assume that it has a

weak influence upon the flow near the contact line. The second part called "inner zone" is the vicinity of the contact line; its size is so small that the thickness of the interface cannot be neglected there, the Cahn-Hilliard model has to be applied. We assume that there exists a third region called "intermediate zone" close enough to the contact line for the influence of the external flow to be weak and far enough from the contact line for the classical model of capillarity to be valid.

However it is clear that external conditions may have an influence upon the behaviour of the whole interface and therefore upon the flow in the inner zone. Let us consider for instance the equilibrium of a small bubble lying on a plane. For a given static contact angle, the curvature of the interface depends on the size of the bubble: the shape of the interface in the inner zone depends on it. In order to get rid of this influence we assume that the curvature radius of the interface in the external zone is much larger than the characteristic size of the inner or intermediate zones.

On the other hand, in the dynamical case, a possible jump of chemical potential between the two phases in the external zone leads to a transfer of mass across the interface, i.e. a non-vanishing normal velocity on the interface. In order to get rid of this influence we assume that this normal velocity in the external zone is much smaller than the velocity of the contact line. On these two assumptions we can study the flow near the moving contact line without considering the flow in the whole domain.

While the flow in the external zone is three-dimensional, we assume that it is



two-dimensional in the inner and intermediate zones (here we assume implicitly that the curvature radius of the contact line is much larger than the characteristic size of the inner or intermediate zones). So we reduce our study to a plane perpendicular to the contact line (the plane of figure 1). Moreover we assume that, in a system of coordinates tied to the contact line, the interface is not moving and the flow is stationary. In such a system of coordinates it is the boundary of the domain which is moving (with a velocity tangent to the boundary). Only the normal component (normal to the contact line) of this velocity is well defined: we can state that this velocity lies in the plane perpendicular to the contact line. We denote it $V_e \tilde{x}_1$.

More precisely we assume that (in a vicinity of the contact line) every tangent line (O, P) to the interface intersects the boundary. Let R_1 be a length much larger than the characteristic thickness of the interface and much smaller than the characteristic length of the external flow and let R_2 be a length much larger than R_1 but much smaller than the characteristic length of the external flow, let us consider the tangent line (O, P) such that $\|O\tilde{P}\| = R_1$ and let us choose O as the origin of the system of coordinates $(O, \tilde{x}_1, \tilde{x}_2)$ (\tilde{x}_1 is a unit vector tangent to the boundary and normal to the contact line, see fig 1). This system of coordinates is tied to the contact line. Using polar coordinates (r, θ) , we define the inner zone as the set $\{r < R_1, 0 < \theta < \pi\}$ and the intermediate zone as the set $\{R_1 < r < R_2, 0 < \theta < \pi\}$. The angle $(\tilde{x}_1, O\tilde{P})$, denoted Φ , is called the

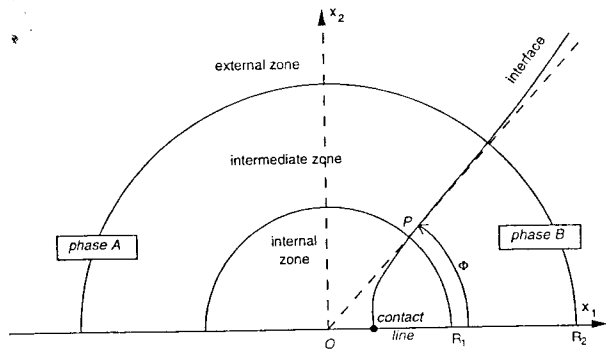


Figure 1. Partition of the domain

apparent contact angle.

The curvature radius of the interface in the external zone is much larger than R_2 , we assume that this is true also in the intermediate zone, thus the interface is assumed to be near plane in this zone. In fact R_1 must be large enough because we know that the curvature increases (diverges) in the classical theory of capillarity when approaching the contact line.

The following section is devoted to the study of the flow in the intermediate zone in order to get a boundary condition for the inner zone.

3.2 INTERMEDIATE FLOW

In the intermediate zone we use the classical theory of capillarity. The interface is a near plane surface and no mass transfer occurs. The two phases are homogeneous and incompressible. For the sake of simplicity we assume that their viscosity

coefficients are identical (no particular difficulty should arise if different viscosity coefficients are considered).

In the plane (O, x_1, x_2) we use polar coordinates (r, θ) and we study a stationary two-dimensional flow in the domain $\mathcal{D} = \{0 < \theta < \pi, R_1 < r < R_2\}$. We assume that two phases $\mathcal{A} = \{\theta > \Phi\}$ and $\mathcal{B} = \{\theta < \Phi\}$ with mass densities ρ_A and ρ_B are divided by a plane interface $\mathcal{I} = \{\theta = \Phi\}$ (see fig. 2). The normal to \mathcal{I} pointing into \mathcal{A} is denoted \tilde{n} .

Let $V_A, V_B, \tau_A,$ and τ_B be the velocities and stress tensors in each phase, let us recall our assumptions:

- i) both phases are homogeneous incompressible fluids:

$$\nabla \cdot (V_A) = 0 \text{ in } \mathcal{A}, \quad \nabla \cdot (V_B) = 0 \text{ in } \mathcal{B}. \tag{3.1}$$

- ii) no mass transfer occurs across the interface:

$$\tilde{V}_A \cdot \tilde{n} = 0, \quad \tilde{V}_B \cdot \tilde{n} = 0 \text{ on } \mathcal{I}, \tag{3.2}$$

- iii) both phases are viscous with the same viscosity coefficient ξ . The Reynolds number is small, so we use the Stokes equation which reads:

$$\nabla \cdot (\tau_A) = 0 \text{ in } \mathcal{A}, \quad \nabla \cdot (\tau_B) = 0 \text{ in } \mathcal{B}. \tag{3.3}$$

where $\tau_A = \xi(\nabla V_A + \nabla V_A^t)$ and $\tau_B = \xi(\nabla V_B + \nabla V_B^t)$

iv) the velocity and the tangential component of the stress are continuous across the interface

$$\tilde{V}_A = \tilde{V}_B \quad \text{on } \mathcal{I}, \quad (3.4)$$

$$(\tau_A \cdot \tilde{n})_{\parallel} = (\tau_B \cdot \tilde{n})_{\parallel} \quad \text{on } \mathcal{I}, \quad (3.5)$$

where \parallel denotes the projection to the plane tangent to the interface.

v) the no-slip condition is valid on the plane.

$$\tilde{V}_A = V_e x_1, \quad \tilde{V}_B = V_e x_1 \quad \text{on } S, \quad (3.6)$$

In order to consider the possibility of a mass transfer D across the interface in the inner zone, we introduce the flow rates D_A and D_B in each phase across the arcs $\mathcal{S}_A = \{r = R_1, \Phi < \theta < \pi\}$ and $\mathcal{S}_B = \{r = R_1, 0 < \theta < \Phi\}$ (see fig. 2):

$$D_A = \int_{\mathcal{S}_A} \tilde{V}_A \cdot \tilde{n} \, dl, \quad D_B = \int_{\mathcal{S}_B} \tilde{V}_B \cdot \tilde{n} \, dl, \quad (3.7)$$

where \tilde{n} denotes the normal to \mathcal{S}_A or \mathcal{S}_B pointing into \mathcal{A} or \mathcal{B} respectively.

Because of equations (3.1) we can use the flow functions Ψ_A and Ψ_B such that, for each phase, polar coordinates of the velocity fields verify

$$(V_r, V_\theta) = \left(-\frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta}, \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right), \quad (3.8)$$

The problem reads

$$\Delta \Delta \Psi_A = 0 \quad \text{in } \mathcal{A}, \quad \Delta \Delta \Psi_B = 0 \quad \text{in } \mathcal{B}, \quad (3.9)$$

$$\Psi_A = 0 \quad \text{on } \mathcal{S} \cap \mathcal{A}, \quad \Psi_A = D_A \quad \text{on } \mathcal{I}, \quad (3.10)$$

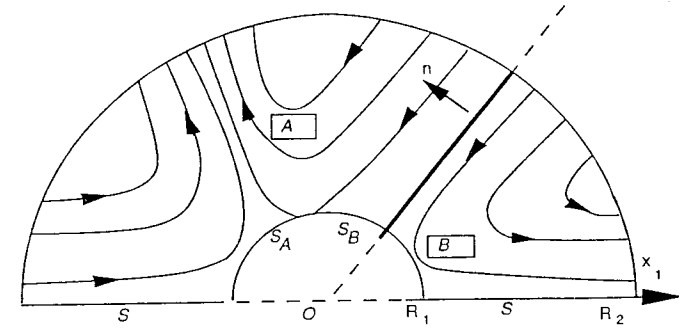


Figure 2. Flow in the intermediate zone

$$\Psi_B = 0 \quad \text{on } \mathcal{S} \cap \mathcal{B}, \quad \Psi_B = -D_B \quad \text{on } \mathcal{I}, \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial \Psi_A}{\partial \theta} = V_e r \quad \text{on } \mathcal{S} \cap \mathcal{A}, \quad \frac{\partial \Psi_B}{\partial \theta} = -V_e r \quad \text{on } \mathcal{S} \cap \mathcal{B} \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial \Psi_A}{\partial \theta} = \frac{\partial \Psi_B}{\partial \theta} \quad \text{on } \mathcal{I}, \quad \frac{\partial^2 \Psi_A}{\partial \theta^2} = \frac{\partial^2 \Psi_B}{\partial \theta^2} \quad \text{on } \mathcal{I}. \quad (3.13)$$

The solution of this problem is not uniquely determined as no condition on the boundaries $\{r = R_1\}$ and $\{r = R_2\}$ is given. When $D_A = 0$ and $D_B = 0$ similarity solutions (when the functions Ψ have the form $\Psi(r, \theta) = rF(\theta)$) are known to represent correctly the flow in a corner [27]. When $V_e = 0$ we use radial flows (Ψ having the form $\Psi(r, \theta) = F(\theta)$). Using the linearity of the problem with respect to the parameters D_A , D_B and V_e , we get

$$\begin{aligned} \Psi_A(r, \theta) = & r [a_A \sin(\theta) + b_A \cos(\theta) + c_A \theta \sin(\theta) + d_A \theta \cos(\theta)] + \\ & + [g_A (\pi - \theta)^2 + h_A (\pi - \theta)^3] \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$\Psi_B(r, \theta) = r[a_B \sin(\theta) + c_B \theta \sin(\theta) + d_B \theta \cos(\theta)] + [g_B \theta^2 + h_B \theta^3] \quad (3.15)$$

where

$$a_A = V_e \frac{(\pi - \Phi)(\sin(\Phi) \cos(\Phi) - \Phi) + \pi \Phi \sin(\Phi)^2}{\Phi(\pi - \Phi) - \sin(\Phi) \cos(\Phi)(\pi - 2\Phi) - \sin^2(\Phi)}, \quad (3.16)$$

$$a_B = V_e \frac{-(\pi - \Phi) - \sin(\Phi) \cos(\Phi)}{\Phi(\pi - \Phi) - \sin(\Phi) \cos(\Phi)(\pi - 2\Phi) - \sin^2(\Phi)}, \quad (3.17)$$

$$b_A = V_e \frac{-\pi \Phi \sin(\Phi) \cos(\Phi) + \sin(\Phi)^2}{\Phi(\pi - \Phi) - \sin(\Phi) \cos(\Phi)(\pi - 2\Phi) - \sin^2(\Phi)}, \quad (3.18)$$

$$c_A = V_e \frac{-\Phi \sin(\Phi)^2}{\Phi(\pi - \Phi) - \sin(\Phi) \cos(\Phi)(\pi - 2\Phi) - \sin^2(\Phi)}, \quad (3.19)$$

$$c_B = V_e \frac{(\pi - \Phi) \sin(\Phi)^2}{\Phi(\pi - \Phi) - \sin(\Phi) \cos(\Phi)(\pi - 2\Phi) - \sin^2(\Phi)}, \quad (3.20)$$

$$d_A = V_e \frac{-\Phi \cos(\Phi) \sin(\Phi) + \sin(\Phi)^2}{\Phi(\pi - \Phi) - \sin(\Phi) \cos(\Phi)(\pi - 2\Phi) - \sin^2(\Phi)}, \quad (3.21)$$

$$d_B = V_e \frac{(\pi - \Phi) \cos(\Phi) \sin(\Phi) + \sin(\Phi)^2}{\Phi(\pi - \Phi) - \sin(\Phi) \cos(\Phi)(\pi - 2\Phi) - \sin^2(\Phi)}, \quad (3.22)$$

$$g_A = D_A \frac{3(2\pi - \Phi)}{2\pi(\pi - \Phi)^2} + D_B \frac{-3}{2\pi\Phi}, \quad (3.23)$$

$$g_B = D_A \frac{3}{2\pi(\pi - \Phi)} + D_B \frac{-3(\Phi + \pi)}{2\pi\Phi^2}, \quad (3.24)$$

$$h_A = D_A \frac{-3(\pi - \Phi) - \pi}{2\pi(\pi - \Phi)^3} + D_B \frac{3}{2\pi\Phi(\pi - \Phi)}, \quad (3.25)$$

$$h_B = D_A \frac{-3}{2\pi\Phi(\pi - \Phi)} + D_B \frac{3\Phi + \pi}{2\pi\Phi^3}. \quad (3.26)$$

This solution cannot be the physical solution for a moving interface in the vicinity of the contact line ($R_1 = 0$) as i) the dissipation in any open part of the domain containing \mathcal{Q} would be infinite, ii) the normal stress jump across the interface would diverge when approaching O , thus the Laplace law binding this jump to the interface curvature could not be satisfied even approximatively.

However, this solution can be a good approximation for the flow in an intermediate zone (far enough from O for the normal stress jump to be small and close enough to O for the external flow to have a weak influence). We will use it in section 4 to write the boundary conditions for the inner problem. For this purpose, we denote by $\tilde{V}_1^{V_e, D_A, D_B, \Phi}(\theta)$ the velocity on $\mathcal{S}_A \cup \mathcal{S}_B$ corresponding to Ψ_A or Ψ_B depending whether $\theta < \Phi$ or $\theta > \Phi$ (the superscripts recall the dependence of this boundary velocity field on the parameters V_e , D_A , D_B and Φ).

4 Inner Problem

In the inner zone the characteristic length is so small that the classical theory of capillarity is no more valid: we cannot neglect the thickness of the interface. A non-zero thickness is fundamental because it removes the discontinuity of the mass density field, then it removes the discontinuity of the velocity field when mass transfer occurs, and finally removes the singularity of the dissipation at the contact line.

4.1 BOUNDARY CONDITIONS

The inner domain and the expected solution are represented in figure 3. The domain is a half disk \mathcal{D}_{R_1} limited by a half circle Σ_{R_1} and a segment S_{R_1} . \tilde{n} denotes the external normal to the boundary. In this drawing the thickness of the interface (i.e. the zone where the isodensity curves are concentrated) was exaggerated. In fact the interface at $r = R_1$ looks like a line in a R_1 -scale.

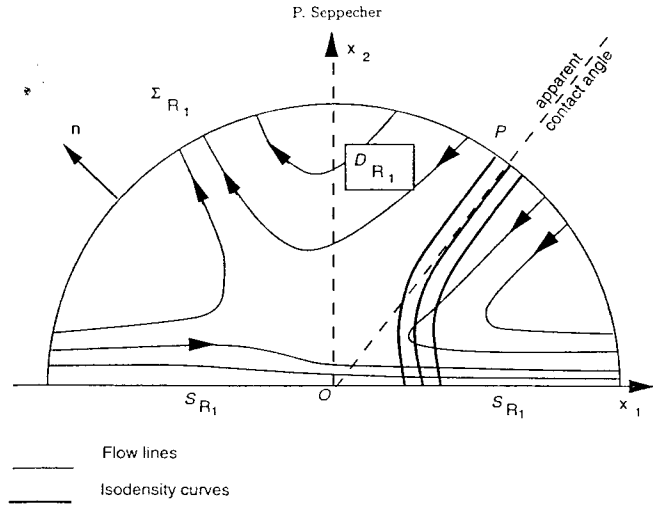


Figure 3. Geometry of the inner problem, expected solution

Let us discuss the static boundary conditions first :

- i) Due to our definition of inner zone (see figure 1), the interface intersects Σ_{R_1} orthogonally. It is known from the equilibrium theory of a Cahn-Hilliard fluid (equation (2.22)) that this condition is obtained by setting $G = 0$ on Σ_{R_1} .
- ii) At equilibrium the contact angle Φ_s is connected with the value of G on S_{R_1} (equation (2.21)). This value is given by the physics of wall-fluid interactions. Fixing G is equivalent in the Cahn-Hilliard theory to fixing the static contact angle in the classical theory of capillarity.
- iii) At this point the static problem is not well-posed. We must write an extra condition deriving from the external solution. We already discussed this point in section 3.1 and concluded that the interface curvature should be fixed. As such a

condition raises technical difficulties we prefer to fix the total amount M of mass lying inside the inner zone. The parameter M will then be adjusted to make the curvature of the interface vanish at $r = R_1$ (therefore the interface fits with a plane interface in the intermediate zone).

Conditions i), ii) and iii) lead to a well posed static problem whose solution corresponds to a plane interface intersecting the wall at the origin with an angle compatible with Young law. This situation is used for a first validation of the numerical simulation we describe in section 5. It must be noted that, due to its non-linearity, this problem has not in general a unique solution.

Let us now consider dynamical conditions:

- i) On S_{R_1} we admit the no-slip condition $V = V_e x_1$,
- ii) On the boundary Σ_{R_1} , V coincides with a solution $V_1^{V_e, D_A, D_B, \Phi}$ obtained for the intermediate zone (see section 3.2).

As the parameters Φ , D_A and D_B are unknown (the study of Φ is one of our main objectives), we must write some supplementary conditions:

- iii) We deal only with mass density fields ρ whose variations are concentrated in a thin layer. Then we can measure the apparent contact angle (see fig. 3 or fig. 4) and we state that Φ coincides with this angle.

- iv) As we study stationary flows, the total mass supply in D_{R_1} must vanish ($\int_{\Sigma_{R_1}} \rho V_1^{V_e, D_A, D_B, \Phi} \cdot \tilde{n} \, dl = 0$), so:

$$D_B = - \left[\int_{\Sigma_{R_1}} \rho V_1^{V_e, 0, 1, \Phi} \cdot \tilde{n} \, dl \right]^{-1} \left[\int_{\Sigma_{R_1}} \rho V_1^{V_e, 1, 0, \Phi} \cdot \tilde{n} \, dl \right] D_A. \quad (4.1)$$



v) The mass transfer from phase \mathcal{A} to phase \mathcal{B} is unknown. This uncertainty comes from external conditions (see section 3.1). We assume that the phases are close enough to the chemical equilibrium for the mass transfer across the interface to be negligible for $r \geq R_1$. Thus $D_{\mathcal{A}}$ will be adjusted to make mass transfer vanish at $r = R_1$.

These last three conditions allow us to compute the parameters Φ , $D_{\mathcal{A}}$ and $D_{\mathcal{B}}$ when the field ρ is known. Then, using ii), we know the velocity field on the boundary Σ_{R_1} .

Let us sum up our boundary conditions: we write a non-homogeneous Neumann condition for the mass density field ρ , plus a global condition upon the mass M contained in the inner zone. For the velocity field, we write a non-homogeneous Dirichlet condition which depends on the mass density field and on a mass transfer $D_{\mathcal{A}}$. The two parameters M and $D_{\mathcal{A}}$ represent the influence of external conditions upon the flow in the inner zone. An adequate selection of these parameters will lead to a near plane interface without mass transfer at $r = R_1$.

4.2 EQUATIONS OF THE INNER PROBLEM, DIMENSIONLESS PARAMETERS

Recalling the set of equations stated in section 2 and the boundary conditions discussed in the previous section, the problem is to find a vector field \tilde{V} and a scalar field ρ such that:

$$\rho \tilde{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial W}{\partial \rho} - \lambda \Delta \rho \right) = \nabla \cdot (\Pi) \quad \text{in } \mathcal{D}_{R_1}, \quad (4.2)$$

$$\nabla \cdot (\rho \tilde{V}) = 0 \quad \text{in } \mathcal{D}_{R_1} \quad (4.3)$$

$$\tilde{V} = V_e x_1 \quad \text{on } \mathcal{S}_{R_1} \quad (4.4)$$

$$\tilde{n} \cdot \nabla \rho = G \quad \text{on } \mathcal{S}_{R_1} \quad (4.5)$$

$$\tilde{n} \cdot \nabla \rho = 0 \quad \text{on } \Sigma_{R_1} \quad (4.6)$$

$$\tilde{V} = \tilde{V}_1^{V_e, D_{\mathcal{A}}, D_{\mathcal{B}}, \Phi}(\theta) \quad \text{on } \Sigma_{R_1} \quad (4.7)$$

$$\int_{\mathcal{D}_{R_1}} \rho \, ds = M, \quad (4.8)$$

the parameters Φ , M , $D_{\mathcal{A}}$ and $D_{\mathcal{B}}$ being such that

- i) Φ is the apparent contact angle,
- ii) the curvature vanishes at $r = R_1$,
- iii) no mass transfer occurs at $r = R_1$,
- iv) total mass supply vanishes.

We define the characteristic surface energy σ , mass density ρ_d and length L by

$$\sigma = \sqrt{2\lambda} \int_{\rho_v}^{\rho_l} \sqrt{W(\rho)} \, d\rho, \quad \rho_d = \frac{\rho_l - \rho_v}{2}, \quad L = \frac{\rho_d^2 \lambda}{\sigma}. \quad (4.9)$$

The length L is characteristic of the thickness of the interface and σ is the surface tension. We define the dimensionless parameters

$$R = \frac{R_1}{L}, \quad u_m = \frac{\rho_l + \rho_v}{2\rho_d}, \quad g = \frac{G\rho_d\lambda}{\sigma}, \quad m = \frac{2M}{L\rho_d}, \quad (4.10)$$

$$C_a = \frac{\xi V_e}{\sigma}, \quad K = \frac{\nu}{\xi}, \quad d_{\mathcal{A}} = \frac{D_{\mathcal{A}}}{V_e L}, \quad d_{\mathcal{B}} = \frac{D_{\mathcal{B}}}{V_e L} \quad (4.11)$$

By construction $R \gg 1$. Far enough from the critical point u_m is of order 1. g is of order 1 and fixes the static contact angle. The capillary number C_a is the ratio of the viscous forces to the surface tension. It is the most important parameter.

Using the dimensionless mass density $u = (2\rho_d)^{-1}(2\rho - (\rho_l + \rho_v))$, the dimensionless velocity $\tilde{v} = V_e^{-1} \tilde{V}$ and the dimensionless free energy $w(u) = \rho_d^2 \lambda \sigma^{-2} W(\rho)$ the problem (4.3)-(4.8) reads

$$(u + u_m) \tilde{\nabla} \left(\frac{\partial w}{\partial u} - \Delta u \right) = C_a \tilde{\nabla} \cdot (\Pi) \text{ in } \mathcal{D}_R \quad (4.12)$$

$$\tilde{\nabla} \cdot ((u + u_m) \tilde{v}) = 0 \quad \text{in } \mathcal{D}_R \quad (4.13)$$

$$\tilde{v} = x_1 \quad \text{on } \mathcal{S}_R \quad (4.14)$$

$$\tilde{n} \cdot \tilde{\nabla} u = g \quad \text{on } \mathcal{S}_R \quad (4.15)$$

$$\tilde{n} \cdot \tilde{\nabla} u = 0 \quad \text{on } \Sigma_R \quad (4.16)$$

$$\tilde{v} = V_1^{1, d_A, d_B, \Phi}(\theta) \quad \text{on } \Sigma_R \quad (4.17)$$

$$\int_{\mathcal{D}_R} u \, ds = m \quad (4.18)$$

where $\Pi = K \operatorname{tr}(\mathbb{D}) \mathbb{I}d + 2 \mathbb{D}$ and $\mathbb{D} = \frac{1}{2}(\nabla v + \nabla v^t)$.

5 Numerical Simulation

5.1 TWO AUXILIARY MINIMIZATION PROBLEMS

Let p be a given scalar field in \mathcal{D}_R , consider the following minimization problem:

$$\inf_{u \in H^1(\mathcal{D}_R)} \left\{ \int_{\mathcal{D}_R} \left[w(u) - pu + \frac{1}{2} \nabla u^2 \right] ds - g \int_{\mathcal{S}_R} u \, dl ; \int_{\mathcal{D}_R} u \, ds = m \right\}. \quad (5.1)$$

As w is a non-convex function, this problem has not in general a unique solution.

If u is a local minimizer of (5.1), for every $\delta \in H^1(\mathcal{D}_R)$ such that $\int_{\mathcal{D}_R} \delta \, ds = 0$, it verifies:

$$\int_{\mathcal{D}_R} \left[\frac{\partial w}{\partial u}(u) \delta - p \delta + \nabla u \cdot \nabla \delta \right] ds - g \int_{\mathcal{S}_R} \delta \, dl = 0 \quad (5.2)$$

and then Euler equations:

$$\frac{\partial w}{\partial u}(u) - p - \Delta u = \text{Constant} \text{ in } \mathcal{D}_R, \quad (5.3)$$

$$\tilde{n} \cdot \tilde{\nabla} u - g = 0 \text{ on } \mathcal{S}_R, \quad \tilde{n} \cdot \tilde{\nabla} u = 0 \text{ on } \Sigma_R. \quad (5.4)$$

By differentiation (5.3) implies:

$$\tilde{\nabla} \left(\frac{\partial w}{\partial u}(u) - \Delta u \right) = \tilde{\nabla} p \text{ in } \mathcal{D}_R. \quad (5.5)$$

Now let u be a given scalar field, let $\Phi \in]0, \pi[$, d_A and d_B be three given parameters such that $\int_{\Sigma_R} (u_m + u) V_1^{1, d_A, d_B, \Phi} \cdot \tilde{n} \, dl = 0$ and consider the following minimization problem:

$$\inf_{\tilde{v} \in X} \left\{ \int_{\mathcal{D}_R} \left[\nabla \tilde{v} : \nabla \tilde{v} + \frac{K}{2} \nabla \cdot (\tilde{v})^2 \right] ds \right\} \quad (5.6)$$

where $X = \{ \tilde{v} \in H^1(\mathcal{D}_R); \tilde{\nabla} \cdot ((u_m + u) \tilde{v}) = 0 \text{ in } \mathcal{D}_R, \tilde{v} = x_1 \text{ on } \mathcal{S}_R, \tilde{v} = V_1^{1, d_A, d_B, \Phi} \text{ on } \Sigma_R \}$. The minimizer \tilde{v} of (5.6) verifies the linear system of partial differential equations:

$$\tilde{\nabla} \cdot (\Pi) - (u + u_m) \tilde{\nabla} q = 0 \quad (5.7)$$

$$\tilde{\nabla} \cdot ((u_m + u) \tilde{v}) = 0 \text{ in } \mathcal{D}_R \quad (5.8)$$

$$\tilde{v} = x_1 \text{ on } \mathcal{S}_R \quad (5.9)$$

$$\tilde{v} = V_1^{1, d_A, d_B, \Phi} \text{ on } \Sigma_R \quad (5.10)$$

Here the field q is the Lagrange multiplier of the constraint $\tilde{\nabla} \cdot ((u_m + u) \tilde{v}) = 0$.

It is defined up to a constant. Setting $p = C_a q$, equation (5.7) may be written

$$C_a \tilde{\nabla} \cdot (\Pi) - (u + u_m) \tilde{\nabla} p = 0 \quad (5.11)$$

5.2 ALGORITHM

It is clear from (5.8)-(5.11) and (5.4)-(5.5) that solving simultaneously problems (5.1) and (5.6) leads to a solution of the inner problem (4.12)-(4.18). Such is the principle of our algorithm:

For given parameters m and d_A ,

- i) we first set $p = 0$, solve (5.1) and get an equilibrium configuration u ,
 - ii) we compute the apparent contact angle Φ , the value of d_B such that the total mass supply vanishes and then we get the boundary velocity field $V_1^{1,d_A,d_B,\Phi}$,
 - iii) we solve (5.8)-(5.11) and get a new field p ,
 - iv) we solve (5.1) and get a new mass density field u .
- Then we repeat steps ii) iii) and iv) until they converge.
- Finally we adjust parameters m and d_A and repeat the whole procedure in order to have a near plane interface without mass transfer when $r = R_1$.

Problems (5.1) and (5.6) are discretized by a finite difference method. Problem (5.10) is linear. We solve it by using a bi-conjugate gradient method. The problem (5.1) is strongly nonlinear. We solve it by a steepest descent method. We know that, in general, it has not a unique solution. In order to find the expected solution we need to initialize the mass density field u with a field which is not too far from the solution. This is not very difficult for the equilibrium configuration and, in the dynamical case, we use as an initializing field the solution u obtained for a slightly smaller capillary number C_a . Otherwise the most likely disaster is the inversion

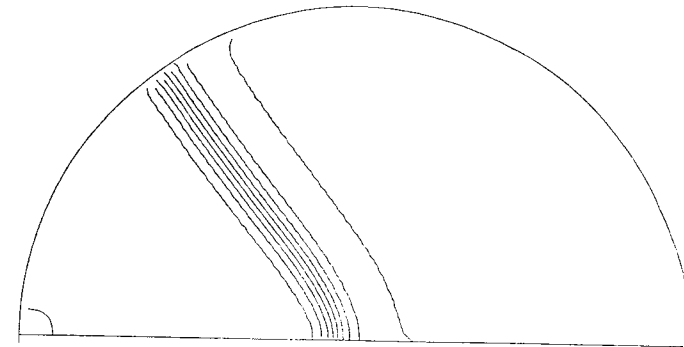


Figure 4. Density field in the inner zone

of the position of phases \mathcal{A} and \mathcal{B} which tends to happen when one of the phases tends to wet the boundary completely.

5.3 DEPENDENCE OF THE DYNAMIC CONTACT ANGLE ON THE PARAMETERS

The dimensionless free energy w is a positive function such that $w(-1) = w(1) = 0$ and $\int_{-1}^1 \sqrt{2w(t)} dt = 1$. In our simulation we use the polynomial $w(u) = \frac{9}{32}(1 - u^2)^2$. Such a form for the free energy is valid when the fluid is not too far from the critical point. We hope that, qualitatively, our results do not depend on the form of w .

In figure 4 we show the density field in a typical situation: $R = 20$, $u_m = 2$, $K = 10$, $g = 0$, $C_a = 20 \times 10^{-3}$. In figure 5 we show the flow lines in the same

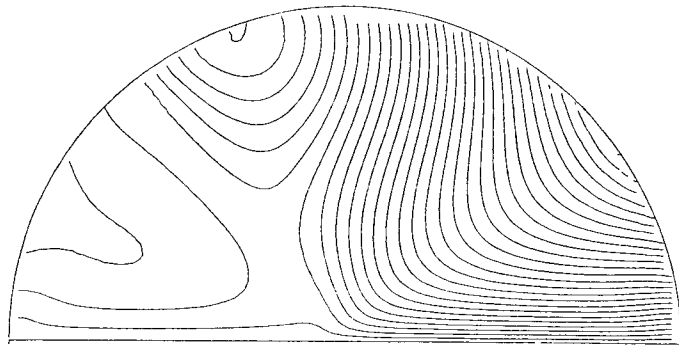


Figure 5. Flow lines in the inner zone

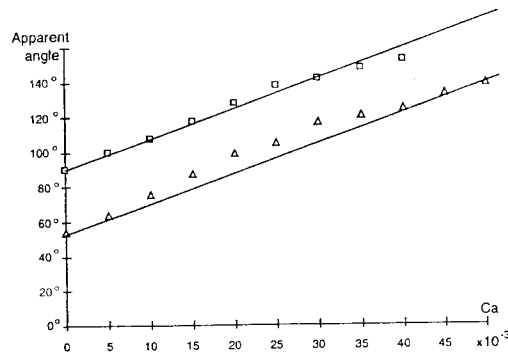


Figure 6. Dependence of the contact angle on the capillary number

situation. We notice that the curvature of the interface and the transfer of mass across the interface are concentrated in the immediate vicinity of the contact line.

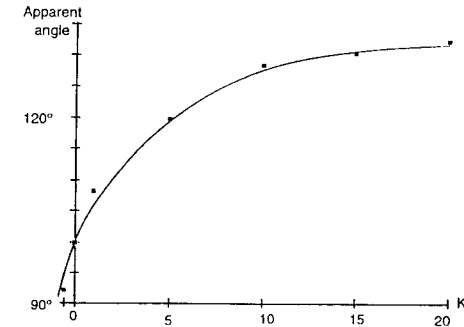


Figure 7. Dependence of the contact angle on the parameter K

So the dynamic contact angle is well determined: here it is about 1.9 while the static contact angle is $\pi/2$.

In figure 6 we show the dependence of the contact angle on the capillary number Ca in two cases ($R = 20, u_m = 2, K = 10, g = 0$) and ($R = 20, u_m = 2, K = 10, g = -0.3$). When $Ca = 0$ the apparent contact angle coincides with the theoretical static angle predicted by equation (2.21) then its increase is almost linear with respect to the capillary number. The growth rate does not depend on the static angle (see fig. 6).

We have noted a weak influence of parameter u_m : the growth rate decreases slightly when u_m increases. This dependence can be interpreted in the following way: when approaching the critical temperature, u_m increases, the difference between the mass densities of the phases decreases and the mass transfer is easier.

As expected, the growth rate depends strongly on the parameter K which is

responsible for mass transfer dissipation. Fig. 7 shows the influence of K in the situation $R = 20$, $u_m = 2$, $g = 0$, $C_a = 20 \times 10^{-3}$.

6 Conclusion

The Cahn-Hilliard model used in this paper is very simple and comparisons with experiments would be difficult. However it gives an enlightening view of the flow at a contact line. First of all, mass transfer is the fundamental fact which removes the force singularity (in this connection it would be interesting to extend this study to the motion of an interface dividing two slightly mixable fluids). Secondly, it shows that the main change in the direction of the interface lies in the immediate vicinity of the contact line (the same region where mass transfer occurs). In this region the interface cannot in any way be considered a dividing surface and the classical model of capillarity cannot be applied. Thus, any study considering the interface a bidimensional surface must use a velocity-dependent contact angle: our results are in favour of model "D" following the notation and discussion of Hocking [11]. Indeed no real angle equal to the static angle can be defined.

We found a near linear relation between the angle and the velocity of the contact line. This linear dependence gives reasonable results if there is no hysteresis of the static contact angle [8]. Indeed, there is no hysteresis in our model. The way to model contact angle hysteresis in the Cahn-Hilliard theory is to consider rough surfaces. This has not been done here (and would be incompatible with the steady flow assumption).



For a large capillary number, some problems of convergence of our algorithm arise. That is why in figure 6 the apparent contact angle does not reach the values $\Phi = 0$ or $\Phi = \pi$. It might be a purely numerical phenomenon. It might be connected with the non-uniqueness of the solution of (5.1). But it might also be due to the physics: a steady flow may not exist for a large velocity or a small angle. Indeed experiments (as reported in [9]) seem to point out a maximum value for the contact angle.

Our study is valid in isothermal conditions. It is also valid in adiabatic conditions (it is enough to replace the free energy E by the internal energy). But the energy transport may be the factor which limits phase transition near the moving contact line. It should be necessary to add the heat equation to our problem (4.3-4.8).

Acknowledgements

This research has been supported by the Centre National d'Etudes Spatiales (Contract N°92/CNES/0295) and by the Region Provence-Alpes-Côte d'Azur.

References

1. E. HUH, L. E. SRIVEN, *J. Colloid Interface Sci.*, 35, 85 (1971).
2. V. E. B. DUSSAN, S. H. DAVIS, *J. Fluid Mech.* 65, 71 (1974).
3. V. V. PUKHNACHOV, V. A. SOLONNIKOV, *Prikl. Math. Mech. USSR*, 46, 771 (1983)
4. P. SEPPECHER, *10^e Congrès Français de Mécanique*, 3, 307 (1991).
5. P. G. DE GENNES, *Reviews of Modern Physics*, 57, N°3, Part I, 827 (1985).
6. L. M. HOCKING, *J. Fluid Mech.*, 77, 209 (1977).

7. P. A. DURBIN, *Q. Jl Mech. appl. Math.*, 42, Pt. 1, 99 (1989).
8. P. J. HALEY, M. J. MIKSIS, *J. Fluid Mech.*, 223, 57-81 (1991).
9. Y. D. SHIKHMURZAEV, *Int. J. Multiphase Flow*, 19, N°4, 589 (1993).
10. C. G. NGAN, V. DUSSAN, *J. Fluid Mech.*, 209, 191 (1989).
11. L. M. HOCKING, *J. Fluid Mech.*, 239, 671 (1991).
12. J. KOPLIK, J. R. BANAVAR, J. F. WILLEMSSEN, *Phys. Fluids*, A1 (5), 781, (1989)
13. P. GERMAIN, *J. Mécan.*, 12, 235 (1973).
14. F. DELL ISOLA, P. SEPPECHER, *Meccanica (submitted in)* (1995).
15. J. W. CAHN, *J.chem.Phys.*, 8, 66, 3667 (1977).
16. J.E. DUNN, J. SERRIN, *Arch. Rational Mech. Anal.*, 88, 95 (1985).
17. I. MÜLLER, *Thermodynamics*, Pitman Ed., London. (1985).
18. P. CASAL, *C.R.Acad.Sci. Paris*, 274, série A, 1571, (1972).
19. P. CASAL, H. GOUIN, *C.R.Acad.Sci. Paris*, 300, série II, 231 (1985).
20. P. SEPPECHER, *Annales de Physique*, 13, N°2, 13 (1988).
21. P. SEPPECHER, *C.R.Acad.Sci. Paris*, 309, série II, 497 (1989).
22. L. MODICA, *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 5, 453 (1987).
23. J. W. CAHN, J. E. HILLIARD, *J. chem. Phys.*, 31, N°3, 688 (1959).
24. G. BOUCHITTE, P. SEPPECHER, *Motion by Mean Curvature (proceedings)*, G. Buttazzo, A. Visintin Ed., De Gruyter, New York, 23 (1992).
25. P. SEPPECHER, *Eur. J. Mech.*, B/Fluids, 12, N°1, 69 (1993).
26. G. ALBERTI, G. BOUCHITTE, P. SEPPECHER, *Arch. Rational Mech. Anal. (submitted in)* (1995).
27. H. K. MOFFATT, *Fluid Mech.*, 18, 1 (1963).

Chapitre 4

Approche variationnelle

4.1 Introduction

La recherche de l'équilibre d'une masse M d'un fluide de Cahn-Hilliard à l'intérieur d'un domaine Ω revient à minimiser son énergie F qui est donnée par

$$F(\rho) = \int_{\Omega} \left(W(\rho) + \frac{\lambda}{2} (\nabla \rho)^2 \right) d\mathcal{H}^3 + \int_{\partial\Omega} W_s(\rho) d\mathcal{H}^2 \quad (4.1)$$

sous la contrainte

$$\int_{\Omega} \rho d\mathcal{H}^3 = M. \quad (4.2)$$

Ici \mathcal{H}^k désigne la mesure de Hausdorff de dimension k . Rappelons que W est un fonction non convexe. Dû à la contrainte de masse (4.2), on ne modifie pas le problème en ajoutant à W une fonction affine. On peut donc supposer que W est une fonction positive s'annulant seulement pour deux valeurs de la densité ρ_v et ρ_l (en considérant la différence de W et de la fonction affine qui lui est bitangente).

L'étude asymptotique de ce problème variationnel a motivé de nombreux travaux. L'un des plus complets est celui de L. Modica (*Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 5, 453, 1987) qui a étudié la Γ -convergence quand ε tend vers zéro de l'énergie

$$F_{\varepsilon}(u) = \varepsilon \int_{\Omega} |Du|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_{\Omega} W_1(u) d\mathcal{H}^3 + \int_{\partial\Omega} W_2(u) d\mathcal{H}^2 \quad (4.3)$$

où W_1 est une fonction positive s'annulant seulement en deux valeurs α_1 et β_1 . Il a montré que l'énergie limite est de la forme:

$$F_0(u) = c_1 \mathcal{H}^2(\partial A \cap \Omega) + \widehat{c}_1 \mathcal{H}^2(A \cap \partial \Omega) \quad (4.4)$$

si u est constante, égale à α_1 dans A et constante, égale à β_1 dans le complémentaire $\Omega \setminus A$, l'énergie étant infinie si u est d'une forme différente. Les coefficients c_1 et \widehat{c}_1 sont déterminés explicitement en fonction de W_1 et W_2 .

La liaison entre ce résultat asymptotique et le modèle des fluides de Cahn-Hilliard est réalisée par l'adimensionnalisation du problème (4.1-4.2). Définissons l'énergie surfacique caractéristique σ , la densité de masse caractéristique ρ_d et la longueur caractéristique L par

$$\sigma = \sqrt{2\lambda} \int_{\rho_v}^{\rho_l} \sqrt{W(\rho)} d\rho, \quad \rho_d = \frac{\rho_l - \rho_v}{2}, \quad L = \frac{\rho_d^2 \lambda}{\sigma}. \quad (4.5)$$

Définissons les quantités sans dimension

$$W_1 = \frac{2\rho_d^2 \lambda W}{\sigma^2}, \quad W_2 = \frac{2W_s}{\sigma} \text{ et } u = \frac{\rho}{\rho_d}. \quad (4.6)$$

Soit \mathcal{L} une longueur caractéristique du domaine, divisons toutes les longueurs par \mathcal{L} (sans changer de notations): on dira qu'on se place à l'échelle "macroscopique". On obtient alors:

$$\frac{F(\rho_d u)}{2\sigma \mathcal{L}^2} = \int_{\Omega} \left(\frac{\mathcal{L}}{L} W_1(u) + \frac{L}{\mathcal{L}} (\nabla u)^2 \right) d\mathcal{H}^3 + \int_{\partial \Omega} W_2(u) d\mathcal{H}^2 \quad (4.7)$$

En posant $\varepsilon = \frac{L}{\mathcal{L}}$, $F_\varepsilon(u) = \frac{F(\rho_d u)}{2\sigma \mathcal{L}^2}$ et $m = \frac{M}{\rho_d \mathcal{L}^3}$, on retrouve l'énergie $F_\varepsilon(u)$ étudiée par Modica. Comme la longueur L est en général beaucoup plus petite que \mathcal{L} , le paramètre ε est très petit ce qui justifie l'approche asymptotique.

Le résultat de Γ -convergence est particulièrement puissant: il reste vrai si l'on ajoute au problème la contrainte de masse $\int_{\Omega} u d\mathcal{H}^3 = m$ et si l'on ajoute dans l'expression de l'énergie une perturbation continue (liée à une force extérieure comme la gravité, par exemple). C'est véritablement un résultat de convergence des modèles au sens intuitif de la mécanique.

Le modèle limite (4.4) est un modèle classique de capillarité dans lequel les phases sont incompressibles de densité α_1 et β_1 , la tension superficielle est constante égale à c_1 et l'angle θ de contact à l'équilibre entre l'interface et la paroi est fixé par la Loi de Young:

$$\cos(\theta) = \frac{c_1}{\widehat{c}_1}. \quad (4.8)$$

Ce résultat est très satisfaisant car il prouve que le modèle des fluides de Cahn-Hilliard est en accord avec tous les résultats d'expériences macroscopiques. On peut cependant être un peu déçu par la relative pauvreté du modèle limite. Pourquoi les phases ne sont-elles pas compressibles? Pourquoi la tension est-elle une constante et ne dépend-elle pas, par exemple, du rayon pour de toutes petites gouttes ou bulles? Pourquoi n'y a-t-il jamais d'interaction entre une interface et une paroi proche? Pourquoi n'y a-t-il pas de tension de ligne le long de la ligne de contact? En fait le processus asymptotique choisi n'est pas neutre. La quantité ε est petite mais ne tend pas naturellement vers zéro. La faire tendre vers zéro est un procédé qui sous-entend quelques hypothèses physiques: il faut donner un comportement en fonction de ε pour toutes les quantités qui interviennent dans le problème. La liste en est vite faite: le domaine Ω , l'énergie volumique W_1 , l'énergie surfacique W_2 et enfin la masse m . Ces quantités devraient, a priori, être notées Ω_ε , $W_{1\varepsilon}$, $W_{2\varepsilon}$ et m_ε . La présentation (4.1) étudiée par Modica revient à supposer qu'elles sont indépendantes de ε . Modifier cette hypothèse conduit à des modèles limites différents.

Une première idée a été de modifier le comportement de l'énergie volumique de manière à pouvoir obtenir des phases compressibles. En effet, admettre que l'énergie volumique se comporte en $\varepsilon^{-1} W_1(u)$, revient à admettre que l'énergie volumique est très grande sauf dans des voisinages extrêmement petits des phases α_1 et β_1 . En écrivant l'énergie volumique sous une forme plus complexe, du type $W_1(u) + \varepsilon^{-1} \widehat{W}_1(u)$, où \widehat{W}_1 est une fonction dont le support S est inclus dans $]\alpha_1, \beta_1[$, on s'attend à obtenir un modèle limite à deux phases compressibles, ces deux phases étant constituées l'une, des densités majorant S , l'autre, des densités minorant S . C'est ainsi que des énergies du type $W_1(u) + \varepsilon^{-3} \widehat{W}_1(\varepsilon^{-1} u)$ ont été considérées (cf. Alberti G., Ambrosio L. and Buttazzo G., *Asymptotic Analysis*, 1995). Dans le modèle limite, les deux

phases sont alors compressibles et constituées des densités positives ou des densités négatives¹.

Dans le premier article que nous présentons, nous considérons un domaine dont une paroi oscille avec une très petite longueur d'onde et une très petite amplitude. Dans ce cas c'est le comportement du domaine Ω_ε qui change. Le but est de modéliser le contact d'une interface avec une paroi rugueuse. La rugosité de la paroi est souvent invoquée pour expliquer le phénomène de l'hystérésis de l'angle de contact² et notre but initial était de comprendre ce phénomène. Malheureusement notre modèle limite ne présente pas d'hystérésis. Nos résultats sont cependant intéressants car ils montrent comment l'énergie de surface (ou de manière équivalente, l'angle de contact) est modifiée par le caractère rugueux de la surface.

Dans le deuxième article, nous nous intéressons à la possibilité d'obtenir un modèle avec tension de ligne le long de la ligne de contact (intersection de l'interface et de la paroi). Une telle tension de ligne est parfois utilisée et mesurée. Nous montrons qu'il est possible d'obtenir un tel modèle à partir du modèle des fluides de Cahn-Hilliard sans faire intervenir de modèle d'ordre supérieur. Nous sommes partis de la constatation que la densité de masse u prenait des valeurs très différentes au voisinage de la ligne de contact qu'ailleurs sur la paroi. On suppose alors que l'énergie de paroi est très grande pour ces valeurs intermédiaires en l'écrivant sous la forme $\lambda_\varepsilon W_2(u)$ où $\lambda_\varepsilon \rightarrow \infty$ et W_2 est une fonction positive à deux puits (comme W_1), s'annulant en α_2 et β_2 . La trace de u sur la paroi tend à prendre ces deux valeurs et à former des phases de surface, elle va donc tendre à être discontinue. Or, pour $\varepsilon > 0$ fixé, une telle discontinuité est interdite par le fait que u doit appartenir à l'espace de traces $H^{1/2}(\partial\Omega)$. On s'attend donc,

¹Lors de la définition de la densité u du problème adimensionnel, une constante arbitraire peut être ajoutée à la densité de masse. C'est pourquoi il ne faut pas s'étonner que u puisse atteindre des valeurs négatives.

²Lorsqu'on mesure l'angle de contact formé par la surface d'une goutte avec le plan sur lequel elle est posée, on s'aperçoit que cet angle n'est pas fixé: si la goutte vient de s'étaler l'angle prend une valeur appelée angle d'avancement, si la goutte vient de se rétracter, l'angle prend une autre valeur appelée angle de recul. Toutes les valeurs entre ces deux angles peuvent être atteintes à l'équilibre. Ce phénomène s'appelle l'hystérésis de l'angle de contact.

dans ce cas, à une concentration d'énergie le long de la ligne de contact lorsque ε tend vers zéro. Nos résultats montrent en effet l'existence (à la limite) de deux phases sur la surface $\partial\Omega$ séparées par une courbe rectifiable sur laquelle se concentre de l'énergie. De plus nous mettons en évidence un phénomène qui, à notre connaissance n'avait pas encore été signalé: la ligne séparant les phases de surface peut ne pas coïncider avec la ligne de contact. Cette possible dissociation est importante sur le plan physique et pratique. En effet nous montrons qu'un problème d'équilibre capillaire avec tension de ligne est un problème mal posé si l'on n'envisage pas le découplage de la ligne de contact et de la ligne de séparation de phases (cela n'est pas lié à l'utilisation du modèle de Cahn-Hilliard). En appliquant ce nouveau modèle à des exemples précis (comme l'équilibre de gouttes de volume croissant posées sur un plan), nous montrons que la possibilité de ce découplage entraîne une discontinuité de l'angle de contact.

Dans le troisième paragraphe nous nous intéressons aux gouttes de très faible rayon. C'est la version mathématique de l'étude effectuée au paragraphe 3.3³. Quand le domaine contient une très petite goutte, la masse M est très voisine de $\rho_v|\Omega|$. Si l'on utilise le procédé d'adimensionnalisation décrit précédemment il faut considérer une masse m_ε tendant vers $\alpha_1|\Omega|$ quand ε tend vers zéro. Nous évitons de traiter un problème avec une contrainte de masse variable en reconsidérant l'adimensionnalisation de l'énergie: nous utilisons comme densité de masse caractéristique $\tilde{\rho}_d = \frac{M}{|\Omega|} - \rho_v$ à la place de ρ_d dans les définitions (4.5-

4.6) et nous posons $u = \frac{\rho - \rho_v}{\tilde{\rho}_d}$. De nouveau on obtient la forme (4.7)

pour l'énergie et la contrainte de masse devient $\int_\Omega u \, d\mathcal{H}^3 = |\Omega|$ (elle ne dépend plus de ε). En contrepartie le comportement de W_1 est modifié par le fait que son deuxième puits β_1 tend vers l'infini quand ε tend vers zéro. Il s'agit d'un problème à deux paramètres (ε et β_1) que nous ne traitons pas dans toute sa généralité. Nous considérons le cas où β_1 est d'un ordre de grandeur infiniment supérieur à ε^{-1} , on considérant une fonction W_1 indépendante de ε et dont le second puits est directement porté à l'infini, ce que nous traduisons par la dégénérescence:

³En théorie de Cahn-Hilliard, ρ_v et ρ_l jouent un rôle symétrique et il est équivalent d'étudier l'équilibre de bulles ou de gouttes.

$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{W_1(t)}{t} = 0$. De plus nous nous limitons à la dimension 1. Nous mettons en évidence l'ordre de grandeur λ_ε de l'énergie lorsque ε tend vers zéro et nous étudions la limite des énergies rescalées $(\lambda_\varepsilon)^{-1}F_\varepsilon$. Il apparaît que les seules limites permises pour la densité de la "phase liquide" sont des masses de Dirac (des "gouttes")

Nous montrons comment l'énergie de chaque goutte dépend de la fonction W_1 et de sa masse⁴.

⁴D'un point de vue physique une goutte de dimension 1 correspond à un film plan liquide. Rappelons qu'en théorie classique de la capillarité l'énergie est alors indépendante de la masse et égale à deux fois la tension superficielle.

4.2 Paroi rugueuse

L'objectif initial du travail présenté dans cette partie était la compréhension du phénomène d'hystérésis de l'angle de contact. En théorie classique de capillarité, cet hystérésis est habituellement compris comme l'effet de la rugosité de la paroi⁵. Cela se comprend aisément en comparant les deux équilibres possibles d'une goutte posée sur une surface périodique représentés dans la figure 4.1.

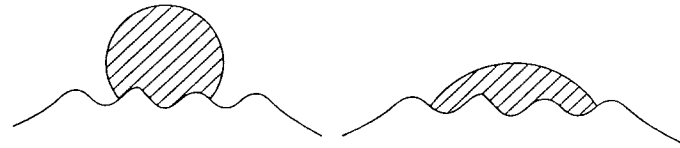


Figure 4.1: différents équilibres d'une goutte sur une paroi rugueuse

Si la longueur d'onde et l'amplitude des oscillations sont très petites, à grande échelle (dans un processus d'homogénéisation) la surface devient plane et l'angle de contact présente un hystérésis (cf. figure 4.2).

Cependant, si la longueur d'onde et l'amplitude des oscillations sont du même ordre de grandeur que L (définie par (4.5)), ce raisonnement n'est plus valable car le modèle de capillarité classique ne peut être utilisé à l'échelle des rugosités. Nous étudions donc l'équilibre d'un fluide de Cahn-Hilliard dans un domaine dont une partie de la paroi est rugueuse, rugosité que nous modélisons par des oscillations périodiques de courte longueur d'onde (cf. figure 2 de l'article). Plus précisément, soit f une fonction de \mathbb{R}^2 à valeur dans $[0, 1]$, Y -périodique ($Y =]-1/2, 1/2[$) et Ω un ouvert borné de \mathbb{R}^3 , dans un système de coordonnées orthogonales (x_1, x_2, x_3) , nous définissons $\Omega_\varepsilon = \Omega \cap \{x_3 >$

⁵On peut aussi invoquer des inhomogénéités à petite échelle des propriétés physico-chimiques de la surface.

$-h_\varepsilon f(x'/d\varepsilon)$, $\Gamma_\varepsilon = \Omega \cap \{x_3 = -h_\varepsilon f(x'/d\varepsilon)\}$, $\Omega_0 = \Omega \cap \{x_3 > 0\}$ et $\Gamma_0 = \Omega \cap \{x_3 = 0\}$ (les suites h_ε et δ_ε sont respectivement équivalentes à $\varepsilon\delta\gamma^{-1}$ et $\varepsilon\gamma^{-1}$, les paramètres δ, γ caractérisent la forme des rugosités, ils appartiennent à $]0, +\infty[$).

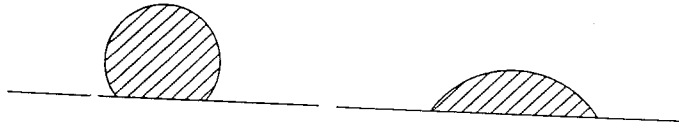


Figure 4.2: différents équilibres sur la paroi homogénéisée

Nous cherchons à minimiser l'énergie suivante:

$$F_\varepsilon(u) = \varepsilon \int_{\Omega_\varepsilon} |Du|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_{\Omega_\varepsilon} W_1(u) d\mathcal{H}^3 + \int_{\partial\Omega_\varepsilon} W_2(u) d\mathcal{H}^2 \quad (4.9)$$

sous la contrainte $\int_{\Omega_\varepsilon} u d\mathcal{H}^3 = m$. Sous certaines hypothèses techniques concernant les fonctions W_1 et W_2 nous montrons que l'énergie limite est de la forme

$$F_0(u) = c_1 \mathcal{H}^2(\partial A \cap \Omega_0) + \widehat{c}_1 \mathcal{H}^2(A \cap (\partial\Omega_0 - \Gamma_0)) + \widehat{c}_1 \mathcal{H}^2(A \cap \Gamma_0) \quad (4.10)$$

si u est constante, égale à α_1 dans A et constante, égale à β_1 dans le complémentaire $\Omega_0 \setminus A$ (l'énergie étant infinie si u est d'une forme différente).

Les coefficients c_1 et \widehat{c}_1 sont déterminés explicitement en fonction de W_1 et W_2 , le coefficient \widehat{c}_1 est déterminé modulo la résolution d'un problème local (équation (2.5) de l'article). Nous montrons que ce problème local peut être traité sur une unique période⁶. Nous montrons

⁶Le fait de pouvoir étudier le problème local sur une unique période n'est pas trivial car notre fonctionnelle est non convexe. Plusieurs exemples en théorie de l'homogénéisation font apparaître une différence entre l'énergie moyennée sur de nombreuses périodes et l'énergie minimale calculée sur une période unique.

que \widehat{c}_1 dépend continuellement des paramètres de rugosité (δ, γ) et que toutes les valeurs de l'intervalle $[\widehat{c}_1, c_1]$ peuvent être atteintes. Cela signifie d'un point de vue pratique que, pour un matériau de paroi donné, la rugosité de la paroi peut accroître sa mouillabilité jusqu'à atteindre la mouillabilité parfaite⁷.

Nos résultats ne mettent pas en évidence de phénomène d'hystérésis. Cela provient du fait que la technique mathématique utilisée (la Γ -convergence) ne garde pas trace des minima locaux de la fonctionnelle. Or, tel que le phénomène est habituellement interprété, il provient de l'existence de minima locaux en grand nombre et "très voisins". Nos résultats permettent de s'interroger sur la pertinence physique de cette interprétation car les barrières énergétiques séparant ces différents minima locaux sont très faibles (elles tendent vers zéro avec ε). Cela signifie que les solutions d'équilibre correspondantes sont très peu stables ce qui est contraire à l'expérience. Je pense que le phénomène d'hystérésis n'est pas seulement dû à la rugosité (ou l'inhomogénéité) de la paroi, mais à la conjonction de cette rugosité et de la forte dissipation liée à tout mouvement de la ligne de contact (mouvement que nous avons étudié au paragraphe 3.3). Cette étude reste à faire.

⁷On dit qu'une paroi est parfaitement mouillante si le liquide s'étale complètement sur la paroi à l'équilibre. Cela correspond à une valeur de l'angle de contact égale à π et à une valeur de l'énergie de paroi égale à la tension superficielle: dans notre cas $\widehat{c}_1 = c_1$.

L'article qui suit a été publié sous la référence: "Cahn and Hilliard fluid on an oscillating boundary, G.Bouchitté and P.Seppecher, Motion by Mean Curvature, de Gruyter Ed., p. 23-42, 1992".

Attention: Les notations de cet article diffèrent de celles utilisées dans l'introduction.

Cahn and Hilliard fluid on an oscillating boundary

G.Bouchitté and P.Seppecher

Abstract. A Cahn and Hilliard fluid is in equilibrium in a solid container. The rugosity of the boundaries is taken into account through the assumption of an oscillating boundary whose period and amplitude are of the same order of magnitude as the thickness of the interface. We study the Γ -limit of this problem when this length tends to zero. We obtain a homogenized boundary energy and we show that rugosity may modify the wetting property of the wall until it is completely wet.

1. Introduction

In 1959 Cahn and Hilliard [1] wrote a continuum model for two-phase fluids. The postulated energy was of the form:

$$E(u) = \int_{\Omega} W(u) dx + \lambda \int_{\Omega} |Du|^2 dx + \int_{\partial\Omega} \sigma(u) dH^{N-1}$$

u is the density of the fluid. u is positive, $\int_{\Omega} u dx = m$. $W(u)$ is the volumic free energy for an homogeneous fluid of density u . It is a non convex function (for example the energy associated with the Van der Waals pressure). See figure 1 which defines α_1 and α_2 , values of u in the phases. λ is a physical parameter which may be deduced from experimental surface tension as far as the function W is known. $\sigma(u)$ is a surfacic energy which characterizes the interactions between a fluid of density u and the wall ($\sigma(u)$ is positive). This model has its own length L^c :

$$L^c = \sqrt{\lambda} \frac{\alpha_2 - \alpha_1}{2 \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \sqrt{W(u)} du}$$

which is characteristic of the thickness of the transition layer between the two phases $u = \alpha_1$ and $u = \alpha_2$.

As L^c is very small it is natural to study the asymptotic behaviour of the model as L^c tends to zero. This procedure is purely mathematical and the model does not include assumptions on the behaviour of the other physical quantities W, σ, m and Ω itself with respect to L^c . We emphasize that the postulated behaviour for these quantities are primordial for the resulting model.

If W, σ, m, Ω are constant, we lose every surface tension effect. For that the usual asymptotic problem is concerned with the limit as ϵ tends to zero of the rescaled energy :

$$E^\epsilon(u) = \int_{\Omega} \frac{W_0(u)}{\epsilon} dx + \epsilon \int_{\Omega} |Du|^2 dx + \int_{\partial\Omega} \sigma(u) dH^{N-1}$$

where $W_0 \geq 0, W_0(\alpha_1) = W_0(\alpha_2) = 0$ ($W_0(u) = W(u) - l(u)$ see figure 1)

This problem was completely solved in 1987 by L. Modica [2]. The resulting energy is given by:

$$E_0(u) = c H^{N-1}(\partial^* A \cap \Omega) - \widehat{c} H^{N-1}(\partial^* A \cap \partial\Omega)$$

if $u = \alpha_1 1_A + \alpha_2 1_{\Omega \setminus A}$ and $per_{\Omega}(A) < +\infty$

$$E_0(u) = +\infty \text{ otherwise,}$$

where

$$c = 2 \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \sqrt{W_0(s)} ds$$

$$\widehat{c} = \widehat{\sigma}(\alpha_2) - \widehat{\sigma}(\alpha_1)$$

$$\widehat{\sigma}(t) = \inf\{\sigma(s) + 2 \int_s^t \sqrt{W_0(u)} du \mid s \in \mathbb{R}\}$$

c is the surface tension. Note that $|\widehat{c}| \leq c$ and that the ratio $\widehat{c}/c = \cos \theta$ gives the contact angle θ between the interface and the wall, following Young's law.

Let us now list some other dependances of W, σ, m and Ω with respect to ϵ , which lead to different models.

The form chosen by L. Modica for W ($W = W_0/\epsilon$) ensure that c is a finite non vanishing quantity, but it avoids any compressibility effect (the values of u in the phases are prescribed). A way to include some compressibility effects is to consider a family of functions W_ϵ so that, as ϵ tends to zero, $\int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \sqrt{W_\epsilon(u)} du$ tends to infinity and $d^2 W_\epsilon / du^2(\alpha_1)$ remains finite. That was done by Buttazo and Al.[3] who considered the family $W_\epsilon(u) = W_0(u) + 1/\epsilon^3 \psi(u/\epsilon)$ where W_0 is of the type described in figure 1 and ψ is a positive function with $supp(\psi) \subset\subset [\alpha_1, \alpha_2]$.

When a liquid film lies on a wall, the vicinity of the interface and the wall leads to strengths which may stabilize or not the film [4]. The dependence of the total energy with respect to the thickness of the film can be obtained by letting m depend on ϵ in such a way that it converges to $\int_{\Omega} \alpha_2 dx$.

In this paper we concentrate on the effects due to the rugosity of the wall already pointed out for their relationship with friction and hysteresis phenomenon [5] (i.e. the difference between the receding and the advancing contact angle).

We will then assume that the boundary of Ω is oscillating with period d_ϵ and amplitude h_ϵ tending to zero with ϵ : Ω depends upon ϵ .

In the second section we will give a precise mathematical setting of the problem and state the main theorem of convergence (Γ -convergence of associated functionals). We are led to a relaxed boundary contact energy $\widehat{\sigma}$ which is related to a local problem.

In section 3 we study the influence of the surface parameters (rugosity parameters) upon this energy $\widehat{\sigma}$. We show that, for a given fluid and a given material for the wall, the rugosity parameters can increase the contact angle continuously from its value on a flat wall to π (complete wetting).

Section 4 is devoted to proofs.

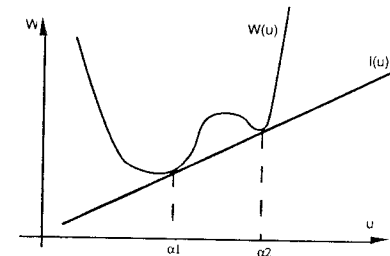


figure 1

2. The main theorem

Let Ω be a bounded open subset \mathbb{R}^N with a smooth boundary. An element $x \in \mathbb{R}^N$ is described by its coordinates in an orthogonal basis. As the last coordinate x_N plays a special role in our problem we shall write $x = (x', x_N)$ where $x' = (x_1, x_2, \dots, x_{N-1})$.

The oscillating boundary is expressed in terms of a function $f : \mathbb{R}^{N-1} \rightarrow [0, 1]$ which is assumed to be C^1 and Y -periodic where $Y =]-1/2, 1/2[\times \mathbb{R}^{N-1}$. Define for every positive d and h :

$$\Delta(d, h) = \{x_N > -hf(x'/d)\}$$

$$\Lambda(d, h) = \{x_N = -hf(x'/d)\}$$

Let d_ϵ and h_ϵ be two sequences of positive parameters tending to zero as $\epsilon \rightarrow 0$. We consider the following subsets of \mathbb{R}^N (see figure 2):

$$\begin{aligned} \Omega_\epsilon &= \Delta(d_\epsilon, h_\epsilon) \cap \Omega & ; & & \Omega_0 &= \Delta(0, 1) \cap \Omega \\ \Gamma_\epsilon &= \Lambda(d_\epsilon, h_\epsilon) \cap \Omega & ; & & \Gamma_0 &= \Lambda(0, 1) \cap \Omega \\ \partial\Omega_\epsilon &= \Gamma_\epsilon \cup \Gamma' & ; & & \partial\Omega_0 &= \Gamma_0 \cup \Gamma' \end{aligned}$$

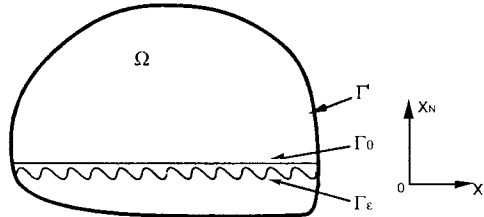


figure 2

A zooming of a part of Γ_ϵ brings us to consider, λ and α being two real parameters, the subset: $B_\lambda = \lambda Y \times \mathbb{R}$ (see figure 3) and the following subsets of L^2_{loc} :

$$\begin{aligned} A_\lambda^L(\alpha) &= \{u \in H^1_{loc}(\Delta(1, 1)); u \text{ } \lambda Y \text{ periodic in } x'; u = \alpha \text{ for } x_N > L\} \\ B_\lambda^L(\alpha) &= \{u \in A_\lambda^L(\alpha); u = \alpha \text{ on } \partial B_\lambda \cap \{x_N > 0\}\} \end{aligned}$$

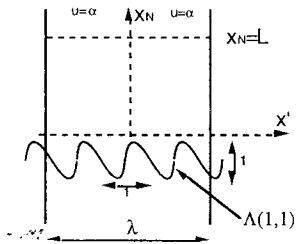


figure 3

The multiphase problem with the rough boundary Γ_ϵ reads as:

$$\begin{aligned} (\mathcal{P}^\epsilon) \quad & \inf \{E^\epsilon(u), u \in L^2(\Omega), \int_\Omega u = m\} \quad \text{where:} \\ E^\epsilon(u) &= \int_{\Omega_\epsilon} [\epsilon |Du|^2 + \frac{1}{\epsilon} W(u)] dx + \int_{\partial\Omega_\epsilon} \sigma(u) dH^{N-1} \\ & \text{if } u \in H^1(\Omega_\epsilon) \text{ and } u = 0 \text{ on } \Omega \setminus \overline{\Omega_\epsilon}, \\ E^\epsilon(u) &= +\infty \text{ otherwise.} \end{aligned}$$

We will make the following assumptions:

$$(H1) \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{h_\epsilon}{d_\epsilon} = \delta; \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{d_\epsilon} = \gamma; \quad \delta, \gamma \in]0, +\infty[$$

$$(H2a) \quad W \text{ is } C^2; \quad W \geq 0 \text{ and satisfies:}$$

$$(b) \quad W(u) = 0 \iff u \in \{\alpha_1, \alpha_2\}$$

$$(c) \quad W - W^{**} \leq M \text{ for a suitable constant } M$$

$$(d) \quad W(u) \geq \lambda_0 |u|^2 - \mu_0 \text{ where } \lambda_0 > 0$$

$$(e) \quad W''(\alpha_i) > 0 \text{ (finite compressibility of the two phases)}$$

$$(H3) \quad \sigma(u) \text{ is continuous; } \sigma(u) \geq 0 \text{ and } \sigma - \sigma^{**} \leq M$$

Here W^{**} and σ^{**} denote the convexification of W and σ .

Our main result states that solutions of \mathcal{P}^ϵ converge in $L^2(\Omega)$ to the solutions of a problem \mathcal{P}^0 . To express this limit problem \mathcal{P}^0 we need the space $BV(\Omega_0)$ of functions $u \in L^1(\Omega_0)$ such that $|Du|(\Omega_0) = \sup\{\int_{\Omega_0} u \operatorname{div} g \, dx; g \in C^1_0(\Omega; \mathbb{R}^N), |g| \leq 1\} < +\infty$.

We also use the following surface energies:

$$c = 2 \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} \sqrt{W(s)} \, ds \tag{2.1}$$

$$\widehat{c} = \widehat{\sigma}(\alpha_2) - \widehat{\sigma}(\alpha_1) \tag{2.2}$$

$$\widehat{\sigma}(\alpha) = \inf\{\sigma(s) + 2 \left| \int_s^\alpha \sqrt{W(u)} \, du \right|, s \in \mathbb{R}\} \tag{2.3}$$

$$\widehat{\widehat{c}} = \widehat{\widehat{\sigma}}(\alpha_2) - \widehat{\widehat{\sigma}}(\alpha_1) \tag{2.4}$$

$$\widehat{\sigma}(\alpha) = \inf_{L>0} \inf_{u \in \mathcal{A}_L^+(\alpha)} \left\{ \int_{B \cap \Delta(1,1)} \left\{ \frac{\delta}{\gamma} W(u) + \frac{\gamma}{\delta} \left| \frac{\partial u}{\partial x_N} \right|^2 + \gamma \delta \left| \frac{\partial u}{\partial x'} \right|^2 \right\} dx + \int_{B \cap \Lambda(1,1)} a_\delta(x') \sigma(u) dH^{N-1} \right\} \quad (2.5)$$

where a_δ is a distortion factor defined as:

$$a_\delta = \frac{(1 + \delta^2 |\nabla f|^2)^{1/2}}{(1 + |\nabla f|^2)^{1/2}} \quad (2.6)$$

Now \mathcal{P}^0 reads as:

$$(\mathcal{P}^0) \quad \inf \{ E^0(u), u \in L^2(\Omega), \int_\Omega u = m \} \quad \text{where :}$$

$$E^0(u) = \frac{c}{\alpha_2 - \alpha_1} \int_{\Omega_0} |Du| dx + \int_{\Gamma'} \widehat{\sigma}(u) dH^{N-1} + \int_{\Gamma_0} \widehat{\sigma}(u) dH^{N-1}$$

if $u \in BV(\Omega)$, $u(x) \in \{\alpha_1, \alpha_2\}$ a.e. on Ω_0 , $u(x) = 0$ a.e. on $\Omega \setminus \Omega_0$,

$E^0(u) = +\infty$ otherwise.

Theorem 2.1. Under (H1), (H2), (H3), the sequence E^ε Γ -converges to E^0 in $L^2(\Omega)$, that is:

(i) For every sequence (u_ε) converging to $u \in L^2(\Omega)$, one has :

$$\liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} E^\varepsilon(u_\varepsilon) \geq E^0(u)$$

(ii) For every $u \in L^2(\Omega)$, there exists a sequence (u_ε) such that :

$$u_\varepsilon \rightarrow u \text{ in } L^2(\Omega), \quad \limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} E^\varepsilon(u_\varepsilon) \leq E^0(u)$$

Moreover we can choose u_ε so that $\int_\Omega u_\varepsilon dx = \int_\Omega u dx$ holds for every ε .

We notice that for $E^0(u) < +\infty$, u takes the form $u = \alpha_1 1_A + \alpha_2 1_{\Omega_0 \setminus A}$ where $A \subset \Omega_0$ is a measurable subset with a finite perimeter in Ω_0 that is: $\int_{\Omega_0} |D1_A| < +\infty$. Denoting by $\partial^* A$ the reduced boundary of A (see the book by Giusti [6] for all related concepts), we find that (\mathcal{P}^0) reduces to a purely geometrical problem with respect to A (liquid drop problem):

$$(\widetilde{\mathcal{P}}^0) \quad \inf \{ c H^{N-1}(\partial^* A \cap \Omega_0) - \widehat{c} H^{N-1}(\partial^* A \cap \Gamma') + \widehat{c} H^{N-1}(\partial^* A \cap \Gamma_0); A \subset \Omega_0, |A| = m_1 \}$$

where $m_1 = \frac{|\Omega|}{\alpha_2 - \alpha_1} \alpha_2 - m$, $m_1 \in [0, |\Omega|]$.

As a consequence of theorem 2.1 we get the convergence of $(\mathcal{P}^\varepsilon)$:

Theorem 2.2. Fix $m \in]\alpha_1|\Omega|, \alpha_2|\Omega|[$ (existence of two phases). Let (u_ε) be a sequence in $L^2(\Omega)$ such that:

$$E^\varepsilon(u_\varepsilon) - \inf \mathcal{P}^\varepsilon = o(\varepsilon), \quad \int_\Omega u_\varepsilon dx = m$$

Then (u_ε) is relatively compact and every cluster point u is a solution of (\mathcal{P}^0) that is $u = \alpha_1 1_A + \alpha_2 1_{\Omega_0 \setminus A}$ where A is solution of the liquid drop problem $(\widetilde{\mathcal{P}}^0)$.

Comment: The wetting properties of the rough wall Γ_0 will be deduced from the ratio \widehat{c}/c and compared with that of the flat wall Γ' characterized by \widehat{c}/c . These ratios will be shown to be in $[-1, 1]$ (see Sec. 3) and have a precise geometrical meaning: they are the cosine of the contact angle between the fluid phase α_1 and the wall in case this contact occurs on Γ_0 or on Γ' .

3. Estimates on the local problem and dependence of the homogenized boundary energy with respect to the rugosity parameters.

In what follows, α is assigned to take value α_1 or α_2 . Given $\delta, \gamma \in]0, +\infty[$, it is convenient to define for every $u \in H_{loc}^1$ and B Borel subset of \mathbb{R}^N :

$$G(u, B) = \int_{\Delta(1,1) \cap B} \left\{ \frac{\delta}{\gamma} W(u) + \frac{\gamma}{\delta} \left| \frac{\partial u}{\partial x_N} \right|^2 + \delta \gamma \left| \frac{\partial u}{\partial x'} \right|^2 \right\} dx + \int_{\Lambda(1,1) \cap B} a_\delta(x') \sigma(u^+) dH^{N-1} \quad (3.1)$$

u^+ denoting the trace from above of u on $\Lambda(1,1)$.

We will use (also in sec. 4), the following local problems:

$$\sigma_\lambda^L(\alpha) = \inf \left\{ \frac{G(u, B_\lambda)}{\lambda^{N-1}}; u \in \mathcal{A}_\lambda^L(\alpha) \right\} \quad (3.2)$$

$$\tau_\lambda^L(\alpha) = \inf \left\{ \frac{G(u, B_\lambda)}{\lambda^{N-1}}; u \in \mathcal{B}_\lambda^L(\alpha) \right\} \quad (3.3)$$

where λ, L are positive reals.

As $\widehat{\sigma}$ (see (2.5)) and the last expressions depend on δ and γ , we will sometimes write $\widehat{\sigma}(\gamma, \delta)$, $\sigma_\lambda^L(\alpha, \gamma, \delta)$, $\tau_\lambda^L(\alpha, \gamma, \delta)$ and $G_{\gamma, \delta}(u, B)$.

It is easy to check that $\sigma_\lambda^L(\alpha)$ and $\tau_\lambda^L(\alpha)$ are decreasing functions of L . Moreover:

$$\widehat{\sigma}(\alpha) = \lim_{L \rightarrow \infty} \sigma_\lambda^L(\alpha) \tag{3.4}$$

$$\sigma_\lambda^L(\alpha) \leq \tau_\lambda^L(\alpha) \quad \forall \lambda, \forall L. \tag{3.5}$$

The first estimate (Proposition 3.1) will be crucial for the proof of theorem 2.1.

Proposition 3.1

i) For every $\delta, \gamma, L \in]0, +\infty[$ and every integer λ , one has:

$$\sigma_\lambda^L(\alpha) = \sigma_1^L(\alpha) \tag{3.6}$$

ii) Let I a compact interval in $]0, +\infty[$. Then the following inequalities hold uniformly for $\gamma, \delta \in I$ and for suitable $C, C'(L)$:

$$\sigma_1^L(\alpha) + \frac{C}{\lambda^{N-1}} \leq \tau_\lambda^L(\alpha) \leq \sigma_1^L(\alpha) + \frac{C'(L)}{\lambda^{(N-1)/2}} \tag{3.7}$$

$$\sigma_1^L(\alpha) \leq \widehat{\sigma}(\alpha) \leq \sigma_1^L(\alpha) + o(L) \tag{3.8}$$

Comments:

a) Let us stress the fact that the equality (3.6) is not trivial since the functional involved G is non-convex. In the homogenization theory, several non-convex examples exhibit a gap between the average energy on periodic cells of length $\lambda \in \mathbb{N}$ and the minimal energy taken on a unit cell (see S. Müller [7]). Fortunately this gap does not appear in our problem.

b) The first inequality in (3.7) is straightforward. The procedure to obtain the second one consists in taking the solution u^L associated with $\sigma_1^L(\alpha)$ and in using cut-off functions on $B_\lambda \setminus B_{\lambda'}$ (where $\lambda' \in \mathbb{N}$) and $\lambda' \leq \lambda - 1$ in order to fit the boundary condition $u = \alpha$ on $\partial B_\lambda \cap \{x_N > 0\}$ (cf. the definition of $\mathcal{B}_\lambda^L(\alpha)$ in sec. 2). The parameter $C'(L)$ depends on the norm of $(u^L - \alpha)$ in $L^2(B_1)$.

To prove proposition 3.1 we need the following lemma:

Lemma 3.2 *The variational problem associated with $\sigma_\lambda^L(\alpha)$ has at least one solution. Moreover:*

- i) If $\lambda = k$ is an integer and u is a solution, so is $u(x' - i, x_N)$ for every $i \in \{1, \dots, k-1\}^{N-1}$
- ii) If u and v are two solutions, so are $u \wedge v$ and $u \vee v$.

Proof. The existence of a solution is obtained classically by the weak compactness of minimizing sequences in the closed subset $\mathcal{A}_\lambda^L(\alpha)$ of H_{loc}^1 and by the lower-semicontinuity of $G(\cdot, B_\lambda)$ for this topology.

Assertion (i) is obvious since $u(x' - i, x_N)$ is still kY periodic in x' and agrees with α for $x_N > L$.

Let us prove that $w = u \wedge v$ and $w' = u \vee v$ are also solutions associated with $\sigma_\lambda^L(\alpha)$. Let:

$$A = \{x \in B_\lambda \cap \Delta(1, 1) ; u(x) < v(x)\} \cup \{x \in B_\lambda \cap \Lambda(1, 1) ; u^+(x) < v^+(x)\}$$

(u^+, v^+ denote the traces of u, v on $\Lambda(1, 1)$ from above)

We have:

$$Dw = 1_A Du + 1_{A^c} Dv \quad \text{a.e. on } B_\lambda \cap \Delta(1, 1)$$

$$w^+ = 1_A u^+ + 1_{A^c} v^+ \quad H^{N-1} \text{ a.e. on } B_\lambda \cap \Lambda(1, 1)$$

Hence:

$$G(w, B_\lambda) = G(u, B_\lambda \cap E) + G(v, B_\lambda \cap A^c)$$

$$G(w', B_\lambda) = G(v, B_\lambda \cap E) + G(u, B_\lambda \cap A^c)$$

By adding these two equalities, one gets:

$$G(w, B_\lambda) + G(w', B_\lambda) = G(u, B_\lambda) + G(v, B_\lambda) = 2 \sigma_\lambda^L(\alpha)$$

Since w and w' are also in the admissible set $\mathcal{A}_\lambda^L(\alpha)$, one has:

$$G(w, B_\lambda) = G(w', B_\lambda) = \sigma_\lambda^L(\alpha)$$

□

Proof of Proposition 3.1

$$\text{Define : } \widehat{u}(x', x_N) = \inf_{i \in \{1, 2, \dots, k-1\}^{N-1}} u(x' - i, x_N)$$

From lemma 3.2 we deduce that \widehat{u} is a solution associated with $\sigma_\lambda^L(\alpha)$ ($\lambda \in \mathbb{N}$)

Obviously \widehat{u} satisfies $\widehat{u} = \alpha$ for $x_N > L$ and $\widehat{u}(\cdot, x_N)$ is Y -periodic. Hence $\widehat{u} \in \mathcal{A}_1^L(\alpha)$ and:

$$\sigma_\lambda^L(\alpha) = \frac{G(\widehat{u}, B_\lambda)}{\lambda^{N-1}} = G(\widehat{u}, B_1) = \sigma_1^L(\alpha)$$

Let us just outline the proof of (ii). Let δ_L, γ_L in I . As I is compact, we can assume that, as $L \rightarrow \infty$, $\delta_L \rightarrow \delta, \gamma_L \rightarrow \gamma$ and that u_L , a solution associated with $\sigma_1^L(\alpha, \gamma_L, \delta_L)$ converges weakly to some u in H_{loc}^1 . Using the weak lower semicontinuity in H_{loc}^1 of $G(\cdot, B_1)$, one gets:

$$\widehat{\sigma}(\alpha) = \lim_{L \rightarrow +\infty} \sigma_1^L(\alpha) = \lim_{L \rightarrow +\infty} G(u_L, B_1) \geq G(u, B_1) \tag{3.9}$$

Let us define:

$$\psi(s) = 2 \int_\alpha^s \sqrt{W(t)} dt, \quad v_L = \psi(u_L), \quad v = \psi(u)$$

Since, for suitable $C_0 > 0$:

$$G(u_L, B_1) \geq C_0 \int_{B_1 \cap \Delta(1, 1)} |Dv_L| dx$$

we obtain:

$$\int_{B_1 \cap \Delta(1,1)} |Dv| \, dx \leq \liminf_{L \rightarrow +\infty} \int_{B_1 \cap \Delta(1,1)} |Dv_L| \, dx < +\infty$$

From assumptions (H2c), (H2d) and (H2e), we can show that $\psi(s) \geq C_1 |s - \alpha|^2$ for some suitable $C_1 > 0$. Then:

$$\int_Y |u - \alpha|^2(x', t) \, dx' \leq \frac{1}{C_1} \int_{Y \times \{x_N > t\}} |Dv|$$

Integrating this inequality between $L - 1$ and L gives:

$$\beta_L = \int_{Y \times [L-1, L]} |u - \alpha|^2 \, dx \rightarrow 0 \text{ as } L \rightarrow +\infty$$

We conclude by multiplying u by a suitable cut-off function $\varphi(x_N)$ on $[L - 1, L]$ (see the proof of lemma 4.2 below for a similar construction). That yields:

$$\sigma_1^L(\alpha) \leq G(u, B_1) + o(\beta_L)$$

Combined with (3.9), we obtain (3.7). □

Proposition 3.3

- i) $\widehat{\sigma}(\alpha, \gamma, \delta)$ is continuous with respect to $\delta, \gamma \in]0, +\infty[$.
- ii) For every $\gamma, \delta \in]0, +\infty[$, we have:

$$|\widehat{c}(\gamma, \delta)| = |\widehat{\sigma}(\alpha_2, \gamma, \delta) - \widehat{\sigma}(\alpha_1, \gamma, \delta)| \leq c$$

Proof. The continuity of $\sigma_1^L(\alpha, \cdot, \cdot)$ for every $L > 0$ is straightforward. Then (i) is deduced by using estimate (3.8). For (ii) we prove the inequality $\widehat{\sigma}(\alpha_i) \leq \widehat{\sigma}(\alpha_j) + c$ for $i \neq j$ by extending a solution associated with the definition of $\sigma_1^L(\alpha_j)$ (L being fixed) by a function φ depending only on x_N such that $\varphi(L) = \alpha_j$ and $\varphi(+\infty) = \alpha_2$. □

Now we have to pay attention to the ratio \widehat{c}/\widehat{c} which determines the contact angle on the rough surface associated with γ and δ . This ratio is ruled by the propositions 3.4 and 3.5 below, for which we leave out the proofs in order to be concise.

Proposition 3.4

i) Let us fix $\gamma \in]0, +\infty[$. Then:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0^+} \widehat{\sigma}(\alpha, \gamma, \delta) = \widehat{\sigma}(\alpha), \quad \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \widehat{c}(\gamma, \delta) = \widehat{c}$$

ii) Assume that σ does not reach a minimum on $]\alpha_1, \alpha_2[$. Then:

$$\lim_{\delta \rightarrow +\infty} \widehat{c}(\gamma, \delta) = c$$

Proof. Assertion (i) is obtained by approximating the infimum associated with $\sigma_1^L(\alpha, \gamma, \delta)$ by a function depending only on x_N and constant for $x_N < 0$. □

Comment: By the continuity of $\widehat{c}(\gamma, \cdot)$, we see that $\widehat{c}(\gamma, \cdot)$ ranges onto the interval $[c, \widehat{c}]$. In other words, every situation between the case of a flat surface ($\widehat{c} = \widehat{c}$) and the perfectly wetting case ($\widehat{c} = c$) is reached by increasing the slope factor δ from 0 to $+\infty$.

When the scale of rugosity is large with respect to the thickness of the phase transition ($\gamma \ll 1$), we are led to a local anisotropic Plateau problem:

Recalling that a_δ is given by (2.6), we define, for every fixed $\delta \in]0, +\infty[$, the quantity R_δ and the positively 1-homogeneous convex function $h_\delta(p)$ on \mathbb{R}^N by:

$$h_\delta(p) = (p_N^2 + \delta^2 |p|^2)^{1/2}, \quad R_\delta = \int_Y (1 + \delta^2 |\nabla f|^2)^{1/2} \, dx'$$

Proposition 3.5:

$$i) \quad \lim_{\gamma \rightarrow 0^+} \widehat{\sigma}(\alpha, \gamma, \delta) = \inf_{u \in \mathcal{C}(\alpha)} \left\{ \frac{c}{\alpha_2 - \alpha_1} \int_{B_1 \cap \Delta(1,1)} h_\delta(Du) \, dx + \int_{B_1 \cap \Lambda(1,1)} a_\delta \widehat{\sigma}(u) dH^{N-1} \right\}$$

where

$$\mathcal{C}(\alpha) = \{u \in BV_{loc}(\Delta(1, 1)); u(x) \in \{\alpha_1, \alpha_2\} \text{ a.e.; } u = \alpha \text{ for } x_N > 0\}$$

ii) $\widehat{c}(+\infty, \delta)$ is continuously increasing with respect to δ . Moreover:

$$\widehat{c}(+\infty, \delta) = R_\delta \widehat{c} \quad \text{for } 0 \leq \delta \leq \frac{[(\frac{\widehat{c}}{c})^2 - 1]^{1/2}}{Lip(f)}$$

$$\lim_{\delta \rightarrow +\infty} \widehat{c}(+\infty, \delta) = c$$

Proof. For assertion (i), we refer to Bouchitte [9] where limits of phase transition models with general anisotropic perturbations are described. □

4. Proofs of theorems 2.1 and 2.2

It will be convenient to localize the energy associated with E^ϵ as follows; let us define for every $u \in L^2(\Omega)$ and every Borel subset $B \subset \bar{\Omega}$:

$$F_{\epsilon,d,h}(u, B) = \int_{B \cap \Delta(d,h)} [\epsilon |Du|^2 + \frac{1}{\epsilon} W(u)] dx + \int_{B \cap (\Lambda(d,h) \cup \Gamma')} \sigma(u^+) dH^{N-1}$$

if $u \in H^1(B \cap \Delta(d, h))$,

$F_{\epsilon,d,h}(u, B) = +\infty$ otherwise.

For simplicity $F_{\epsilon,d,h}$ will be denoted F_ϵ so that, if $u = 0$ on $\Omega \setminus \Omega_\epsilon$, one has $E^\epsilon(u) = F_\epsilon(u, \bar{\Omega}_\epsilon)$.

We will use the following lemmas:

Lemma 4.1 (scaling) *Let $\epsilon, h, d > 0$, real parameters. Then, for every $\lambda > 0$ and every v in $L^1(Q)$, one has:*

$$F_{\lambda\epsilon, \lambda h, \lambda d}(v, Q_\lambda) = \lambda^{N-1} F_{\epsilon, h, d}(v_\lambda, Q)$$

where $v_\lambda(x) = v(\lambda x)$.

Proof. We use the change of variable $y = x/\lambda$ so that $\nabla v(x) = \lambda^{-1} \nabla v_\lambda(y)$. □

Lemma 4.2 *Let $u_0 = \alpha$ for $x_N > 0$ and $u_0 = 0$ for $x_N < 0$ with $\alpha \in \{\alpha_1, \alpha_2\}$ and assume that h/ϵ remains bounded. Then for every sequence $u_\epsilon \in L^1(Q)$ such that $u_\epsilon \rightarrow u_0$ there exists $v_\epsilon \in L^1(Q)$ such that:*

(i) $v_\epsilon \in H^1(Q \cap \{x_N > 0\})$; $v_\epsilon = \alpha$ on $\partial Q \cap \{x_N > 0\}$

(ii) $\liminf_{\epsilon \rightarrow 0} F^\epsilon(v_\epsilon, Q) \leq \liminf_{\epsilon \rightarrow 0} F^\epsilon(u_\epsilon, Q)$

(iii) $v_\epsilon \rightarrow u_0$ in $L^1(Q)$

Proof. First, possibly by extracting a subsequence, we can assume:

$$\liminf_{\epsilon \rightarrow 0} F^\epsilon(v_\epsilon, Q) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} F^\epsilon(u_\epsilon, Q) = \beta < +\infty \tag{4.1}$$

Hence

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_Q W(u_\epsilon) dx = 0$$

and from growth condition (H2c), the sequence $|u_\epsilon|^2$ is uniformly integrable. Thus:

$$u_\epsilon \rightarrow u_0 \text{ in } L^2(Q) \tag{4.2}$$

Let h_ϵ, k_ϵ be sequences such that:

$$k_\epsilon \in \mathbb{N}, \quad \epsilon k_\epsilon \rightarrow 1 \quad (\text{hence } k_\epsilon \rightarrow +\infty) \tag{4.3}$$

$$h_\epsilon = o(|u_\epsilon - u_0|)_{L^2(Q)} \tag{4.4}$$

Then we define a boundary layer on Q by setting:

$$T_\epsilon = Q \setminus (1 - h_\epsilon)Q \tag{4.5}$$

We divide T_ϵ into k_ϵ slices of width h_ϵ/k_ϵ .

$$S_\epsilon^i = Q_\epsilon^i \setminus Q_\epsilon^{i-1}, \quad Q_\epsilon^i = (1 - i h_\epsilon/k_\epsilon)Q, \quad i \in \{0, 1, \dots, k_\epsilon\} \tag{4.6}$$

so that: $T_\epsilon = \cup_{i=1}^{k_\epsilon} S_\epsilon^i$.

Let φ_ϵ^i be a smooth function such that:

$$0 \leq \varphi_\epsilon^i \leq 1, \quad \varphi_\epsilon^i = 1 \text{ on } Q_\epsilon^i, \quad \varphi_\epsilon^i = 0 \text{ on } Q \setminus Q_\epsilon^{i-1}, \quad |D\varphi_\epsilon^i| \leq \frac{h_\epsilon}{k_\epsilon} \tag{4.7}$$

For a suitable i (we shall choose later), let us consider $v_\epsilon = u_\epsilon \varphi_\epsilon^i + \alpha(1 - \varphi_\epsilon^i)$. We have $v_\epsilon = \alpha$ on $\partial Q \cap \{x_N > 0\}$, and owing to assumptions (H2c) and (H3), the following inequalities hold:

$$W(v_\epsilon) \leq W(u_\epsilon) + C, \quad (W(\alpha) = 0) \tag{4.8}$$

$$\sigma(v_\epsilon) \leq \sigma(u_\epsilon) + C, \quad \text{on } \Gamma_\epsilon \cap Q \tag{4.9}$$

On the other hand from (4.7) $v_\epsilon = u_\epsilon$ on $Q_\epsilon^i, v_\epsilon = \alpha$ on $Q \setminus Q_\epsilon^{i-1}$ and $Dv_\epsilon = \varphi_\epsilon^i Du_\epsilon + (u_\epsilon - \alpha) D\varphi_\epsilon^i$, so we have:

$$|Dv_\epsilon|^2 \leq 2 |Du_\epsilon|^2 + |u_\epsilon - \alpha|^2 (k_\epsilon/h_\epsilon)^2 \quad \text{on } S_\epsilon^i \tag{4.10}$$

$$F^\epsilon(v_\epsilon, Q) = F^\epsilon(u_\epsilon, Q_\epsilon^i) + F^\epsilon(v_\epsilon, S_\epsilon^i) + F^\epsilon(\alpha, Q \setminus Q_\epsilon^{i-1}) \leq F^\epsilon(u_\epsilon, Q) + R_\epsilon^i \tag{4.11}$$

where

$$R_\epsilon^i = 2\epsilon \int_{S_\epsilon^i \cap \Delta_\epsilon} |Du_\epsilon|^2 + \frac{2\epsilon k_\epsilon^2}{h_\epsilon^2} \int_{S_\epsilon^i \cap \Delta_\epsilon} |u_\epsilon - \alpha|^2 + \frac{c}{\epsilon} |S_\epsilon^i| + c H^{N-1}(S_\epsilon^i \cap \Gamma_\epsilon) \tag{4.12}$$

Choose i such that $R_\epsilon^i \leq \sum_{j=1}^{k_\epsilon} R_\epsilon^j/k_\epsilon$. One gets from (4.12):

$$R_\epsilon^i \leq \frac{2\epsilon}{k_\epsilon} \int_{T_\epsilon \cap \Delta_\epsilon} |Du_\epsilon|^2 + \frac{2\epsilon k_\epsilon^2}{h_\epsilon^2} \int_{T_\epsilon \cap \Delta_\epsilon} |u_\epsilon - u_0|^2 + \frac{c h_\epsilon^{N-1}}{\epsilon k_\epsilon} + \frac{c}{k_\epsilon} H^{N-1}(T_\epsilon \cap \Gamma_\epsilon)$$

Noticing that: $\varepsilon \int_{T_\varepsilon \cap \Delta_\varepsilon} |Du_\varepsilon|^2 \leq F^\varepsilon(u_\varepsilon, Q)$ and $H^{N-1}(T_\varepsilon \cap \Gamma_\varepsilon) \leq H^{N-1}(Q \cap \Gamma_\varepsilon) \leq \sup (1 + h_\varepsilon/d_\varepsilon) |Df|^2|^{1/2}$ we obtain owing to (4.1), (4.3), (4.4) and to the assumption that $h_\varepsilon/d_\varepsilon$ is bounded:

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} R_\varepsilon^i = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} R_\varepsilon^i = 0$$

which yields by (4.11) to the inequality (ii). The assertion (iii) is trivial since $|v_\varepsilon - u_0| \leq |u_\varepsilon - u_0|$. \square

Lemma 4.3 Let $Q =]-1/2, 1/2[^{N-1}$, $\alpha \in \{\alpha_1, \alpha_2\}$ and $(\varepsilon, d_\varepsilon, h_\varepsilon)$ a sequence such that (H1) holds. Define $u_0(x) = \alpha$ if $x_N > 0$, $u_0(x) = 0$ if $x_N < 0$. Then:

i) For every sequence (u_ε) such that $u_\varepsilon \rightarrow u_0$ in $L^2(Q)$, one has:

$$\liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon, Q) \geq \widehat{\sigma}(\alpha, \gamma, \delta)$$

ii) There exists (u_ε) such that $u_\varepsilon = \alpha$ on $\partial Q \cap \{x_N > 0\}$ and:

$$u_\varepsilon \rightarrow u_0 \text{ in } L^2(Q), \quad \limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon, Q) \leq \widehat{\sigma}(\alpha, \gamma, \delta)$$

Proof. By lemma 4.2, one can assume that $u_\varepsilon = \alpha$ on $\partial Q \cap \{x_N > 0\}$. Apply the lemma 4.1 with $\lambda = 1/d_\varepsilon$; one gets:

$$F_{\varepsilon, d_\varepsilon, h_\varepsilon}(u_\varepsilon, Q) = d_\varepsilon^{N-1} F_{\varepsilon/d_\varepsilon, 1, h_\varepsilon/d_\varepsilon}(v_\varepsilon, Q_{1/d_\varepsilon})$$

where $v_\varepsilon(x) = u_\varepsilon(x/d_\varepsilon)$.

Noticing that v_ε belongs to $B_{L_\varepsilon}^L(\alpha)$ with $L_\varepsilon = 1/d_\varepsilon$, we deduce from proposition 3.1 (cf. (3.7)):

$$\begin{aligned} F_{\varepsilon, d_\varepsilon, h_\varepsilon}(u_\varepsilon, Q) &\geq \tau_{L_\varepsilon}^L(\alpha, \varepsilon/d_\varepsilon, h_\varepsilon/d_\varepsilon) \geq \\ &\geq \widehat{\sigma}(\alpha, \varepsilon/d_\varepsilon, h_\varepsilon/d_\varepsilon) - \frac{C}{L_\varepsilon^{N-1}} \end{aligned}$$

The conclusion (i) follows by letting ε tend to 0 and using the continuity of $\widehat{\sigma}(\alpha, \dots)$ at (γ, δ) proved in proposition 3.2.

Now, let us prove assertion (ii): Let $w \in B_1^L(\alpha)$ be the solution associated with the definition of $\tau_1^L(\alpha, \gamma, \delta)$. Define u_ε by:

$$\begin{aligned} u_\varepsilon(x) &= w(x'/d_\varepsilon, x_N/h_\varepsilon) \quad \text{if } x \in \Delta(d_\varepsilon, h_\varepsilon) \\ &= 0 \quad \text{otherwise} \end{aligned}$$

Through the $d_\varepsilon Y$ -periodicity of u_ε with respect to x' , we discover:

$$\int_{|x_N| \leq h_\varepsilon} |u_\varepsilon|^2 dx = o(d_\varepsilon)$$

Since $u_\varepsilon = u_0$ for $|u_\varepsilon| > h_\varepsilon$, one gets $u_\varepsilon \rightarrow u_0$ in $L^2(Q)$. Now using the scaling lemma 4.1 with $\lambda = 1/d_\varepsilon$:

$$F_{\varepsilon, d_\varepsilon, h_\varepsilon}(u_\varepsilon, Q) = d_\varepsilon^{N-1} F_{\varepsilon/d_\varepsilon, 1, h_\varepsilon/d_\varepsilon}(v_\varepsilon, Q_{1/d_\varepsilon})$$

where

$$v_\varepsilon(x) = w(x', \frac{d_\varepsilon}{h_\varepsilon} x_N)$$

Since $w = \alpha$ for $x_N > h_\varepsilon/d_\varepsilon$, we have $v_\varepsilon \in B_1^L(\alpha)$ for every $L > \sup(h_\varepsilon/d_\varepsilon)$. According to proposition 3.1, we have:

$$\begin{aligned} F_{\varepsilon, d_\varepsilon, h_\varepsilon}(u_\varepsilon, Q) &\leq \tau_{1/d_\varepsilon}^L(\alpha, \gamma_\varepsilon, \delta_\varepsilon) \\ &\leq \sigma_1^L(\alpha, \gamma_\varepsilon, \delta_\varepsilon) + C'(L) d_\varepsilon^{\frac{N-1}{2}} \end{aligned}$$

Finally from the continuity of $\sigma_1^L(\alpha, \dots)$:

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon) \leq \sigma_1^L(\alpha, \gamma, \delta)$$

which reduces to the inequality of (ii) when $L \rightarrow \infty$. \square

4.1. Lowerbound for the Γ -limit of the energy

We are going to prove the assertion (i) of theorem 2.1.

Let (u_ε) be a sequence in $L^2(\Omega)$ such that:

$$u_\varepsilon \rightarrow u \text{ in } L^2(\Omega), \quad l = \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} E^\varepsilon(u_\varepsilon) < +\infty \quad (4.13)$$

Define the Borel non-negative measure μ_ε on $\overline{\Omega}$ by setting:

$$\mu_\varepsilon(A) = F_\varepsilon(u_\varepsilon, A)$$

From (4.13), the sequence (μ_ε) is bounded and tight on $\overline{\Omega}$ ($\overline{\Omega}$ is compact). We can write, possibly only for a subsequence still denoted by ε :

$$\begin{aligned} \liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} E^\varepsilon(u_\varepsilon) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} E^\varepsilon(u_\varepsilon) = l \\ \mu_\varepsilon &\rightarrow \mu_0 \quad \text{for the narrow convergence on } \overline{\Omega} \end{aligned}$$

As $\text{supp } \mu_\varepsilon \subset \overline{\Omega}_\varepsilon$, we have $\text{supp } \mu_0 \subset \overline{\Omega}_0$, hence:

$$l = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mu_\varepsilon(\overline{\Omega}) = \mu_0(\overline{\Omega}_0) \quad (4.14)$$

In fact, by using the narrow convergence of μ_ε , for every Borel subset A of $\overline{\Omega}$ such that $\mu_0(\partial A) = 0$, one has:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon, A) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mu_\varepsilon(A) = \mu_0(A) \quad (4.15)$$

Since $u_\varepsilon = 0$ on $\Omega \setminus \Omega_\varepsilon$ and:

$$E^\varepsilon(u_\varepsilon) \geq \varepsilon \int_{\Omega_0} |Du_\varepsilon|^2 dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_{\Omega_0} W(u_\varepsilon) dx,$$

we already know that the limit u lies in $BV(\Omega)$ and has the form: $u = \alpha_1 1_{A \cap \Omega_0} + \alpha_2 1_{\Omega_0 \setminus A}$ where A is a subset of Ω_0 with finite perimeter. Moreover, by applying Modica's results [2], on the open set $\Omega^\eta = \Omega \cap \{x_N > \eta\}$, with $\eta > 0$, one gets:

$$\liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon, \Omega^\eta) \geq \frac{c}{\alpha_2 - \alpha_1} \int_{\Omega^\eta} |Du| dx + \int_{\Gamma^\eta \cap \Omega^\eta} \widehat{\sigma}(u^+) dH^{N-1} \quad (4.16)$$

where c and $\widehat{\sigma}$ are given by (2.1) and (2.3). Choosing a sequence η tending to 0 such that $\mu_0(\{x_N = \eta\}) = 0$ and using (4.15) and (4.16) we are led to:

$$\begin{aligned} l = \mu_0(\Omega_0) &= \mu_0(\Gamma_0) + \lim_{\eta \rightarrow 0} \mu_0(\Omega^\eta) \\ &\geq \mu_0(\Gamma_0) + \frac{c}{\alpha_2 - \alpha_1} \int_{\Omega_0} |Du| dx + \int_{\Gamma'} \widehat{\sigma}(u^+) dH^{N-1} \end{aligned}$$

So the lowerbound of theorem 2.1 is obtained provided we can prove:

$$\mu_0 1_{\Gamma_0} \geq \widehat{\sigma}(u^+) H^{N-1}(\Gamma_0 \cap \cdot)$$

Denoting $\theta_0 = H^{N-1}(\Gamma_0 \cap \cdot)$, the last inequality reads as:

$$\frac{d\mu_0}{d\theta_0}(x) \geq \widehat{\sigma}(u^+(x)), \quad \theta_0 \text{ a.e. } x \in \Gamma_0 \quad (4.17)$$

Let Q_δ be the interval $]-\delta/2, +\delta/2[^N$. By the Besicovitch differentiation theorem, one has:

$$H^{N-1} \text{ a.e. } x \in \Gamma_0, \quad \frac{d\mu_0}{d\theta_0} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\mu_0(Q_\delta)}{\delta^{N-1}} \quad (4.18)$$

On the other hand, as the limit u of u_ε satisfies $u(x) \in \{\alpha_1, \alpha_2\}$ a.e. on $\Omega \setminus \Omega_0$, the traces on Γ_0 from $x_N > 0$ and from $x_N < 0$ satisfy:

$$u^+ \in \{\alpha_1, \alpha_2\} \quad H^{N-1} \text{ a.e. } x \in \Gamma_0, \quad u^- = 0$$

Let us fix $x_0 \in \Gamma_0$ such that the equality in (4.18) holds and let us set:

$$\begin{aligned} w_{\varepsilon, \delta}(y) &= u_\varepsilon(x_0 + \delta y) \\ w_{0, \delta}(y) &= u(x_0 + \delta y) \end{aligned}$$

It is well known that for H^{N-1} a.e. $x_0 \in \Gamma_0$, one has:

$$w_{0, \delta} \rightarrow u_0 \text{ in } L^1(Q) \text{ as } \delta \rightarrow 0 \quad (4.19)$$

where:

$$\begin{aligned} u_0(y) &= \alpha_+ \text{ if } y_N > 0 \text{ and } u^+(x_0) = \alpha_+ \\ u_0(y) &= 0 \text{ if } y_N < 0 \end{aligned} \quad (4.20)$$

From now on we assume that x_0 has been chosen in such a way that (4.18) and (4.19) hold.

Let us go on with the blow-up argument at x_0 as done in another situation by Fonseca-Müller [8]. Take a sequence (δ_k) tending to 0 such that $\mu_0(\partial Q_{\delta_k}) = 0$. Owing to (4.15) one has:

$$\frac{d\mu_0}{d\theta_0}(x_0) = \lim_{k \rightarrow +\infty} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{F_{\varepsilon, d_\varepsilon, h_\varepsilon}(u_\varepsilon, x_0 + Q_{\delta_k})}{\delta_k^{N-1}} \quad (4.21)$$

Assuming that $\frac{d\mu_0}{d\theta_0}(x_0) < +\infty$ (otherwise the inequality (4.17) is trivial), we can choose for every k , some $\varepsilon(k) > 0$ such that:

$$\varepsilon_k = \frac{\varepsilon}{\delta_k} \leq \frac{1}{k} \quad (4.22)$$

$$\|w_{\varepsilon_k, \delta_k} - u_0\|_{L^1(Q)} \leq \|w_{0, \delta_k} - u_0\|_{L^1(Q)} + \frac{1}{k} \quad (4.23)$$

$$\frac{F_{\varepsilon_k, d_\varepsilon, h_\varepsilon}(u_\varepsilon, Q_{\delta_k})}{\delta_k^{N-1}} \leq \frac{d\mu_0}{d\theta_0}(x_0) + \frac{1}{k} \quad (4.24)$$

For this ε (depending on k), let us set:

$$\begin{aligned} v_k(y) &= u_\varepsilon(x_0 + \delta_k y) \\ d_k &= \frac{d_\varepsilon}{\delta_k}, \quad h_k = \frac{h_\varepsilon}{\delta_k} \end{aligned}$$

By lemma 4.1 we may rewrite (4.22) as:

$$F_{\varepsilon_k, d_k, h_k}(v_k, Q) \leq \frac{d\mu_0}{d\theta_0}(x_0) + \frac{1}{k}$$

We notice that $d_k \rightarrow 0$, $h_k \rightarrow 0$, $\varepsilon_k \rightarrow 0$, while $h_k/d_k \rightarrow \delta$, $\varepsilon_k/d_k \rightarrow \gamma$. Since $v_k \rightarrow u_0$ in $L^1(Q)$ where u_0 has the particular form given by (4.20), we may apply lemma 4.3 (i) with $\Omega = Q$. Combined with (4.24) that yields (4.17):

$$\frac{d\mu_0}{d\theta_0}(x_0) \geq \liminf_{k \rightarrow +\infty} F_{\varepsilon_k, d_k, h_k}(v_k, Q) \geq \widehat{\sigma}(u^+(x_0))$$

□

4.2 Upperbound for the Γ -limit

We prove the assertion (ii) of theorem 2.1 in case $u = \alpha_1 1_{\Omega_0 \cap A} + \alpha_2 1_{\Omega_0 \setminus A}$ where A is an open set of \mathbb{R}^N with smooth boundary ∂A such that $H^{N-1}(\partial A \cap \partial \Omega_0) = 0$. The conclusion in the general case is then deduced by an approximation procedure for functions u such that $F^0(u) < +\infty$. This procedure is completely described in Modica [2] or Bouchitté [9] to which we refer for this part of the proof.

Set $A_1 = A \cap \Omega$ and $A_2 = \Omega \setminus A$. For every $\eta > 0$ let us define:

$$\begin{aligned} \Gamma_\eta^i &= \{x \in \Gamma_0 \cap A_i ; d(x, \partial\Omega) > \eta, d(x, \partial A) > \eta\} \\ \Sigma_\eta^i &= \Gamma_\eta^i \times [-\eta/2, \eta/2] \end{aligned}$$

Noticing that

$$\begin{aligned} H^{N-1}(\Gamma_\varepsilon \setminus (\Sigma_\eta^1 \cup \Sigma_\eta^2)) &\leq \frac{h_\varepsilon}{d_\varepsilon} H^{N-1}(\Gamma_0 \setminus (\Gamma_\eta^1 \cup \Gamma_\eta^2)), \\ \lim_{\eta \rightarrow 0} H^{N-1}(\Gamma_0 \setminus (\Gamma_\eta^1 \cup \Gamma_\eta^2)) &= H^{N-1}(\Gamma_0 \cap (\Gamma' \cup \partial A)) = 0, \end{aligned}$$

we can write:

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} H^{N-1}(\Gamma_\varepsilon \setminus (\Sigma_\eta^1 \cup \Sigma_\eta^2)) = o(\eta) \tag{4.25}$$

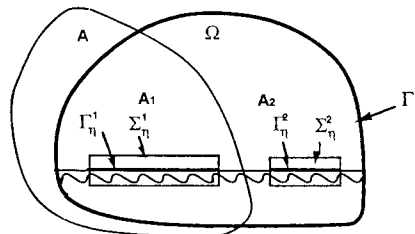


figure 4

Let us apply Modica's construction [2] to approach $\tilde{u} = \alpha_1 1_{A_1} + \alpha_2 1_{A_2}$ on the open subset $\Omega^{-\eta} = \Omega \cap \{x_N > -\eta\}$ taking into account the boundary energy on Γ' . We find a sequence \tilde{u}_ε in $L^2(\Omega^{-\eta})$ such that:

$$\tilde{u}_\varepsilon \rightarrow \tilde{u} \text{ in } L^2(\Omega^{-\eta}) \tag{4.26}$$

$$\tilde{u}_\varepsilon \text{ is bounded in } L^\infty(\Omega^{-\eta}) \tag{4.27}$$

$$\tilde{u}_\varepsilon = \tilde{u} \text{ if } d(x, \partial A) > \eta \text{ and } d(x, \partial\Omega^{-\eta}) > \eta \tag{4.28}$$

$$F_\varepsilon(\tilde{u}_\varepsilon, \Omega^{-\eta} \cup \Gamma' \setminus \Gamma_\varepsilon) \rightarrow l_\eta \text{ as } \varepsilon \rightarrow 0 \text{ where:} \tag{4.29}$$

$$l_\eta = \frac{c}{\alpha_2 - \alpha_1} \int_{\Omega^{-\eta}} |D\tilde{u}| + \int_{\Gamma'} \hat{\sigma}(u) dH^{N-1} \tag{4.30}$$

(To obtain (4.27), we notice that, according to the growth condition on W (H2d), the infimum associated with the definition (2.3) of $\hat{\sigma}(\alpha_i)$ is reached for some value s_i ; then we can choose \tilde{u}_ε so that $\tilde{u}_\varepsilon \in [\alpha_1, \alpha_2] \cup [s_1, s_2]$)

From (4.28), we get $\tilde{u}_\varepsilon = \alpha_i$ on Σ_η^i so that we can modify \tilde{u}_ε inside Σ_η^i using the lemma 4.3 (ii). Let us consider a covering of $\Sigma_\eta^1 \cup \Sigma_\eta^2$ by cells of size η by setting:

$$\begin{aligned} Q_\eta^k &= \eta(k + Q), \quad k \in \mathbb{Z}^{N-1} \\ I_\eta^i &= \{k \in \mathbb{Z}^{N-1} ; Q_\eta^k \subset \Sigma_\eta^i\} \end{aligned}$$

To simplify, we assume that $\Sigma_\eta^i = \sum_{k \in I_\eta^i} Q_\eta^k$

By an easy rescaling, lemma 4.3 (ii) leads to the existence for each $k \in I_\eta^i$ of a sequence (w_ε^k) such that:

$$\begin{aligned} w_\varepsilon^k &\rightarrow \alpha_i \text{ in } L^2(Q_\eta^k), \quad w_\varepsilon^k = \alpha_i \text{ on } \partial Q_\eta^k \cap \{x_N > 0\} \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(w_\varepsilon^k, Q_\eta^k) &= \hat{\sigma}(\alpha_i) \eta^{N-1} \end{aligned} \tag{4.31}$$

Define:

$$u_\varepsilon = \begin{cases} \tilde{u}_\varepsilon & \text{on } \Omega_\varepsilon \setminus (\Sigma_\eta^1 \cup \Sigma_\eta^2) \\ w_\varepsilon^k & \text{on } Q_\eta^k, \quad k \in I_\eta^1 \cup I_\eta^2 \\ 0 & \text{on } \Omega \setminus \Omega_\varepsilon \end{cases}$$

It is easy to check that $u_\varepsilon \rightarrow u$ in $L^2(\Omega)$. Moreover:

$$\begin{aligned} F_\varepsilon(u_\varepsilon, \bar{\Omega}_\varepsilon) &\leq F_\varepsilon(\tilde{u}_\varepsilon, \Omega^{-\eta} \cup \Gamma' \setminus \Gamma_\varepsilon) + F_\varepsilon(\tilde{u}_\varepsilon, \Gamma_\varepsilon \setminus (\Sigma_\eta^1 \cup \Sigma_\eta^2)) + \\ &\quad + \sum_{k \in I_\eta^1 \cup I_\eta^2} F_\varepsilon(w_\varepsilon^k, Q_\eta^k) \end{aligned} \tag{4.32}$$

From (4.27), $\sigma(\tilde{u}_\varepsilon)$ is bounded. Thus from (4.29), (4.31) and (4.32):

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon, \bar{\Omega}_\varepsilon) \leq l_\eta + o(\eta) + \int_{\Gamma_\eta^1 \cup \Gamma_\eta^2} \hat{\sigma}(u^+) dH^{N-1} \tag{4.33}$$

We conclude by passing to the limit as $\eta \rightarrow 0$ using (4.30) and the fact that $\int_{\Gamma_0} |D\tilde{u}| = 0$ due to $H^{N-1}(\partial A \cap \Gamma_0) = 0$.

Finally, in order to fit the constraint on the total mass ($\int_\Omega u_\varepsilon dx = \int_\Omega u dx$), we use Modica's method which consists in changing u_ε slightly inside one of the two phases (see [2]). \square

Acknowledgements: The research of the first author is part of the project "EU-RHomogenization", contract SC1-CT91-0732 of the program SCIENCE of the Commission of the European Communities.

References

- [1] Cahn J.W. and Hilliard J.E., Free energy of a non-uniform system. J. Chem. Phys. 31, 3, (1959), 688-699.
- [2] Modica L., Gradient theory of phase transitions with boundary contact energy. Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire, 5, (1987), 453-486.
- [3] Alberti G., Ambrosio L. and Buttazzo G., Singular perturbation problems with a compact support semilinear term, to appear.
- [4] Seppecher P. Equilibrium of Cahn-Hilliard fluid on a wall: influence of the wetting properties of the fluid upon the stability of a thin liquid film, Eur. J. Mech., B/Fluids, 12, 1, (1993).
- [5] Cox R. G., The spreading of a liquid on a rough solid surface, J. Fluid Mech., 131, (1983), 1-26.
- [6] Giusti E., Minimal surfaces and functions of bounded variation, Birkhäuser, Basel (1984).
- [7] Müller S., Homogenization of nonconvex integral functionals and cellular elastic materials, Arch. Rational Mech. Anal., 99 (1987), 189-212.
- [8] Fonseca I. and Müller S., Quasiconvex integrands and lowersemicontinuity. To appear in SIAM J. Math. Anal.
- [9] Bouchitté G. Singular perturbation of variational problems arising from a two-phase transition model, Appl. Math. Optim., 21, (1990), 289-314.
- [10] Modica L., The gradient theory of phase transitions and the minimal interface criterium, Arch. Rational Mech. Anal., 98 (1987), 123-142.

4.3 Tension de ligne

Dans l'étude de systèmes diphasiques, on tient parfois compte d'une "tension de ligne". Des mesures expérimentales existent, relatives à cette énergie concentrée sur la ligne de contact. Cette notion semble une généralisation naturelle de la notion de tension superficielle.

Lorsqu'on tient compte de la présence d'une tension de ligne, la recherche d'un équilibre se ramène à la minimisation de l'énergie

$$F_0(u) = c_1 \mathcal{H}^2(\partial A_1 \cap \Omega) + \tilde{c}_1 \mathcal{H}^2(\partial \Omega \cap A_1) + c_2 \mathcal{H}^1(C) \quad (4.11)$$

si $u = \alpha_1$ dans A_1 et $u = \beta_1$ dans $B_1 = \Omega \setminus A_1$, l'énergie étant infinie si u n'est pas de cette forme. La ligne de contact C est définie comme la frontière de l'interface $\partial A_1 \cap \Omega$ ou de manière équivalente comme l'interface unidimensionnelle séparant les traces des ensembles A_1 et B_1 sur la paroi $\partial \Omega$.

L'équilibre est influencé par la présence de la tension de ligne à travers la modification de l'angle de contact. En effet l'équilibre des forces à la ligne de contact tient compte, outre des tensions superficielles de l'interface et des interfaces fluide-paroi, du produit de la tension de ligne par la courbure de cette ligne: la loi de Young est modifiée.

Des hypothèses convenables peuvent-elles faire converger le modèle de Cahn-Hilliard vers un modèle avec tension de ligne? L'article qui suit répond à cette question.

Nous commençons par remarquer qu'un problème d'équilibre avec tension de ligne est un problème mal posé: considérons une suite de configurations u_n dont l'énergie s'approche de la valeur minimale de l'énergie (4.11) (une suite *minimisante*), notons $A_1^{(n)}$ l'ensemble sur lequel u_n vaut α_1 . La ligne de contact C correspondant à la configuration limite A_1 peut être très éloignée des lignes de contact L correspondant aux configurations $A_1^{(n)}$, phénomène illustré dans la figure 4.3.

D'un point de vue mathématique, l'énergie F_0 n'est pas semicontinue inférieurement (pour la topologie de $L^1(\Omega)$) et l'existence d'un minimum n'est pas assurée. Cette remarque élimine tout espoir que F_0

soit la Γ -limite de l'énergie de Cahn-Hilliard.

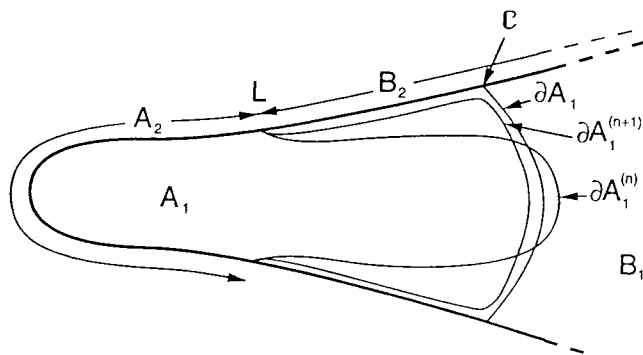


Figure 4.3: suite minimisante de configurations

Comment bien poser un problème d'équilibre avec tension de ligne? De manière intuitive, disons qu'il faut prendre en compte le fait que les traces de u_n ne convergent pas forcément vers la trace de la limite en écrivant l'énergie fonction de la valeur de u à l'intérieur de Ω et de sa valeur v sur le bord (en envisageant une "valeur sur le bord" v qui ne soit pas la trace Tu de u). On peut se persuader en considérant la figure 4.3 que l'énergie à minimiser est:

$$\Phi(u, v) = c_1 \mathcal{H}^2(\partial A_1 \cap \Omega) + \tilde{c}_1 \mathcal{H}^2(A_2 \cap \partial A_1) + c_1 \mathcal{H}^2(B_2 \cap \partial A_1) + (c_1 + \tilde{c}_1) \mathcal{H}^2(A_2 \cap \partial B_1) + c_2 \mathcal{H}^1(\partial A_2) \quad (4.12)$$

si u est égal à α_1 sur A_1 , à β_1 sur le complémentaire B_1 , et si v est égal à α_1 sur $A_2 \subset \partial\Omega$, à β_1 sur le complémentaire $B_2 = \partial\Omega \setminus A_2$, l'énergie étant infinie si u et v ne sont pas de cette forme.

Les valeurs de u qui réalisent l'équilibre sont celles qui minimisent l'énergie F définie par

$$F(u) = \inf_v \Phi(u, v) \quad (4.13)$$

Il faut remarquer que la tension superficielle c_2 est attachée à la frontière de A_2 et non à la ligne de contact. Or, pour une configuration u donnée,

A_2 ne peut être calculé qu'à travers un problème de minimisation global. L'énergie F est donc non locale.

La fonctionnelle F est la relaxée de F_0 pour la topologie $L^1(\Omega)$. C'est la candidate idéale pour être la Γ -limite d'un modèle de Cahn-Hilliard.

Nous avons ensuite cherché quelle modification des hypothèses de Modica conduiraient à un problème asymptotique dont la limite pourrait être F . Sachant que la trace de la densité prend des valeurs très différentes au voisinage de la ligne de contact qu'ailleurs sur la paroi, l'idée naturelle est de supposer que l'énergie de surface W_s est très grande pour ces valeurs intermédiaires. Ainsi nous supposons que W_2 est une fonction continue positive s'annulant seulement en deux valeurs α_2 et β_2 , que λ_ϵ tend vers l'infini quand ϵ tend vers zéro et nous étudions la limite de

$$F_\epsilon(u) = \epsilon \int_\Omega |Du|^2 + \frac{1}{\epsilon} \int_\Omega W_1(u) d\mathcal{H}^3 + \lambda_\epsilon \int_{\partial\Omega} W_2(u) d\mathcal{H}^2 \quad (4.14)$$

Après quelques tâtonnements il est apparu que le comportement intéressant (entraînant une énergie limite finie non nulle) de λ_ϵ est quand $\epsilon \log(\lambda_\epsilon)$ tend vers une limite finie non nulle.

Notre résultat principal établit la convergence (quite à extraire une sous suite) des suites u_ϵ d'énergie bornée vers une fonction u à variation bornée prenant ses valeurs dans $\{\alpha_1, \beta_1\}$. De plus la suite des traces converge vers une fonction v de $\partial\Omega$ à variation bornée prenant ses valeurs dans $\{\alpha_2, \beta_2\}$. L'énergie limite est exprimée en fonction de u et v . L'expression est comparable à (4.12), les coefficients facteurs de $\mathcal{H}^2(A_2 \cap \partial A_1)$, $\mathcal{H}^2(B_2 \cap \partial A_1)$ et $\mathcal{H}^2(A_2 \cap \partial B_1)$ étant exprimés en fonction de W_1 , α_2 et β_2 . L'expression (4.12) n'est retrouvée exactement que sous certaines hypothèses portant sur les positions relatives de α_1 , β_1 , α_2 et β_2 .

Comme habituellement, l'estimation supérieure de l'énergie est obtenue par construction explicite d'une suite approximante. Cette construction est technique, mais elle montre l'organisation essentiellement radiale du champ de densité au voisinage de la ligne où se concentre l'énergie (cf. figure 2 de l'article). L'estimation inférieure de l'énergie est plus délicate et longue: après avoir localisé l'énergie, on remarque que la démonstration de Modica peut être reprise pour étudier la partie

interne, le problème principal se situe sur le voisinage de la paroi. Dans de très petits voisinages du bord (intersection de boules de très faible rayon et de Ω), l'énergie volumique peut être négligée. Les voisinages peuvent être transformés en une demi boules par des isomorphismes très voisins d'isométries. Par un argument de "slicing" on se ramène au problème de la minoration sur un demi disque D de diamètre E de

$$G_\varepsilon^2(u) = \varepsilon \int_D |Du|^2 + \lambda_\varepsilon \int_E W_2(Tu) \quad (4.15)$$

où Tu désigne la trace de u sur E . L'énergie de Dirichlet est ensuite minorée par le carré de la norme $H^{1/2}$ de Tu sur E . On est donc réduit au problème unidimensionnel de la minoration de

$$G_\varepsilon^3(v) = \frac{\varepsilon}{2\pi} \int_E \int_E \left| \frac{v(x') - v(x)}{x' - x} \right|^2 dx' dx + \lambda_\varepsilon \int_E W_2(v) \quad (4.16)$$

Ce problème, bien que de dimension un, présente encore des difficultés. De plus, comme il a son propre intérêt, il a fait l'objet d'une publication séparée au Comptes Rendus de l'Académie des Sciences dans laquelle on montre que G_ε^3 Γ -converge dans $L^1(E)$ vers G^3 défini par: $G^3(v) = c_2 \mathcal{H}^0(Sv)$ (Sv désignant l'ensemble des sauts de v) si v est à variation bornée et à valeurs dans $\{\alpha_2, \beta_2\}$, $G^3(v) = +\infty$ sinon.

Dans la dernière partie nous étudions sur quelques exemples les effets de la tension de ligne sur les équilibres diphasiques et en particulier les effets de la dissociation possible entre la ligne de contact et la ligne de séparation des phases de surface.

Les articles qui suivent ont été publiés ou soumis à publication sous les références: "Un résultat de perturbations singulières avec la norme $H^{1/2}$ "; G. Alberti, G. Bouchitté and P. Seppecher, C.R.Acad.Sci., t.319, Série I, p.333-338, 1994" et "Phase transition with line tension effect, G. Alberti, G. Bouchitté, P. Seppecher, soumis à Arch. Ration. Mech. An."

Attention: Les notations de ces articles diffèrent de celles utilisées dans l'introduction.

Un résultat de perturbations singulières avec la norme $H^{1/2}$

Giovanni ALBERTI, Guy BOUCHITTÉ et Pierre SEPPECHER

Résumé – Soit I un intervalle borné de \mathbb{R} et W une fonction positive continue s'annulant seulement aux points $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Nous obtenons le comportement limite des fonctionnelles

$$(1) \quad F^\varepsilon(u) := \varepsilon \int \int_{I \times I} \left| \frac{u(x) - u(y)}{x - y} \right|^2 dx dy + \lambda_\varepsilon \int_I W(u) dx$$

lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, $\lambda_\varepsilon \rightarrow +\infty$ et $\varepsilon \log \lambda_\varepsilon \rightarrow k$ ($0 < k < +\infty$).

A singular perturbation result involving the $H^{1/2}$ norm

Abstract – Let I be a bounded interval of \mathbb{R} and W a continuous non-negative function vanishing only at $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. We obtain the asymptotic behaviour of the functionals

$$(1) \quad F^\varepsilon(u) := \varepsilon \int \int_{I \times I} \left| \frac{u(x) - u(y)}{x - y} \right|^2 dx dy + \lambda_\varepsilon \int_I W(u) dx$$

when $\varepsilon \rightarrow 0$, $\lambda_\varepsilon \rightarrow +\infty$ and $\varepsilon \log \lambda_\varepsilon \rightarrow k$ ($0 < k < +\infty$).

Abridged English Version – Let $\varepsilon, \lambda_\varepsilon$ be sequences in $]0, +\infty[$ such that $\varepsilon \rightarrow 0$, $\lambda_\varepsilon \rightarrow +\infty$ and consider functions $W: \mathbb{R} \rightarrow [0, +\infty[$ satisfying the assumptions:

$$(H1) \quad W(u) = 0 \Leftrightarrow u \in \{\alpha, \beta\} \quad (\alpha < \beta)$$

$$(H2) \quad W(u) \geq C(|u|^2 - 1) \quad (C > 0).$$

Our motivation is to study the asymptotic behaviour of the functional

$$(2) \quad E^\varepsilon(u) := \varepsilon \int_\Omega |\nabla u|^2 dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_\Omega W_0(u) dx + \lambda_\varepsilon \int_\Gamma W_1(u) d\mathcal{H}^{N-1}$$

where W_0, W_1 satisfy (H1), (H2), and Ω is a bounded open subset of \mathbb{R}^N with boundary Γ . The case $\lambda_\varepsilon = 0$ or $\lambda_\varepsilon = \text{constant}$ is well-known [1], [2] and leads to a mathematical justification of the usual two-phases transition model with minimal interface criterium and contact Young's law. Here we expect that, for λ_ε tending to $+\infty$ with a suitable scale, the sequences (u_ε) of finite energy have subsequences whose traces on Γ strongly converge to a function of bounded variations ranging into $\{\alpha, \beta\}$ and we expect that the associated $(N-2)$ -dimensional interface on Γ between $\{u = \alpha\}$ and $\{u = \beta\}$ is taken into account in the limit energy (line tension effect).

A first step of this program is the estimate of the boundary energy on Γ given by

$$(3) \quad E^\varepsilon(u) := \varepsilon \|u\|_{1/2}^2 + \lambda_\varepsilon \int_\Gamma W_1(u) d\mathcal{H}^{N-1}$$

where $\|\cdot\|_{1/2}$ is the intrinsic norm of the space $H^{1/2}(\Gamma)$ [3]. This problem has its own interest and is solved in this note in the one dimensional case (i.e., Γ is an open bounded interval I). For every function u in $L^1(I)$ we denote by S_u the jump set of u , i.e., the set of all points

Note présentée par Luc TARTAR.

where u has no approximate limit. We denote by $BV(I, \{\alpha, \beta\})$ the space of functions u with bounded variations on I such that $u \in \{\alpha, \beta\}$ a.e.; it is well-known that a function u , such that $u \in \{\alpha, \beta\}$ a.e., belongs to BV if and only if S_u is finite, i. e., $\mathcal{H}^0(S_u) < \infty$. We prove that if $\varepsilon \log \lambda_\varepsilon \rightarrow k$, the limit energy associated to F^ε defined by (1) is given by

$$(4) \quad F(u) := \begin{cases} 2k(\beta - \alpha)^2 \mathcal{H}^0(S_u) & \text{if } u \in BV(I, \{\alpha, \beta\}), \\ +\infty & \text{otherwise.} \end{cases}$$

THEOREM. — Assuming (H1), (H2) and $\varepsilon \log \lambda_\varepsilon \rightarrow k$ ($0 < k < +\infty$), then:

(i) Every sequence (u_ε) such that $\sup F^\varepsilon(u_\varepsilon) < +\infty$ is strongly relatively compact in $L^1(I)$ and every cluster point u belongs to $BV(I, \{\alpha, \beta\})$.

(ii) Every sequence (u_ε) converging to u in $L^1(I)$ satisfies

$$\liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} F^\varepsilon(u_\varepsilon) \geq F(u).$$

(iii) For every u in $L^1(I)$ there exists (u_ε) converging to u in $L^1(I)$ such that:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F^\varepsilon(u_\varepsilon) = F(u).$$

Comments:

1) In the Γ -convergence theory setting, assertions (ii) and (iii) mean that F^ε Γ -converges to F in $L^1(I)$. Note that F^ε and F are both lower semicontinuous in $L^1(I)$ and have minimizers on every closed subset of $L^1(I)$.

2) In assertion (iii) we may modify (u_ε) in such a way that it satisfies the constraint $\int_I u_\varepsilon dx = \int_I u dx$. As a consequence (setting $\eta = \varepsilon/\lambda_\varepsilon$), we get the estimate as $\eta \rightarrow 0$ for the variational problems ($\gamma \in]\alpha, \beta[$):

$$\inf \left\{ \int_{[0,1]} W(u) dx + \eta \int_{[0,1]^2} \left| \frac{u(x) - u(y)}{x - y} \right|^2 dx dy, \int_{[0,1]} u dx = \gamma \right\} \sim 2(\beta - \alpha)^2 \eta \log \eta$$

Note that this estimate does not depend on the behaviour of W between α and β .

3) In the limit process we get an improvement of the regularity: informations upon the half-derivative of u_ε ($H^{1/2}$ norm) lead to informations upon the first order derivative of the limit u (u' is a bounded atomic measure).

4) A similar result can be deduced in higher dimension and will be used in a forthcoming paper [4] where we propose a new model of phase transition with line tension effects.

5) The proof essentially relies on the estimate (6) which follows from a rearrangement lemma (lemma 2). When writing the final draft of this note, we were told that another proof of this lemma has been proposed by F. Brock.

I. INTRODUCTION ET ÉNONCÉ DU RÉSULTAT. — Soit $\varepsilon, \lambda_\varepsilon$ des suites réelles positives telles que $\varepsilon \rightarrow 0, \lambda_\varepsilon \rightarrow +\infty, \varepsilon \log \lambda_\varepsilon \rightarrow k$ où $k \in]0, +\infty[$. La motivation de ce travail est l'étude du comportement asymptotique de la fonctionnelle (2) dans laquelle W_0, W_1 vérifient les hypothèses (H1) and (H2), Ω étant un ouvert borné de \mathbb{R}^N de frontière Γ . Le cas $\lambda_\varepsilon = 0$ ou $\lambda_\varepsilon = \text{constant}$ est bien connu ([1], [2]) et donne une justification mathématique du modèle usuel d'un milieu diphasique avec une énergie capillaire et un angle de contact donné par la loi de Young.

Quand λ_ε tend vers $+\infty$ de manière convenable, le résultat attendu est que les traces sur Γ des suites d'énergie finie convergent fortement dans $L^1(\Gamma)$ vers une fonction à variations bornées prenant ses valeurs dans $\{\alpha, \beta\}$, l'interface (de dimension $N-2$) séparant les ensembles $\{u = \alpha\}$ et $\{u = \beta\}$ sur Γ étant prise en compte dans l'énergie limite (effet de tension de ligne).

Une première étape est d'estimer l'énergie sur le bord Γ définie par l'équation (3) dans laquelle $\| \cdot \|_{1/2}$ désigne la norme intrinsèque de $H^{1/2}(\Gamma)$ [3]. Ce problème, intéressant par lui-même, est résolu dans cette Note dans le cas de la dimension 1 (Γ est un intervalle borné de \mathbb{R} noté I).

Pour tout $u \in L^1(I)$ on note S_u l'ensemble des points de I où u n'a pas de limite approximative. On note $BV(I, \{\alpha, \beta\})$ l'ensemble des fonctions à variations bornées à valeurs dans $\{\alpha, \beta\}$; il est bien connu qu'une fonction u , telle que $u \in \{\alpha, \beta\}$ p.p., est dans BV si et seulement si S_u est fini, i. e., $\mathcal{H}^0(S_u) < \infty$.

Nous montrons que si $\varepsilon \log \lambda_\varepsilon \rightarrow k$, l'énergie limite associée à F^ε définie par (1) est donnée par (4).

THÉORÈME. — Sous les hypothèses (H1) et (H2) et $\varepsilon \log \lambda_\varepsilon \rightarrow k$ ($0 < k < +\infty$), on a:

(i) Toute suite (u_ε) telle que $\sup F^\varepsilon(u_\varepsilon) < +\infty$ est fortement relativement compacte dans $L^1(I)$ et toute valeur d'adhérence u appartient à $BV(I, \{\alpha, \beta\})$.

(ii) Pour toute suite (u_ε) tendant vers u dans $L^1(I)$ on a l'inégalité:

$$\liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} F^\varepsilon(u_\varepsilon) \geq F(u).$$

(iii) Pour tout u dans $L^1(I)$ il existe une suite (u_ε) tendant vers u dans $L^1(I)$ telle que:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F^\varepsilon(u_\varepsilon) = F(u).$$

II. COMPACTITÉ ET ESTIMATION DE LA LIMITE INFÉRIEURE DES ÉNERGIES. — Définissons tout d'abord les fonctionnelles localisées en posant pour tout $\varepsilon > 0, u \in L^1(I)$ et pour tout ouvert $J \subset I$:

$$(5) \quad F^\varepsilon(u, J) := \varepsilon \int \int_{J \times J} \left| \frac{u(x) - u(y)}{x - y} \right|^2 dx dy + \lambda_\varepsilon \int_J W(u) dx.$$

LEMME 1. — Soit $\varepsilon > 0, u_\varepsilon \in L^1(I)$, et un intervalle $J \subset I$. Pour tout δ tel que $0 < \delta < (\beta - \alpha)/2$, définissons A_ε et B_ε les ensembles des points x de I vérifiant respectivement $u_\varepsilon(x) \leq \alpha + \delta$ et $u_\varepsilon(x) \geq \beta - \delta$, et posons

$$a_\varepsilon := \frac{|A_\varepsilon \cap J|}{|J|}, \quad b_\varepsilon := \frac{|B_\varepsilon \cap J|}{|J|}, \quad \sigma := \inf \{W(t) : \alpha + \delta \leq t \leq \beta - \delta\}.$$

Nous avons:

$$(6) \quad F^\varepsilon(u_\varepsilon, J) \geq 2(\beta - \alpha - 2\delta)^2 \varepsilon \times \left[\log(a_\varepsilon b_\varepsilon) + \log(\lambda_\varepsilon) - \log \left(\varepsilon \frac{2(\beta - \alpha - 2\delta)^2}{\sigma |J|} \right) \right].$$

LEMME 2. — Soit φ une fonction positive décroissante sur $]0, +\infty[$, étant donné deux boréliens A et B dans \mathbb{R} de mesure de Lebesgue a et b , on pose $\Phi(A, B) := \int \int_{A \times B} \varphi(|x - y|) dx dy$. Alors si $A \cup B \subset [X, Y]$ et $A \cap B = \emptyset$, on a l'inégalité:

$$(7) \quad \Phi(A, B) \geq \Phi([X, X + a], [Y - b, Y])$$

Démonstration du lemme 2. – On note $A < B$ si $x < y$ pour tout (x, y) dans $A \times B$. On note $d_x(A) := [x, x + a]$, $g_x(B) := [x - b, x]$. Remarquons tout d'abord que si $\{X\} < A < B < \{Y\}$ on a :

$$(8) \quad \Phi(A, B) \geq \Phi(d_X(A), B) \quad \text{et} \quad \Phi(A, B) \geq \Phi(A, g_Y(B)).$$

En effet posons $h(x) := X + \int_X^x 1_A(t) dt$. On a $h(x) \leq x$ sur $[X, +\infty[$ d'où :

$$\begin{aligned} \Phi(A, B) &= \int_B \int_A \varphi(y-x) dx dy \geq \int_B \int_X^{+\infty} \varphi(y-h(x)) 1_A(x) dx dy \\ &\geq \int_B \int_X^{a+X} \varphi(y-u) du dy = \Phi(d_X(A), B). \end{aligned}$$

Ceci démontre la première inégalité, l'autre se démontre de la même manière.

Montrons maintenant le lemme dans le cas où $A \subset A'$ et $B \subset B'$, A' et B' étant des réunions d'intervalles fermés $A' = \bigcup_{i=1}^{n_A} A'_i$, $B' = \bigcup_{i=1}^{n_B} B'_i$, $A' \cup B' \subset [X, Y]$, A'_i et B'_j étant des intervalles fermés disjoints. La démonstration se fait par récurrence sur $n_A + n_B$. Au rang 1, A ou B est vide et la proposition est triviale. Supposons le résultat vrai pour $n_A + n_B \leq N$. On peut supposer sans nuire à la généralité que A est non vide et que $A'_1 < (\bigcup_{i \neq 1} A'_i) \cup (\bigcup_{i \neq 1} B'_i)$. On note $A_1 = A \cap A'_1$ et $a_1 = |A_1|$. D'après (8) on a :

$$\Phi(A, B) = \Phi(A_1, B) + \Phi\left(\bigcup_{i \neq 1} A_i, B\right) \geq \Phi(d_X(A_1), B) + \Phi\left(\bigcup_i A_i, B\right)$$

et

$$\Phi(d_X(A_1), B) \geq \Phi(d_X(A_1), g_Y(B))$$

et d'après l'hypothèse de récurrence appliquée à $\bigcup_{i \neq 1} A_i$ et B dans $[X + a_1, Y]$:

$$\Phi\left(\bigcup_{i \neq 1} A_i, B\right) \geq \Phi(d_{X+a_1}\left(\bigcup_{i \neq 1} A_i\right), g_Y(B)).$$

Le résultat découle alors du fait que $d_X(A_1) \cup d_{X+a_1}\left(\bigcup_{i \neq 1} A_i\right) = d_X(A)$. Le lemme s'étend au cas de deux boréliens disjoints par approximation intérieure. \square

Démonstration du lemme 1. – En appliquant le lemme 2 avec $\varphi = 1/t^2$ on obtient :

$$\begin{aligned} F^\epsilon(u_\epsilon, J) &= \epsilon \int_{J \times J} \left| \frac{u_\epsilon(x) - u_\epsilon(y)}{x - y} \right|^2 dx dy + \lambda_\epsilon \int_J W(u_\epsilon) dx \\ &\geq \epsilon (\beta - \alpha - 2\delta)^2 \int_{(A_\epsilon \times B_\epsilon) \cup (B_\epsilon \times A_\epsilon)} \frac{1}{|x - y|^2} dx dy + \lambda_\epsilon \sigma |J| \setminus (A_\epsilon \cup B_\epsilon) \\ &\geq 2\epsilon (\beta - \alpha - 2\delta)^2 \\ &\quad \times \left[\log(a_\epsilon b_\epsilon) - \log(1 - a_\epsilon - b_\epsilon) + \frac{\lambda_\epsilon \sigma |J|}{2\epsilon (\beta - \alpha - 2\delta)^2} (1 - a_\epsilon - b_\epsilon) \right]. \end{aligned}$$

On applique alors l'inégalité

$$-\log x + Mx \geq \log M$$

avec

$$M = \frac{\lambda_\epsilon \sigma |J|}{2\epsilon (\beta - \alpha - 2\delta)^2} \quad \text{et} \quad x = (1 - a_\epsilon - b_\epsilon) \quad \square$$

Démonstration de (i) et (ii). – Remarquons d'abord que, si $F^\epsilon(u_\epsilon, I) \leq M$ pour tout ϵ , alors :

$$\int_I W(u_\epsilon) dx \leq \frac{M}{\lambda_\epsilon} \Rightarrow W(u_\epsilon) \rightarrow 0 \quad \text{dans } L^1(I).$$

Grâce à l'hypothèse (H2), (u_ϵ) est faiblement relativement compacte dans $L^1(I)$. Soit (ν_x) la mesure de Young associée à une sous-suite convergente [notée encore (u_ϵ)] de limite faible u . Comme $W(u_\epsilon) \rightarrow 0$ on a :

$$u(x) = \int_{\mathbb{R}} t \nu_x(dt) \quad \text{et} \quad \int_{\mathbb{R}} W(t) \nu_x(dt) = 0 \quad \text{p.p.}$$

Grâce à l'hypothèse (H1), il existe une fonction θ à valeurs dans $[0, 1]$ telle que :

$$\nu_x(dt) = \theta(x) \delta_\alpha(dt) + (1 - \theta(x)) \delta_\beta(dt) \quad \text{et} \quad u(x) = \theta(x) \alpha + (1 - \theta(x)) \beta.$$

Il s'agit maintenant de montrer que $\theta \in BV(I, \{0, 1\})$. Soit J un intervalle ouvert de I et $\delta \in]0, (\beta - \alpha)/2[$. D'après le lemme 1, nous avons :

$$(9) \quad F^\epsilon(u_\epsilon, J) \geq 2(\beta - \alpha - 2\delta)^2 \epsilon [\log(a_\epsilon b_\epsilon) + \log(\lambda_\epsilon) - \log(C\epsilon)].$$

D'autre part on vérifie aisément que :

$$a_\epsilon \rightarrow a := \frac{\int_J \theta dx}{|J|} \quad \text{et} \quad b_\epsilon \rightarrow b := \frac{\int_J (1 - \theta) dx}{|J|}.$$

Dans le cas où $ab > 0$, en utilisant le fait que $\epsilon \log \lambda_\epsilon \rightarrow k$ et que δ est arbitraire, le passage à la limite quand ϵ tend vers 0 dans (9) conduit à :

$$(10) \quad \liminf_{\epsilon \rightarrow 0} F^\epsilon(u_\epsilon, I) \geq 2k(\beta - \alpha)^2.$$

Considérons l'ensemble S des points où la limite approximative de θ est ni 0 ni 1. Pour tout entier $N \leq \mathcal{H}^0(S)$ il existe des intervalles disjoints I_n , $n = 1, \dots, N$, tels que $I_n \cap S \neq \emptyset$ pour tout n , et pour lesquels les quantités a et b associées sont non nulles. Grâce à (10) et à la sur-additivité de F^ϵ on obtient :

$$(11) \quad \liminf_{\epsilon \rightarrow 0} F^\epsilon(u_\epsilon, I) \geq \sum_1^N \liminf_{\epsilon \rightarrow 0} F^\epsilon(u_\epsilon, I_n) \geq 2k(\beta - \alpha)^2 N.$$

En conséquence S est fini, $\theta \in \{0, 1\}$ p.p. ce qui prouve (i). De plus (11) implique (ii). \square

III. ESTIMATION DE LA LIMITE SUPÉRIEURE DES ÉNERGIES. – La proposition (iii) du théorème est obtenue en démontrant par récurrence sur N la proposition suivante : I étant un intervalle tel que $\mathcal{H}^0(S_u \cap J) = N$, il existe ρ_0 tel que, pour tout $\rho \in]0, \rho_0[$, on peut trouver une suite (u_ϵ) telle que :

$$u_\epsilon \rightarrow u, \quad F^\epsilon(u_\epsilon, J) \rightarrow 2kN(\beta - \alpha)^2 \quad \text{et} \quad d(x, S_u) > \rho \Rightarrow u_\epsilon(x) = u(x).$$

* Pour $N = 1$, posons $S_u \cap J = \{x_1\}$ et :

$$A_\varepsilon = J \cap \left] -\infty, x_1 - \frac{\varepsilon}{\lambda_\varepsilon} \right[, \quad B_\varepsilon = J \cap \left] x_1 + \frac{\varepsilon}{\lambda_\varepsilon}, +\infty \right[, \\ C_\varepsilon = \left] x_1 - \frac{\varepsilon}{\lambda_\varepsilon}, x_1 + \frac{\varepsilon}{\lambda_\varepsilon} \right[.$$

Définissons u_ε comme la fonction continue, égale à u sur $A_\varepsilon \cup B_\varepsilon$ et affine sur C_ε . On a :

$$F^\varepsilon(u_\varepsilon, J) \sim 2\varepsilon \iint_{A_\varepsilon \times B_\varepsilon} \left| \frac{u_\varepsilon(x) - u_\varepsilon(y)}{x - y} \right|^2 \\ \sim 2\varepsilon(\beta - \alpha)^2 |\log(\varepsilon/\lambda_\varepsilon)| \sim 2k(\beta - \alpha)^2 .$$

Pour $N > 1$, posons

$$S_u \cap J = \{x_1 < x_2 < \dots < x_N < x_{N+1}\}, \quad \delta := \frac{x_{N+1} - x_N}{5}$$

et :

$$J' := J \cap \left] -\infty, x_N + 2\delta \right[, \quad J'' := J \cap \left] x_{N+1} - 2\delta, +\infty \right[, \quad C = J \setminus (J' \cup J'') .$$

En utilisant l'hypothèse de récurrence au rang N sur J' et au rang 1 sur J'' avec $\rho_0 < \delta$. On obtient u'_ε et u''_ε deux suites approximantes de u sur J' et J'' . On définit u_ε par : $u_\varepsilon = u'_\varepsilon$ sur J' , $u_\varepsilon = u''_\varepsilon$ sur J'' , $u_\varepsilon = u$ sur C . On a :

$$F^\varepsilon(u_\varepsilon, J) \sim F^\varepsilon(u'_\varepsilon, J') + F^\varepsilon(u''_\varepsilon, J'') + \varepsilon \iint_{J' \times J'' \cup C \times (J' \cup J'')} \left| \frac{u_\varepsilon(x) - u_\varepsilon(y)}{x - y} \right|^2 .$$

L'intégrale sur $J' \times J''$ est majorée par $(\alpha - \beta)^2/\delta^2$. Dans la deuxième intégrale $C \times (J' \cup J'')$ peut être remplacé par $C \times (J \setminus [x_N + \delta, x_{N+1} - \delta])$, cette intégrale est donc aussi majorée par $(\alpha - \beta)^2/\delta^2$. Ainsi $F^\varepsilon(u_\varepsilon, J)$ converge vers $2k(\beta - \alpha)^2(N + 1)$ et la proposition est démontrée à l'ordre $N + 1$. \square

Note remise le 6 mai 1994, acceptée le 26 mai 1994.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] L. MODICA, The gradient theory of phase transitions and the minimal interface criterion, *Arch. Rational Mech. Anal.*, 98, 1987, p. 123-142.
- [2] L. MODICA, Gradient theory of phase transitions with boundary contact energy, *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 5, 1987, p. 453-486.
- [3] R. A. ADAMS, *Sobolev spaces*, Academic Press, New York, 1975.
- [4] G. ALBERTI, G. BOUCHITTÉ et P. SEPPECHER, Phase transition with line tension effect (en préparation).

G. A. : Istituto di Matematiche Applicate, via Bonanno 25/B, 56126 Pisa, Italie.

G. B. et P. S. : UFR Science, Université de Toulon et du Var, BP n° 132, 83957 La Garde Cedex, France.

Phase Transition with Line Tension Effect

G. Alberti

Istituto di Matematiche Applicate,
via Bonanno 25/B, 56126 Pisa (Italy)
e-mail: alberti@sns.it

G. Bouchitté

Laboratoire d'Analyse Non Linéaire Appliquée,
Univ. de Toulon et du Var, BP 132, 83957 La Garde (France)
e-mail: bouchitte@naxos.unice.fr

P. Seppecher

Laboratoire d'Analyse Non Linéaire Appliquée,
Univ. de Toulon et du Var, BP 132, 83957 La Garde (France)
e-mail: seppeche@malte.univ-tln.fr

Abstract: we study the asymptotic behaviour of Cahn-Hilliard model under the assumption that the boundary surface energy W_2 is, like the volume energy W_1 , a two-wells positive function very large for intermediate values. We show that the singular limit associated to the energies

$$F_\varepsilon(u) := \varepsilon \int_{\Omega} |Du|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_{\Omega} W_1(u) + \lambda_\varepsilon \int_{\partial\Omega} W_2(u)$$

as ε tends to 0 and λ_ε tends to infinity depends on the limit of $\varepsilon \log \lambda_\varepsilon$. If the limit of $\varepsilon \log \lambda_\varepsilon$ is finite and strictly positive, the limit of F_ε is non-local, taking into account boundary surface phases. When these phases coincide with the trace of the volume phases, we obtain the classical capillary energy with an extra term corresponding to line tension. These results were announced in [ABS1] and [ABS2].

Keywords: Line Tension, Cahn-Hilliard fluid, Γ -convergence, Singular Perturbations

Contents

1. Introduction	p. 178
2. The main result	p. 180
3. Compactness and Lower Bound Inequality	p. 184
4. The Upper Bound Inequality	p. 197
5. Application to Capillary Equilibrium with Line Tension	p. 204
6. Appendix	p. 207
7. Acknowledgements	p. 213
8. References	p. 213

1. Introduction

In the classical model for two-phase fluids, it is assumed that the mass density u takes only two values α_1 and β_1 . We denote the phases $A_1 := \{u = \alpha_1\}$ and $B_1 := \{u = \beta_1\}$. Let Ω be the open set in which the fluid lies, the interface is the dividing surface $\partial A_1 \cap \Omega$. The equilibrium configuration minimizes the capillary energy

$$F_0(u) := c_1 \mathcal{H}^2(\partial A_1 \cap \Omega) + \widehat{c}_1 \mathcal{H}^2(\partial \Omega \cap \partial A_1) \quad (1.1)$$

where c_1 is the surface tension coefficient, \widehat{c}_1 represents wall-fluid interactions and \mathcal{H}^k stands for the k -dimensional Hausdorff measure. Let us define the contact line \mathcal{C} as the boundary of the interface (or equivalently as the one-dimensional interface dividing the traces of A_1 and B_1 on $\partial \Omega$) and, at every point of \mathcal{C} , the contact angle θ as the angle between the interface and the wall $\partial \Omega$ (more precisely the angle between the outward normals to A_1 and Ω on \mathcal{C}). At equilibrium θ is given by the Young's law (see for instance [RW] or [F])

$$c_1 \cos(\theta) = \widehat{c}_1 \quad (1.2)$$

In fact, physicists frequently add an extra term in (1.1) to take into account line tension [RW]. This term corresponds to a concentration of energy (with line density denoted here c_2) along the contact line \mathcal{C} . The capillary energy becomes:

$$F_0(u) := c_1 \mathcal{H}^2(\partial A_1 \cap \Omega) + \widehat{c}_1 \mathcal{H}^2(\partial \Omega \cap \partial A_1) + c_2 \mathcal{H}^1(\mathcal{C}) \quad (1.3)$$

An alternative way to study two-phase fluids is to use a continuum model as done in Cahn-Hilliard theory. The Cahn and Hilliard model ([CH1], [CH2]) is the simplest continuum model for phase transition. It is assumed that the volume energy of the fluid is the sum of a non-convex volume energy $W_1(u)$ (where W_1 is a two-well potential vanishing only at α_1 and β_1) and a term $\xi |Du|^2$ taking into account the non-homogeneity of the fluid. Moreover a surface energy $W_2(Tu)$ concentrated on the boundary takes into account the interactions between the fluid and the container (here Tu denotes the trace of u on the boundary $\partial \Omega$). The coefficient ξ introduces an intrinsic length (characteristic of the thickness of the interface). As this length is in general much smaller than the size of the container, it is natural to study the equilibrium of such a fluid in an asymptotic way, i.e., to consider the limits as $\varepsilon \rightarrow 0$ of the sequence of minimizers u_ε (subject to some volume constraint) of the rescaled energies

$$F_\varepsilon(u) := \varepsilon \int_\Omega |Du|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_\Omega W_1(u) + \lambda \int_{\partial \Omega} W_2(Tu). \quad (1.4)$$

In the case $\lambda = 0$ (that is, when no boundary energy is considered) this problem was studied by several authors (see for instance [Gu], [M1], [Ba]). When $\lambda = 1$, the problem was solved by Modica [M2] by studying the limit (in the sense of Γ -convergence) of the functionals F_ε . He proved that the limit energy is finite only when u takes only the values

α_1 and β_1 which correspond to the two phases $A_1 := \{u = \alpha_1\}$ and $B_1 := \{u = \beta_1\}$ and when the interface is suitably regular and has finite area (see section 2 for more precise statements). Then, up to an additional constant, the limit energy takes the form (1.1), where the coefficients c_1 and \widehat{c}_1 are explicitly determined in term of W_1 and W_2 . Owing to variational properties of Γ -convergence, every minimizing sequence (u_ε) of F_ε converges to a minimizer u of F_0 . This way the convergence result of Modica makes the connection between the classical model for capillarity and the model of Cahn and Hilliard.

However the behaviour with respect to ε of the various quantities appearing in (1.4) has no physical ground and a lot of variants can be considered which can lead to different models for capillarity. For instance, in [BS] a rough wall with asperities of size ε was considered (in this case Ω depends upon ε). Using homogenization techniques, a dependence of the contact angle on the roughness parameters of the boundary was explicitated.

In this paper we show how the Cahn-Hilliard model can lead to a model for capillarity with line tension. To that aim we propose a new variant: we postulate that W_2 is a two-well potential vanishing only at α_2 and β_2 and that λ in (1.4) depends on ε (we denote it λ_ε) and tends to infinity with an appropriate scaling as ε tends to 0. Indeed, let u_ε be a minimizer of F_ε , the values of the trace Tu_ε in the vicinity of \mathcal{C} differ from its values far away on the wall and our postulate makes the surface energy become very large for these intermediate values. Thus we expect a limit energy with a concentration on the contact line like in (1.3).

Unfortunately F_0 defined by (1.3) is not lower semicontinuous with respect to $L^1(\Omega)$ -convergence. An important consequence is that the existence of a minimizer for F_0 is not assured. On the other hand, F_0 cannot be the right limit of F_ε in the sense of Γ -convergence. The point is that the limit v of the traces on the boundary of the functions u_ε may not coincide with the trace of the limit u . From a mechanical point of view, a surface phase separation may appear on the boundary: v takes values in $\{\alpha_2, \beta_2\}$, defining boundary phases $A_2 := \{v = \alpha_2\}$ and $B_2 := \{v = \beta_2\}$ and the dividing line $\mathcal{L} := Sv$ does not necessarily coincide with the contact line \mathcal{C} (see figure 3). In fact, our results show that the limit energy Φ cannot be simply described in term of u but needs the knowledge of the pair (u, v) (Theorem 2.1). In this theorem, the interesting scaling for λ_ε is brought to the fore:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \log \lambda_\varepsilon = K \quad \text{with } 0 < K < \infty, \quad (1.5)$$

The assumption (1.5) prevents an oscillating behaviour of the traces of minimizing sequences u_ε and assures the convergence of $(u_\varepsilon, Tu_\varepsilon)$ in $L^1(\Omega) \times L^1(\partial \Omega)$ to some (u, v) . Then we show that the limit energy Φ is

$$\Phi(u, v) := c_1 \mathcal{H}^{N-1}(\partial A_1 \cap \Omega) + \int_{\partial \Omega} |H(Tu) - H(v)| + c_2 \mathcal{H}^{N-2}(\mathcal{L}) \quad (1.6)$$

if (u, v) belongs to $BV(\Omega, \{\alpha_1, \beta_1\}) \times BV(\partial \Omega, \{\alpha_2, \beta_2\})$. Here H denotes a primitive of $2\sqrt{W_1}$. This theorem is the main result of this paper and its proof, rather long, is developed in sections 3 and 4.

As an immediate consequence of Theorem 2.1, Corollary 2.2 states that the limit of F_ε in the sense of Γ -convergence is non local and reads as

$$F(u) := \inf \{ \Phi(u, v) : v \in BV(\partial\Omega, \{\alpha_2, \beta_2\}) \}. \quad (1.7)$$

for all u in $BV(\Omega, \{\alpha_1, \beta_1\})$ ($F(u) = +\infty$ otherwise). In Theorem 2.4 we show that F is nothing else but the relaxed functional associated with the functional F_0 defined in (1.3). In that sense we claim that the model for capillarity with line tension is mathematically justified as the singular limit of Cahn-Hilliard model.

We state precisely all these results in section 2. Sections 3 and 4 are devoted to prove them. Some consequences for equilibrium and contact angle are discussed in section 5 (see also [ABS2]). In the appendix (section 6) we develop some auxiliary results used in the previous sections.

2. The Main Result

First we recall some basic notation we use in this paper.

In the following we consider integration on bounded open subsets A of some euclidean space \mathbb{R}^h or some h -dimensional embedded manifold: in both cases, unless differently stated, the measure associated to A is the h -dimensional Hausdorff measure \mathcal{H}^h (i.e., the h -dimensional Lebesgue measure on the euclidean space) and when no doubt can arise, we often write $\int_A f$ instead of $\int_A f d\mathcal{H}^h$, and $|A|$ instead of $\mathcal{H}^h(A)$.

By $H^1(A)$ we denote the Sobolev space of all real functions in $L^2(A)$ whose distributional derivatives are represented by functions in $L^2(A)$ (when $u \in H^1(A)$ and A is an open subset of \mathbb{R}^h , Du takes values in \mathbb{R}^h and when A is a subset of an embedded manifold M , then Du takes values in the tangent space of M in x for almost all x).

We denote by $BV(A)$ the space of all real functions in $L^1(A)$ with bounded variation, i.e., whose distributional derivatives are represented by bounded Borel measures on A (when $u \in BV(A)$ and A is an open subset of \mathbb{R}^h , the measure Du takes values in \mathbb{R}^h and when A is an open subset of a manifold M embedded in \mathbb{R}^k , then Du takes values in \mathbb{R}^k and the density of Du with respect to the total variation $|Du|$ takes values in the tangent space of M in x for $|Du|$ almost all x).

When A has Lipschitz boundary and u belongs to $H^1(A)$, or $BV(A)$ as well, we denote by Tu the trace of u on ∂A .

The jump set Su of a real function u is the set of all points where u has no approximate limit (with respect to the natural measure associated to A). When u belongs to BV , the jump set Su is \mathcal{H}^{h-1} -countably rectifiable and this means that it may be covered, except for an \mathcal{H}^{h-1} -negligible subset, by countably many $(h-1)$ -dimensional submanifolds of class C^1 .

When I is a subset of \mathbb{R} , we define $BV(A, I)$ as the class of all functions $u \in BV(A)$ which take values in I almost everywhere; we notice that if $I := \{\alpha, \beta\}$, then a function $u : A \rightarrow I$ has bounded variation if and only its jump set Su has finite \mathcal{H}^{h-1} measure;

moreover $\|Du\| = |\beta - \alpha| \mathcal{H}^{h-1}(Su)$. In particular, if $u \in BV(A)$ is the characteristic function of some Borel subset E , we say that E has finite perimeter in A . In this case the jump set Su coincides with the so-called essential boundary of E denoted by $\partial E \cap A$. For further properties of BV and Sobolev spaces, we refer to [EG] and [Z].

When μ is a measure on the set B and C is a subset of B , $\mu \llcorner C$ is the restriction of μ to C . When f is a function on \mathbb{R} , we say that f has growth at least linear at infinity if there exist positive real numbers a and b such that $f(t) \geq a|t| - b$ for all t .

Let us now define some specific notations for our problem. Ω is a bounded open subset of \mathbb{R}^N with boundary of class C^2 , W_1 and W_2 are non-negative continuous functions on \mathbb{R} with growth at least linear at infinity such that $W_i(t) = 0$ if and only if $t \in I_i := \{\alpha_i, \beta_i\}$ (with $\alpha_i < \beta_i$) for $i = 1, 2$. The symbol ε denotes a parameter decreasing to 0, while λ_ε goes to infinity and satisfies

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \log \lambda_\varepsilon = K \quad \text{with } 0 < K < \infty, \quad (2.1)$$

H is a function on \mathbb{R} such that $H' = 2\sqrt{W_1}$ and we set

$$c_1 := |H(\beta_1) - H(\alpha_1)| = 2 \int_{\alpha_1}^{\beta_1} \sqrt{W_1} \quad (2.2)$$

$$c_2 := (\beta_2 - \alpha_2)^2 \frac{K}{\pi}. \quad (2.3)$$

We consider the following functionals defined for every $\varepsilon > 0$ and every $u \in H^1(\Omega)$:

$$F_\varepsilon(u) := \varepsilon \int_\Omega |Du|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_\Omega W_1(u) + \lambda_\varepsilon \int_{\partial\Omega} W_2(Tu) \quad (2.4)$$

The asymptotic behaviour of the functionals $F_\varepsilon(u)$ as $\varepsilon \rightarrow 0$ is described by a functional Φ which depends on two variables u and v . The variable u (volume density) ranges into $I_1 := \{\alpha_1, \beta_1\}$ and is related to the limit of minimizers u_ε of F_ε ; the variable v (surface density) ranges into $I_2 := \{\alpha_2, \beta_2\}$ and corresponds to the limit of Tu_ε (the traces of u_ε on $\partial\Omega$). Since this limit v may differ from the trace Tu , a boundary layer appears contributing to the global energy by an equivalent surface density on $\partial\Omega$ equal to $|H(Tu) - H(v)|$. The interface energy in Ω is concentrated on the surface Su dividing the volume phases $\{u = \alpha_1\}$ and $\{u = \beta_1\}$ and is described as in [M2] by the capillary coefficient c_1 defined in (2.2).

The main feature of our model is that a minimal interface criterium appears between the surface phases $\{v = \alpha_2\}$ and $\{v = \beta_2\}$ represented by the line tension coefficient c_2 defined in (2.3).

The limit energy Φ associated with F_ε reads as:

$$\Phi(u, v) := \begin{cases} c_1 \mathcal{H}^{N-1}(Su) + \int_{\partial\Omega} |H(Tu) - H(v)| + c_2 \mathcal{H}^{N-2}(Sv) & \text{if } u \in BV(\Omega, I_1), v \in BV(\partial\Omega, I_2), \\ +\infty & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (2.5)$$

Indeed, the following theorem holds:

Theorem 2.1.

- (i) Compactness: let $(u_\varepsilon) \subset H^1(\Omega)$ be a sequence such that $F_\varepsilon(u_\varepsilon)$ is bounded. Then the sequence $(u_\varepsilon, Tu_\varepsilon)$ is strongly relatively compact in $L^1(\Omega) \times L^1(\partial\Omega)$ and every cluster point belongs to $BV(\Omega, I_1) \times BV(\partial\Omega, I_2)$.
- (ii) Lower bound inequality: for every (u, v) in $BV(\Omega, I_1) \times BV(\partial\Omega, I_2)$ and every sequence $(u_\varepsilon) \subset H^1(\Omega)$ such that $u_\varepsilon \rightarrow u$ in $L^1(\Omega)$ and $Tu_\varepsilon \rightarrow v$ in $L^1(\partial\Omega)$, we have

$$\liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon) \geq \Phi(u, v).$$

- (iii) Upper bound inequality: for every (u, v) in $BV(\Omega, I_1) \times BV(\partial\Omega, I_2)$ there exists an approximating sequence $(u_\varepsilon) \subset H^1(\Omega)$ such that $u_\varepsilon \rightarrow u$ in $L^1(\Omega)$, $Tu_\varepsilon \rightarrow v$ in $L^1(\partial\Omega)$ and

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon) \leq \Phi(u, v)$$

This theorem is the main result of this paper; statements (i) and (ii) are proved in sections 3.11 and 3.12 respectively, statement (iii) is proved in section 4.

We may easily reformulate statements (ii) and (iii) of Theorem 2.1 in term of Γ -convergence. For the convenience of the reader, we recall here the definition and the basic properties of Γ -convergence, for more general definitions and further details we refer to [DM], chapters 3-9.

Definition of Γ -convergence

Let X be a metric space and for every $\varepsilon > 0$ let be given functions $F_\varepsilon : X \rightarrow [0, \infty]$. We say that the functions F_ε Γ -converge to $F : X \rightarrow [0, \infty]$ (on the space X) if the following properties are fulfilled:

- (i) Lower bound inequality: $\forall u \in X, \forall (u_\varepsilon) \subset X$ such that $u_\varepsilon \rightarrow u$ there holds $\liminf F_\varepsilon(u_\varepsilon) \geq F(u)$,
- (ii) Upper bound inequality: $\forall u \in X, \exists (u_\varepsilon) \subset X$ such that $u_\varepsilon \rightarrow u$ and $\limsup F_\varepsilon(u_\varepsilon) \leq F(u)$.

This notion of convergence is characterized by the following variational property: the Γ -limit F is always a lower semicontinuous function and if \tilde{u}_ε are minimizers of F_ε for every $\varepsilon > 0$, any cluster point of the sequence (\tilde{u}_ε) is a minimizer of F .

In order to reformulate Theorem 2.1 we extend every functional F_ε to $L^1(\Omega)$ by setting $F_\varepsilon = +\infty$ outside $H^1(\Omega)$ and we eliminate the variable v in (2.5) by setting

$$F(u) := \begin{cases} \inf \{ \Phi(u, v) : v \in BV(\partial\Omega, I_2) \} & \text{if } u \in BV(\Omega, I_1), \\ +\infty & \text{elsewhere in } L^1(\Omega). \end{cases} \quad (2.6)$$

Then Theorem 2.1 immediately yields the following corollary:

Corollary 2.2. *The sequence F_ε Γ -converges to F in $L^1(\Omega)$.*

Note that the functional $F(u)$ defined by (2.6) is non-local with respect to u , in the sense that it cannot be expressed by integration of a local density depending on the variables u and Du . Moreover we remark that statement (iii) of Theorem 2.1 may be refined by choosing the approximating sequence (u_ε) so that $\int_\Omega u_\varepsilon = \int_\Omega u$ for every ε (we will not prove this refinement of statement (iii), in fact one has to slightly modify the construction of the approximating sequence (u_ε) given in section 4). This way we can fit with a prescribed total mass constraint: if we take a real number m such that $\alpha_1|\Omega| < m < \beta_1|\Omega|$, then the functionals F_ε Γ -converge to F also on the subspace of all $u \in L^1(\Omega)$ which satisfy the mass constraint $\int_\Omega u = m$. Using the properties of Γ -convergence mentioned above and the compactness property of functionals F_ε (statement (i) of Theorem 2.1), we immediately obtain the following:

Corollary 2.3. *For every $\varepsilon > 0$ let u_ε be a solution of the problem*

$$\min \{ F_\varepsilon(u) : \int_\Omega u = m \}. \quad (2.7)$$

Then the sequence (u_ε) is strongly relatively compact in $L^1(\Omega)$ (as the sequence of the traces (Tu_ε) is in $L^1(\partial\Omega)$) and every cluster point of belongs to $BV(\Omega, I_1)$ and is a solution of

$$\min \{ F(u) : \int_\Omega u = m \}. \quad (2.8)$$

Now, let us define $p : I_1 \rightarrow I_2$ by

$$p(\alpha_1) := \alpha_2, \quad p(\beta_1) := \beta_2, \quad (2.9)$$

and for every $u \in L^1(\Omega)$

$$F_0(u) := \begin{cases} \Phi(u, p(Tu)) & \text{if } (u, Tu) \in BV(\Omega, I_1) \times BV(\partial\Omega), \\ +\infty & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (2.10)$$

The following statement will be useful in the discussion of the mechanical model explained in section 5; it describes the functional F as the relaxation of F_0 .

Theorem 2.4. *Assume that the following inequalities hold:*

$$\alpha_2 \leq \alpha_1 < \beta_1 \leq \beta_2. \quad (2.11)$$

Then F is the relaxation of F_0 with respect to the strong topology of $L^1(\Omega)$ and this means that for every u in $L^1(\Omega)$

$$F(u) = \inf \left\{ \liminf_{n \rightarrow \infty} F_0(u_n) : u_n \rightarrow u \text{ in } L^1(\Omega) \right\}. \quad (2.12)$$

Proof of Theorem 2.4 may be found in section 4. We remark that, as for statement (iii) of Theorem 2.1, the approximating sequences (u_n) in (2.12) can be taken so that $\int_{\Omega} u_n = \int_{\Omega} u$ for every n . Therefore the problem

$$\min \{F_0(u) : \int_{\Omega} u = m\} . \quad (2.13)$$

have the same infimum as problem (2.8) and every minimizer for (2.13) (if any) minimizes (2.8) too (see section 5 for further details).

3. Compactness and Lower Bound Inequality

This section is devoted to the proof of statements (i) and (ii) of Theorem 2.1. The proof will be divided in several steps by introducing the following localized localized functionals (defined for every $\varepsilon > 0$, $u \in H^1(\Omega)$ and for every Borel set $B \subset \mathbb{R}^N$):

$$F_{\varepsilon}(u, B) := \varepsilon \int_{\Omega \cap B} |Du|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_{\Omega \cap B} W_1(u) + \lambda_{\varepsilon} \int_{\partial \Omega \cap B} W_2(Tu) . \quad (3.1)$$

Clearly the behaviour of $F_{\varepsilon}(u, B)$ depends heavily on whether the set B intersects or not the boundary $\partial \Omega$.

We give first a lower estimate which is relative to the case B does not intersect the boundary. In this case, the third integral in the right side of definition (3.1) simply disappears. Then we may consider the following functionals: for every bounded open set $A \subset \mathbb{R}^N$, $\varepsilon > 0$, and $u \in H^1(A)$, we set

$$G_{\varepsilon}^1(u, A) := \varepsilon \int_A |Du|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_A W_1(u) . \quad (3.2)$$

Proposition 3.1.

- (i) Compactness: every sequence $(u_{\varepsilon}) \subset H^1(A)$, such that $G_{\varepsilon}^1(u_{\varepsilon}, A)$ is bounded, is strongly relatively compact in $L^1(A)$ and every cluster point belongs to $BV(A, I_1)$.
- (ii) Lower bound inequality: for every $u \in BV(A, I_1)$ and every sequence $(u_{\varepsilon}) \subset H^1(A)$ such that $u_{\varepsilon} \rightarrow u$ in $L^1(A)$ we have

$$\liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} G_{\varepsilon}^1(u_{\varepsilon}, A) \geq c_1 \mathcal{H}^{N-1}(Su) .$$

- (iii) Moreover, assuming that A has boundary of class C^2 and that the traces Tu_{ε} on ∂A converges to some v strongly in $L^1(B)$ (where B is a Borel subset of ∂A endowed with the measure $\mathcal{H}^{N-1} \llcorner B$), the previous inequality is strengthened as follows:

$$\liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} G_{\varepsilon}^1(u_{\varepsilon}, A) \geq c_1 \mathcal{H}^{N-1}(Su) + \int_B |H(Tu) - H(v)| d\mathcal{H}^{N-1} .$$

Assertions (i) and (ii) are the first part of a theorem proved by Modica and Mortola in [MM] (see also [M1], [M2]): the complete statement says that the functionals G_{ε}^1 (extended to $L^1(A)$ by setting $G_{\varepsilon}^1 = +\infty$ outside $H^1(A)$) Γ -converge in $L^1(A)$ to the functional G^1 given by $G^1(u) := c_1 \mathcal{H}^{N-1}(Su)$ if $u \in BV(A, I_1)$ and $+\infty$ elsewhere. Assertion (iii) was first proved by Modica in [M2]. We remark that since u belongs to $BV(A)$, the trace Tu is a well-defined function in $L^1(\partial A)$. This statement can be immediately extended by a localization argument to all open sets A whose boundary is a manifold of class C^2 except for an \mathcal{H}^{N-1} -negligible closed subset. For the convenience of the reader, a short proof of Proposition 3.1 is given in sections 3.4 and 3.5.

The second preliminary estimate is relative to the cases where B intersects the boundary. Since we will only estimate the energy of very small balls B , we do not consider the contribution of the bulk energy $\int W_1(u)$ (this will be justified a posteriori by the upper bound inequality proved in section 4). Moreover we may assume that there exists a diffeomorphism very close to an isometry which maps $B \cap \Omega$ into an half-ball D and $B \cap \partial \Omega$ into an hyperplane.

Therefore we denote by D the N -dimensional half-ball of radius $r > 0$ $\{x \in \mathbb{R}^N, |x| < r, x_N > 0\}$ and by E the $(N-1)$ -dimensional ball $\{x \in \mathbb{R}^N, |x| < r, x_N = 0\}$ (see fig.1) and introduce the functionals $G_{\varepsilon}^2(u)$ defined for every $u \in H^1(D)$, $\varepsilon > 0$, by

$$G_{\varepsilon}^2(u) := \varepsilon \int_D |Du|^2 + \lambda_{\varepsilon} \int_E W_2(Tu) . \quad (3.3)$$

Proposition 3.2.

- (i) Compactness: for every sequence $(u_{\varepsilon}) \subset H^1(D)$ such that $G_{\varepsilon}^2(u_{\varepsilon})$ is bounded, the sequence of traces (Tu_{ε}) is strongly relatively compact in $L^1(E)$, and every cluster point belongs to $BV(E, I_2)$.
- (ii) Lower bound inequality: for every $v \in BV(E, I_2)$ and every sequence $(u_{\varepsilon}) \subset H^1(D)$ such that $Tu_{\varepsilon} \rightarrow v$ in $L^1(E)$ we have

$$\liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} G_{\varepsilon}^2(u_{\varepsilon}) \geq c_2 \mathcal{H}^{N-2}(Sv) .$$

We prove this proposition in sections 3.8 and 3.9. We first reduce to the bidimensional case using a slicing argument and then we minorize the Dirichlet energy by the square of the $H^{1/2}$ -norm of Tu on E (cf. Corollary 6.4). Precisely, we set for every $v \in L^1(E)$

$$G_{\varepsilon}^3(v) := \frac{\varepsilon}{2\pi} \int_{E^2} \left| \frac{v(x') - v(x)}{x' - x} \right|^2 dx' dx + \lambda_{\varepsilon} \int_E W_2(v) , \quad (3.4)$$

and then we show that for every $u \in H^1(D)$, $G_{\varepsilon}^2(u) \geq G_{\varepsilon}^3(Tu)$. This way we deal with a new one-dimensional functional for which we prove the following key result:

Proposition 3.3.

- (i) Compactness: every sequence $(v_\varepsilon) \subset L^1(E)$ such that $G_\varepsilon^3(v_\varepsilon)$ is bounded is strongly relatively compact in $L^1(E)$ and every cluster point belongs to $BV(E, I_2)$.
- (ii) Lower bound inequality: for every $v \in BV(E, I_2)$ and every sequence $(v_\varepsilon) \subset L^1(E)$ such that $v_\varepsilon \rightarrow v$ in $L^1(E)$ there holds

$$\liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} G_\varepsilon^3(u_\varepsilon) \geq c_2 \mathcal{H}^0(Sv).$$

Proposition 3.3 is part of the result proved in [ABS]: the complete statement says that the functional G_ε^3 Γ -converge in $L^1(E)$ to the functional G^3 given by $G^3(v) := c_2 \mathcal{H}^0(Sv)$ if $v \in BV(E, I_2)$ and $+\infty$ elsewhere. We prove this proposition in section 3.7.

3.4. Proof of statements (i) and (ii) of Proposition 3.1

We begin with a basic inequality involving the functionals G_ε^1 . Let u be a bounded function in $H^1(A)$ and set $w := H \circ u$ (recall that H is a primitive of $2\sqrt{W_1}$); then w belongs to $H^1(A)$ and for every $\varepsilon > 0$

$$G_\varepsilon^1(u, A) \geq \int_A |Dw|. \quad (3.5)$$

Indeed we have

$$G_\varepsilon^1(u, A) = \int_A \left[\frac{1}{\varepsilon} |Du|^2 + \varepsilon W_1(u) \right] \geq^{(1)} \int_A 2\sqrt{W_1(u)} |Du| = \int_A |H'(u) Du| = \int_A |Dw|.$$

Now, let (ε_n) and (u_n) be sequences such that $\varepsilon_n \rightarrow 0$ and $G_{\varepsilon_n}^1(u_n) \leq C < \infty$ for all n ; we want to extract a subsequence $(u_k) = (u_{n_k})$ which converges to some $u \in BV(A, I_1)$ in the L^1 norm and moreover we want to show that $\liminf_k G_{\varepsilon_k}^1(u_k, A) \geq G^1(u, A)$. We begin assuming that the functions u_n are uniformly bounded and we set $w_n := H \circ u_n$ for every n . The functions w_n are uniformly bounded too and by (3.5) we have

$$C \geq G_{\varepsilon_n}^1(u_n, A) \geq \int_A |Dw_n| \quad \forall n.$$

Thus the sequence (w_n) is relatively compact in the weak* topology of $BV(A)$ and we may extract a subsequence $(w_k) = (w_{n_k})$ which converges almost everywhere in A to some $w \in BV(A)$. Since H is one-to-one, the functions u_k converge to $u := H^{-1} \circ w$ almost everywhere in A and then also for the L^1 norm because they are uniformly bounded. Moreover, from (3.2) we have

$$\int_A W_1(u_n) \leq \varepsilon_n G_{\varepsilon_n}^1(u_n) \leq C \varepsilon_n. \quad (3.6)$$

⁽¹⁾ Apply the inequality $a^2 + b^2 \geq 2ab$ with $a := \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} |Du|$ and $b := \sqrt{\varepsilon W_1(u)}$.

Since $W_1(t) = 0$ if and only if $t \in I_1$, from (3.6) and the strong convergence of u_k in $L^1(A)$ we find that $u(x) \in I_1$ a.e. (and then $w(x) \in \{0, c_1\}$ a.e.). Since w belongs to $BV(A)$, u belongs to $BV(A, I_1)$, $Su = Sw$ and $\mathcal{H}^{N-1}(Su) = \mathcal{H}^{N-1}(Sw) = c_1^{-1} \|Dw\| < \infty$. Furthermore

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_k}^1(u_k, A) \geq \liminf_{k \rightarrow \infty} \int_A |Dw_k| \geq \int_A |Dw| = c_1 \mathcal{H}^{N-1}(A \cap Su).$$

Now we have to relax the uniform boundedness assumption on functions u_n : we take positive real numbers c and r such that $W_1(t) \geq c|t| \vee W_1(r)$ when $t \geq r$ and $W_1(t) \geq c|t| \vee W_1(-r)$ when $t \leq -r$ (such c and r can always be found because W_1 has growth at least linear at infinity) and we take the truncated functions $u'_n := (u_n \vee -r) \wedge r$. These functions are uniformly bounded and one readily checks that

$$G_{\varepsilon_n}^1(u_n) \geq G_{\varepsilon_n}^1(u'_n).$$

Moreover

$$\int_A |u'_n - u_n| \leq \int_{\{|u_n| \geq r\}} |u_n| \leq \frac{1}{c} \int_{\{|u_n| \geq r\}} W_1(u_n) \leq \frac{1}{c} \int_A W_1(u_n) \quad (3.7)$$

and then inequality (3.6) yields that $\|u'_n - u_n\|_1 \rightarrow 0$ as $n \rightarrow \infty$. Eventually it is enough to apply the assertions (i) and (ii) to the sequence (u'_n) . \square

3.5. Proof of statement (iii) of Proposition 3.1

Let A' a relatively compact open subset of A and assume that ∂A is of class C^2 . Let $\eta(x)$ denote the inner normal of ∂A in the point x , we may find $r > 0$ so that the map $\psi : \partial A \times [0, r] \rightarrow \mathbb{R}^N$ defined by $\psi(x, t) := x + t\eta(x)$ is an embedding ranging into $A \setminus A'$.

For every n , we set $w_n := u_n \circ \psi$ and $w := u \circ \psi$. Since each w_n belongs to $H^1(\partial A \times]0, r[)$, we may modify it in a negligible set so that for every $x \in \partial A$, $w_n(x, \cdot)$ is a continuous function in $H^1(0, r)$.

Take $\delta < r$ and $c(\delta)$ smaller than $|D\psi|^{-1}(x, t)$ and $|J\psi(x, t)|$ for every (x, t) in $\partial A \times [0, \delta]$. As $D\psi(x, t)$ converges uniformly to the identity as $t \rightarrow 0$, we obtain that $c(\delta)$ converges to 1 as $\delta \rightarrow 0$. Then, using inequality (3.5) and change of variables formula, we get

$$\begin{aligned} G_{\varepsilon_n}^1(u_n, A \setminus \bar{A}') &\geq \int_{\psi(\partial A \times]0, \delta])} |D(H \circ u_n)| d\mathcal{H}^N \\ &\geq \int_{\partial A \times]0, \delta]} |D(H \circ w_n)| |D\psi|^{-1} |J\psi| d\mathcal{H}^N \\ &\geq c(\delta) \int_{\partial A \times]0, \delta]} |D(H \circ w_n)| d\mathcal{H}^N \\ &\geq c(\delta) \int_{\partial A} \left(\int_0^\delta \left| \frac{\partial(H \circ w_n)}{\partial t} \right| dt \right) d\mathcal{H}^{N-1} \\ &\geq c(\delta) \int_B |H(w_n(x, \delta)) - H(w_n(x, 0))| d\mathcal{H}^{N-1}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

By assumption we have $w_n(x, 0) = Tu_n(x)$ tends to $v(x)$ in $L^1(B)$ and, as $w_n \rightarrow w$ in $L^1(B \times]0, r[)$, for almost every $\delta < r$, $w_n(\cdot, \delta)$ tends to $w(\cdot, \delta)$ in $L^1(B)$. Thus, passing to the liminf in (3.8), for suitable δ ,

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_n}^1(u_n, A \setminus \bar{A}') \geq c(\delta) \int_B |H(w(x, \delta)) - H(v(x))| d\mathcal{H}^{N-1}. \quad (3.9)$$

Now, as $\delta \rightarrow 0$, $w(x, \delta)$ tends to $w(x, 0) = Tu(x)$ in $L^1(B)$. Passing to the limit in (3.9) and applying separately our statement (ii) on A' , we get

$$\begin{aligned} \liminf_{n \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_n}^1(u_n, A) &\geq \liminf_{n \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_n}^1(u_n, A \setminus \bar{A}') + \liminf_{n \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_n}^1(u_n, A') \\ &\geq \int_{\partial A} |H(Tu(x)) - H(v(x))| d\mathcal{H}^{N-1} + G^1(u, A') \end{aligned}$$

The conclusion follows by taking the supremum over all open subset A' relatively compact in A . \square

In order to prove Proposition 3.3 we introduce the following localized functionals: for every $\varepsilon > 0$, $v \in L^1(E)$ and every Borel set $J \subset \mathbb{R}$

$$G_\varepsilon^3(v, J) := \frac{\varepsilon}{2\pi} \int_{(E \cap J)^2} \left| \frac{v(x') - v(x)}{x' - x} \right|^2 dx' dx + \lambda_\varepsilon \int_{E \cap J} W_2(v). \quad (3.10)$$

We have the following estimate:

Lemma 3.6. *Let δ such that $0 < \delta < (\beta_2 - \alpha_2)/2$. For every interval $J \subset E$, $\varepsilon > 0$ and $v \in L^1(E)$, let $A = A(J, \varepsilon, v)$ and $B = B(J, \varepsilon, v)$ be the sets of all points $x \in J$ such that $v(x) \leq \alpha_2 + \delta$ and $v(x) \geq \beta_2 - \delta$ respectively and set*

$$\begin{aligned} a = a(J, \varepsilon, v) &:= \frac{|A \cap J|}{|J|}, \quad b = b(J, \varepsilon, v) := \frac{|B \cap J|}{|J|}, \\ \sigma &:= \inf \{ W_2(t) : \alpha_2 + \delta \leq t \leq \beta_2 - \delta \}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Then, if $\varepsilon \leq \frac{\pi \sigma |J|}{(\beta_2 - \alpha_2 - 2\delta)^2}$, we have

$$G_{\varepsilon}^3(u_\varepsilon, J) \geq \frac{\varepsilon}{\pi} (\beta_2 - \alpha_2 - 2\delta)^2 [\log(ab) + \log(\lambda_\varepsilon)]. \quad (3.12)$$

Proof. The proof relies on the following key inequality obtained by applying Lemma 6.1 stated in the Appendix (with $\Psi(s) = 1/s^2$ and $[t, y] = J$):

$$\int_{A \times B} \frac{1}{|x' - x|^2} dx' dx \geq \log \left[1 + \frac{ab}{1 - a - b} \right]. \quad (3.13)$$

Then by definitions (3.10) and (3.11), we get

$$\begin{aligned} G_\varepsilon^3(v, J) &\geq \frac{\varepsilon}{2\pi} \int_{(A \times B) \cup (B \times A)} \left| \frac{v(x') - v(x)}{x' - x} \right|^2 dx' dx + \lambda_\varepsilon \int_{J \setminus (A \cup B)} W_2(v) \\ &\geq \frac{\varepsilon}{\pi} (\beta_2 - \alpha_2 - 2\delta)^2 \int_{A \times B} \frac{1}{|x' - x|^2} dx' dx + \lambda_\varepsilon \sigma |J \setminus (A \cup B)| \\ &\geq^{(2)} \frac{\varepsilon}{\pi} (\beta_2 - \alpha_2 - 2\delta)^2 \log \left[1 + \frac{ab}{1 - a - b} \right] + \lambda_\varepsilon \sigma (1 - a - b) |J| \\ &\geq \frac{\varepsilon}{\pi} (\beta_2 - \alpha_2 - 2\delta)^2 \left[\log(ab) - \log(1 - a - b) + \frac{\pi \lambda_\varepsilon \sigma |J|}{\varepsilon (\beta_2 - \alpha_2 - 2\delta)^2} (1 - a - b) \right] \\ &\geq^{(3)} \frac{\varepsilon}{\pi} (\beta_2 - \alpha_2 - 2\delta)^2 \left[\log(ab) + \log \left(\frac{\pi \lambda_\varepsilon \sigma |J|}{\varepsilon (\beta_2 - \alpha_2 - 2\delta)^2} \right) \right] \\ &\geq^{(4)} \frac{\varepsilon}{\pi} (\beta_2 - \alpha_2 - 2\delta)^2 [\log(ab) + \log \lambda_\varepsilon]. \quad \square \end{aligned}$$

3.7. Proof of Proposition 3.3

Let (ε_n) and (v_n) be sequences such that $\varepsilon_n \rightarrow 0$ and $G_{\varepsilon_n}^3(v_n, E) \leq C < \infty$ for all n . We want to show that there exists a subsequence $(v_k) = (v_{n_k})$ which converges to some $v \in BV(E, I_2)$ in the $L^1(E)$ norm and that $\liminf G_{\varepsilon_k}^3(v_k, E) \geq c_2 \mathcal{H}^0(Sv)$.

We begin assuming that the functions v_n are uniformly bounded. Then they are relatively compact in the weak* topology of $L^\infty(E)$. We may find a subsequence $(v_k) = (v_{n_k})$ so that the functions v_k weakly* converge to some $v \in L^\infty(E)$ and there exists a Young measure $x \mapsto \nu_x$ associated with (v_k) . Set $\lambda_k := \lambda_{\varepsilon_k}$.

Then we have that

$$v(x) = \int_{\mathbb{R}} t d\nu_x(t) \quad \text{for a.a. } x \in E. \quad (3.14)$$

Moreover (3.10) yields for every Borel subset $J \subset E$

$$\int_J W_2(v_k) \leq G_{\varepsilon_k}^3(v_k, J) / \lambda_k \leq C / \lambda_k \quad (3.15)$$

and since $\lambda_k \rightarrow \infty$ as $k \rightarrow \infty$, passing to the limit we get

$$\int_E \left(\int_{\mathbb{R}} W_2(t) d\nu_x(t) \right) dx = 0.$$

(2) By (3.13).

(3) Apply the inequality $-\log t + Mt \geq \log M$ with $M := \frac{\pi \lambda_\varepsilon \sigma |J|}{\varepsilon (\beta_2 - \alpha_2 - 2\delta)^2}$ and $t := 1 - a - b$.

(4) The hypothesis $\varepsilon \leq \frac{\pi \sigma |J|}{(\beta_2 - \alpha_2 - 2\delta)^2}$ yields $\frac{\pi \lambda_\varepsilon \sigma |J|}{\varepsilon (\beta_2 - \alpha_2 - 2\delta)^2} \geq \lambda_\varepsilon$.

Then $\int W_2(t) d\nu_x(t) = 0$ for almost all $x \in E$. Since $W_2(t) = 0$ if and only if $t \in I_2 = \{\alpha_2, \beta_2\}$ the probability measure ν_x is supported in I_2 for a.a. x : it exists a Borel function $\theta : E \rightarrow [0, 1]$ such that

$$\begin{aligned} \nu_x &= \theta(x) \cdot \delta_{\alpha_2} + (1 - \theta(x)) \cdot \delta_{\beta_2} \\ v(x) &= \alpha_2 \theta(x) + \beta_2 (1 - \theta(x)) \end{aligned} \quad \text{for a.a. } x \in E. \quad (3.16)$$

Now we claim that θ belongs to $BV(E, \{0, 1\})$: Let J be an interval in E , δ such that $0 < \delta < (\beta_2 - \alpha_2)/2$ and set, for every k , $a_k := a(J, \varepsilon_k, v_k)$ and $b_k := b(J, \varepsilon_k, v_k)$ (cf. (3.11)). By Lemma 3.6 we obtain that, for k large enough,

$$G_{\varepsilon_k}^3(v_k, J) \geq \frac{\varepsilon_k}{\pi} (\beta_2 - \alpha_2 - 2\delta)^2 [\log(a_k b_k) + \log \lambda_k]; \quad (3.17)$$

Furthermore, recalling (3.11) and (3.14), one readily checks that, when $k \rightarrow \infty$,

$$a_k \rightarrow a(J) := \frac{1}{|J|} \int_J \theta, \quad b_k \rightarrow b(J) := \frac{1}{|J|} \int_J (1 - \theta).$$

Assume $a(J)b(J) > 0$. Then, passing to the limit in (3.17), taking into account that $\varepsilon \log \lambda_\varepsilon \rightarrow K$ as $\varepsilon \rightarrow 0$ and that δ may be taken arbitrary small, we get

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_k}^3(v_k, J) \geq \frac{K}{\pi} (\beta_2 - \alpha_2)^2 = c_2. \quad (3.18)$$

Consider now the set S of all $x \in E$ such that the approximate limit of θ in x is neither 0 nor 1 (i.e. it belongs to $]0, 1[$ or does not exist). For every finite integer $m \leq \mathcal{H}^0(S)$ we can find pairwise disjoint open intervals J_i , $i = 1, \dots, m$, such that $J_i \cap S \neq \emptyset$. Then $a(J_i)b(J_i) > 0$ and (3.18) yields

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_k}^3(v_k, J_i) \geq c_2,$$

and since $G_\varepsilon^3(v, J)$ is super-additive on disjoint sets,

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_k}^3(v_k, E) \geq \sum_{i=1}^m \liminf_{k \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_k}^3(v_k, J_i) \geq m c_2 \quad (3.19)$$

Then S is finite because the first term in (3.19) is finite. Since θ has approximate limit equal to 0 or 1 outside the finite set S : θ belongs to $BV(E, \{0, 1\})$ and $S\theta = S$. The claim is proved.

Then, by (3.16), v belongs to $BV(E, I_2)$, $Sv = S$ and by taking $m = \mathcal{H}^0(S)$ in (3.19)

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_k}^3(v_k) \geq c_2 \mathcal{H}^0(S) = c_2 \mathcal{H}^0(Sv).$$

Eventually, ν_x in (3.16) is a Dirac mass for a.a. x . The strong convergence of v_k to v in L^1 follows. The proof is complete.

Finally, to relax the boundedness assumption on v_n , we follow the same way as in the proof of Proposition 3.1: we take positive real numbers c and r such that $W_2(t) \geq c|t| \vee W_2(r)$ for $t \geq r$ and $W_2(t) \geq c|t| \vee W_2(-r)$ for $t \leq -r$ and we set $v'_n := (v_n \vee -r) \wedge r$ for all n . These functions are uniformly bounded and one readily checks that $G_{\varepsilon_n}^3(v_n) \geq G_{\varepsilon_n}^3(v'_n)$ for all n . Moreover, using inequality (3.15) with $J := \{|u_n| \geq r\}$, we get that $\|v'_n - v_n\|_1 \rightarrow 0$ as $n \rightarrow \infty$. It is enough to apply Proposition 3.3 to the bounded sequence (v'_n) . \square

3.8. Proof of Proposition 3.2, Case $N=2$

We recall that D is the half-disk of radius r given by $\{x \in \mathbb{R}^2, |x| < r, x_2 > 0\}$ and E is the interval $\{x \in \mathbb{R}^2, |x_1| < r, x_2 = 0\}$; we identify E with the interval $] -r, r[$ (see fig. 1).

By the trace inequality given in the Appendix (Corollary 6.4), for every $u \in H^1(D)$ we get

$$\begin{aligned} G_\varepsilon^2(u) &= \varepsilon \int_D |Du|^2 + \lambda_\varepsilon \int_E W_2(Tu) \\ &\geq \frac{\varepsilon}{2\pi} \int_{E^2} \left| \frac{Tu(x') - Tu(x)}{x' - x} \right|^2 dx' dx + \lambda_\varepsilon \int_E W_2(Tu) = G_\varepsilon^3(Tu), \end{aligned}$$

where G_ε^3 is taken as in (3.4) with $E :=] -r, r[$. Then it is enough to apply Proposition 3.3. \square

3.9. Proof of Proposition 3.2, Case $N>2$

In the following we assume that the functions u_n are uniformly bounded; we can easily get rid of this assumption in the same way we did in the proofs of Propositions 3.1 and 3.3.

Our aim is to reduce to the case $N = 2$ by a slicing argument. Therefore we identify the subspace $\mathbb{R}^{N-1} \times \{0\}$ with \mathbb{R}^{N-1} and the set E with the ball of center 0 and radius r in \mathbb{R}^{N-1} ; we denote by ν the vector $(0, \dots, 0, 1) \in \mathbb{R}^N$ (see fig.1).

Claim 1: The sequence (Tu_n) is relatively compact in $L^1(E)$

We use a slicing technique. Let us fix a positive real number δ and a direction e in \mathbb{R}^{N-1} (i.e., $e \in \mathbb{R}^{N-1}$ and $|e| = 1$). Let M be the orthogonal complement of e in \mathbb{R}^{N-1} , E' the projection of E on M (i.e., the ball of radius r and center 0 in M). For all $y \in M$, let R^y be the straight line $y + \text{Span}\{e\}$ and E^y the interval $E \cap R^y$. Let P^y be the affine plane $y + \text{Span}\{e, \nu\}$ and D^y the 2-dimensional half-disk $D \cap P^y$.

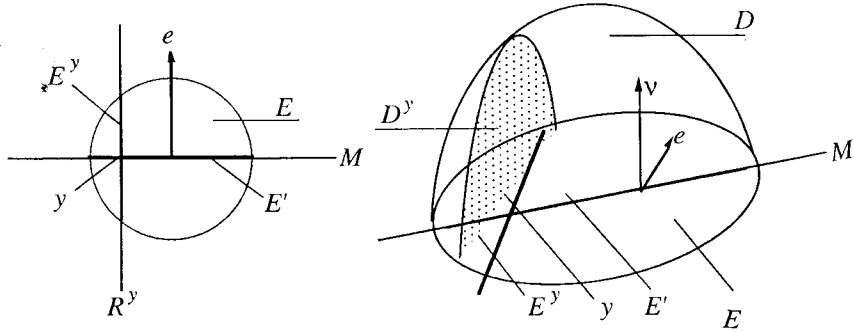


figure 1: slicing

Now, for every function $u \in H^1(D)$ and every $y \in E'$, set $u^y := u \lfloor D^y$: the function u^y belongs to $H^1(D^y)$ for a.a. y . Its trace on E^y agrees with $Tu \lfloor E^y$. Moreover, for every $\varepsilon > 0$ we have

$$\begin{aligned} G_\varepsilon^2(u) &= \varepsilon \int_D |Du|^2 + \lambda_\varepsilon \int_E W_2(Tu) \\ &\geq \varepsilon \int_D \left(\left| \frac{\partial u}{\partial v} \right|^2 + \left| \frac{\partial u}{\partial e} \right|^2 \right) + \lambda_\varepsilon \int_E W_2(Tu) \\ &= \int_{E'} \left[\varepsilon \int_{D^y} |Du^y|^2 + \lambda_\varepsilon \int_{E^y} W_2(Tu^y) \right] d\mathcal{H}^{N-2}(y) = \int_{E'} G_\varepsilon^{2,y}(u^y) d\mathcal{H}^{N-2}(y) \end{aligned}$$

where $G_\varepsilon^{2,y}$ is taken as in (3.4) with D^y instead of D and E^y instead of E . Since the sequence $G_{\varepsilon_n}^2(u_n)$ is bounded, there exists a constant C such that

$$C \geq G_{\varepsilon_n}^2(u_n) \geq \int_{E'} G_{\varepsilon_n}^{2,y}(u_n^y) d\mathcal{H}^{N-2}(y) \quad \forall n. \quad (3.20)$$

Let us define the following subsets:

$$B_n := \{y \in E' ; G_{\varepsilon_n}^{2,y}(u_n^y) > C/\delta\} \quad I^y := \{n \in \mathbb{N} ; y \notin B_n\} \quad \mathcal{F}_\delta^y := \{Tu_n^y ; n \in I^y\}$$

Clearly (3.20) implies that $|B_n| \leq \delta$ and that, for every $y \in E'$, $\sup\{G_{\varepsilon_n}^{2,y}(u_n^y) ; n \in I^y\} \leq C$. We can apply Proposition 3.2 already proved in the case $N = 2$ to infer the relative compactness in $L^1(E^y)$ of the family \mathcal{F}_δ^y . The direction e and δ being arbitrary, the conditions of Lemma 6.5 are fulfilled and the claim is proved.

Claim 2: Any cluster point of (Tu_n) belongs to $BV(E, I_2)$

Let $(Tu_k) = (Tu_{n_k})$ a subsequence which converges to some v in $L^1(E)$. In fact, by using Fubini's theorem and possibly passing to a subsequence, Tu_k^y converges to v^y in $L^1(E^y)$ for \mathcal{H}^{N-2} a.e. $y \in E'$ and

$$G_{\varepsilon_k}^2(u_k) = \int_{E'} G_{\varepsilon_k}^{2,y}(u_k^y) d\mathcal{H}^{N-2}(y).$$

By (3.20) and using Fatou's Lemma, we deduce:

$$C \geq \liminf_{k \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_k}^2(u_k) \geq \int_{E'} h(y) d\mathcal{H}^{N-2}(y), \quad (3.21)$$

where we set

$$h(y) := \liminf_k G_{\varepsilon_k}^{2,y}(u_k^y). \quad (3.22)$$

Thus $h(y)$ is finite \mathcal{H}^{N-2} a.e. on E' and we may apply to the sequence $G_{\varepsilon_k}^{2,y}$ the result already proved for $N = 2$: for every y such that $h(y) < \infty$, the function v^y belongs to $BV(E^y, I_2)$ and satisfies

$$h(y) \geq c_2 \mathcal{H}^0(Sv^y) = \frac{c_2}{\beta_2 - \alpha_2} \|Dv^y\|. \quad (3.23)$$

Consequently v takes values in I_2 a.e. on E . Moreover, the direction e being arbitrary, by a well-known characterization of functions with bounded variation (see for instance [EG], section 5.10), v belongs to $BV(E, I_2)$. The distributional derivative of v is a Radon measure Dv which satisfies: $\int_E |\langle e; Dv \rangle| = \int_E \|Dv^y\| d\mathcal{H}^{N-2}(y)$. Using (3.23), we can rewrite (3.21) as:

$$C \geq \liminf_{k \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_k}^2(u_k) \geq \frac{c_2}{\beta_2 - \alpha_2} \int_E |\langle e; Dv \rangle|. \quad (3.24)$$

Claim 3: $\liminf_{k \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_k}^2(u_k) \geq c_2 \mathcal{H}^{N-2}(Sv)$

Let us define for every function $u \in H^1(D)$ and every Borel set $B \subset \mathbb{R}^N$ the localized functionals:

$$G_\varepsilon^2(u, B) := \varepsilon \int_{D \cap B} |Du|^2 + \lambda_\varepsilon \int_{E \cap B} W_2(Tu).$$

Now we take directions e_1, \dots, e_m in \mathbb{R}^{N-1} , pairwise disjoint $(N-1)$ -dimensional open balls E_1, \dots, E_m included in E and we denote by B_i the N -dimensional open ball in \mathbb{R}^N with the same center and the same radius as E_i . The balls B_i are pairwise disjoint and for every i inequality (3.24) becomes

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_k}^2(u_k, B_i) \geq \frac{c_2}{\beta_2 - \alpha_2} \int_{E_i} |\langle e_i; Dv \rangle| \geq \frac{c_2}{\beta_2 - \alpha_2} \left| \int_{E_i} \langle e_i; Dv \rangle \right|.$$

Since $G_\varepsilon^2(u, B)$ is a measure with respect to B

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_k}^2(u_k) \geq \sum_{i=1}^m \liminf_{k \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_k}^2(u_k, B_i) \geq \frac{c_2}{\beta_2 - \alpha_2} \sum_{i=1}^m \left| \int_{E_i} \langle e_i; Dv \rangle \right|. \quad (3.25)$$

Now, it is enough to recall that for every \mathbb{R}^k valued Borel measure λ on the open set $\Omega \subset \mathbb{R}^h$, there holds

$$\|\lambda\| = \sup \sum_i |\langle e_i; \lambda(E_i) \rangle|$$

where the supremum is taken over all finite families of directions e_i in \mathbb{R}^k and pairwise disjoint open balls E_i included in Ω . Thus (3.25) yields

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_k}^2(u_k) \geq \frac{c_2}{\beta_2 - \alpha_2} \|Dv\| = c_2 \mathcal{H}^{N-1}(Sv),$$

which is our last claim. The proof of Proposition 3.2 is achieved. \square

Remark 3.10 In the proof of statements (i) and (ii) of Theorem 2.1, we shall use the following fact: if A is an open subset of \mathbb{R}^N and Ψ is a diffeomorphism which maps A into \mathbb{R}^N and satisfies $|D\Psi - I| \leq \delta$ everywhere, then $(1+\delta)|a-b| \geq |\Psi(a) - \Psi(b)| \geq (1-\delta)|a-b|$ for every $a, b \in A$. It follows immediately from the definition of Hausdorff measures that for every Borel set $B \subset A$

$$(1+\delta)^k \mathcal{H}^k(B) \geq \mathcal{H}^k(\Psi(B)) \geq (1-\delta)^k \mathcal{H}^k(B), \quad (3.26)$$

and for every positive Borel function f on \mathbb{R}^N

$$(1+\delta)^k \int_A f \circ \Psi d\mathcal{H}^k \geq \int_{\mathbb{R}^N} f d\mathcal{H}^k \geq (1-\delta)^k \int_A f \circ \Psi d\mathcal{H}^k. \quad (3.27)$$

3.11. Proof of statement (i) of Theorem 2.1

Let (ε_n) and $(u_n) \subset H^1(\Omega)$ so that $\varepsilon_n \rightarrow 0$ and $F_{\varepsilon_n}(u_n)$ is bounded. We have to prove that the sequence (u_n) is strongly relatively compact in $L^1(\Omega)$ and that all cluster points belong to $BV(\Omega, I_1)$ (Interior Compactness). Similarly, we have to prove that the sequence (Tu_n) is strongly relatively compact in $L^1(\partial\Omega)$ and that all cluster points belong to $BV(\partial\Omega, I_2)$ (Boundary Compactness).

Proof of Interior Compactness: this proof is immediate since, by definitions (3.1) and (3.2), we have $F_{\varepsilon_n}(u_n) = F_{\varepsilon_n}(u_n, \Omega) \geq G_{\varepsilon_n}^1(u_n, \Omega)$. It is enough to apply the statement (i) of Proposition 3.1. \square

Proof of Boundary Compactness: Let B be an open subset of \mathbb{R}^N such that $B \cap \partial\Omega \neq \emptyset$. Let Ψ be a bi-Lipschitz diffeomorphism mapping the $D := \{x \in \mathbb{R}^N : |x| < r, x_N > 0\}$ onto

$\Omega \cap B$, mapping the $(N-1)$ -dimensional ball $E := \{x \in \mathbb{R}^N : |x| < r, x_N = 0\}$ onto $\partial\Omega \cap B$ and satisfying $|D\Psi - I| \leq \delta$ for some $\delta < 1$.

We claim that the sequence (Tu_n) is strongly relatively compact in $L^1(\partial\Omega \cap B)$ and that every cluster points belongs to $BV(\partial\Omega \cap B, I_2)$. Since $\partial\Omega$ can be covered by finitely many open sets B of this kind, the boundary compactness will follow immediately. To prove the claim we remark that, for every $u \in H^1(\Omega)$, the function w defined by $w := u \circ \Psi$ belongs to $H^1(D)$ and

$$\begin{aligned} F_\varepsilon(u) &\geq \varepsilon \int_{\Omega \cap B} |Du|^2 + \lambda_\varepsilon \int_{\partial\Omega \cap B} W_2(Tu) \\ &\stackrel{(5)}{=} (1-\delta)^N \varepsilon \int_D |Du \circ \Psi|^2 + (1-\delta)^{N-1} \lambda_\varepsilon \int_E W_2(Tu \circ \Psi) \\ &\stackrel{(6)}{\geq} (1-\delta)^N \varepsilon \int_D |Dw|^2 |D\Psi|^{-2} + (1-\delta)^{N-1} \lambda_\varepsilon \int_E W_2(Tu \circ \Psi) \\ &\stackrel{(7)}{\geq} (1-\delta)^{N+2} \left[\varepsilon \int_D |Dw|^2 + \lambda_\varepsilon \int_E W_2(Tw) \right] = (1-\delta)^{N+2} G_\varepsilon^2(w) \end{aligned} \quad (3.28)$$

where G_ε^2 is taken as in (3.4). Hence, if we set $w_n := u_n \circ \Psi$ for all n , the sequence $G_{\varepsilon_n}^2(w_n)$ is bounded because $F_{\varepsilon_n}(u_n)$ is. The Proposition 3.2 applies: we may extract a subsequence $(w_k) = (w_{n_k})$ such that the traces Tw_k converge to some $v \in BV(E, I_2)$ in the $L^1(E)$ norm. This means that the traces Tu_k converge to $v \circ \Psi^{-1}$ in the $L^1(\partial\Omega \cap B)$ norm and $v \circ \Psi^{-1}$ belongs to $BV(\partial\Omega \cap B, I_2)$. \square

3.12. Proof of statement (ii) of Theorem 2.1

Let be given $u \in BV(\Omega, I_1)$, $v \in BV(\partial\Omega, I_2)$ and sequences (ε_n) and $(u_n) \subset H^1(\Omega)$ such that $\varepsilon_n \rightarrow 0$, $u_n \rightarrow u$, $Tu_n \rightarrow v$, and $F_{\varepsilon_n}(u_n)$ is bounded. We want to prove that $\liminf F_{\varepsilon_n}(u_n) \geq \Phi(u, v)$.

Let us fix some $\delta > 0$ and define the following open sets in \mathbb{R}^N :

A is an open set with smooth boundary in \mathbb{R}^N such that ∂A and $\partial\Omega$ are transversal and

$$\mathcal{H}^{N-2}(Sv \setminus A) \leq \delta, \quad \mathcal{H}^{N-1}((\partial\Omega \cup Sv) \cap \bar{A}) \leq \delta \quad (8) \quad (3.29)$$

$A' := \Omega \setminus \bar{A}$. Then $\partial A' = (\partial\Omega \setminus \bar{A}) \cup (\partial A \cap \Omega) \cup (\partial\Omega \cap \partial A)$. Since ∂A and $\partial\Omega$ are transversal, the boundary of A' is a C^2 manifold except for the \mathcal{H}^{N-1} negligible closed set $\partial\Omega \cap \partial A$. Since $\partial\Omega \cap \partial A' \subset \partial\Omega \cap \bar{A}$, by (3.29) we have:

$$\mathcal{H}^{N-1}(\partial\Omega \setminus \partial A') \leq \delta, \quad \mathcal{H}^{N-1}(Sv \setminus A') \leq \delta \quad (3.30)$$

(5) We apply inequality (3.27) in Remark 3.10

(6) Since $Dw = (Du \circ \Psi) D\Psi$, then $|Dw| \leq |Du \circ \Psi| \cdot |D\Psi|$.

(7) Since $|D\Psi - I| \leq \delta$, we obtain that $|D\Psi|^{-2} \geq (1+\delta)^{-2} \geq (1-\delta)^2$.

(8) Let $K \subset Sv$ a compact set such that $\mathcal{H}^{N-2}(Sv \setminus K) \leq \delta$. Hence $\mathcal{H}^{N-1}(K) = 0$ and then A may be any open neighbourhood of K such that $\mathcal{H}^{N-1}((\partial\Omega \cup Sv) \cap \bar{A}) \leq \delta$ and ∂A is smooth and transversal to $\partial\Omega$.

$\{B_i\}$ is a countable family of open balls in A chosen in the following way: we consider the family \mathcal{F} of all open balls B included in A such that $B \cap \partial\Omega \neq \emptyset$ and such that there exists a positive real number r and a diffeomorphism Ψ mapping the half-ball $D := \{x \in \mathbb{R}^N : |x| < r, x_N > 0\}$ onto $\Omega \cap B$, mapping the $(N-1)$ -dimensional ball $E := \{x \in \mathbb{R}^N : |x| < r, x_N = 0\}$ onto $\partial\Omega \cap B$ and satisfying

$$|D\psi - I| \leq \delta \quad \text{everywhere.}$$

One checks easily that for every $x \in \partial\Omega \cap A$ there exist balls $B \in \mathcal{F}$ with arbitrary small radius centered in x and satisfying $\mathcal{H}^{N-2}(Sv \cap \partial B) = 0$. Then we may apply Besicovitch Covering Lemma⁽⁹⁾ to extract countably many pairwise disjoint balls $B_i \in \mathcal{F}$ (with corresponding τ_i, Ψ_i, D_i, E_i) which cover \mathcal{H}^{N-2} almost all of $Sv \cap A$ and then (3.29) yields

$$\mathcal{H}^{N-2}(Sv \setminus \cup \bar{B}_i) \leq \delta. \quad (3.31)$$

Lower bound on B_i

Let us fix some i and define $w_n := \Psi_i \circ u_n$. Then its trace Tu_n on ∂D_i coincides with $\Psi_i \circ Tu_n$ on E_i , w_n tends to $u \circ \Psi_i$ in $L^1(D_i)$ and Tu_n tends to $v \circ \Psi_i$ in $L^1(E_i)$. Let us apply inequality (3.28):

$$F_{\varepsilon_n}(u_n, B_i) \geq (1-\delta)^{N+2} G_{\varepsilon_n}^{2,i}(w_n) \quad (3.32)$$

where $G_{\varepsilon_n}^{2,i}$ is taken as in (3.4) with $D := D_i$ and $E := E_i$. Recalling statement (ii) of Proposition 3.2, we obtain from (3.32) that

$$\begin{aligned} \liminf_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_n, B_i) &\geq (1-\delta)^{N+2} c_2 \mathcal{H}^{N-2}(S(v \circ \Psi_i)) \\ &\geq^{(10)} (1-\delta)^{N+2} (1+\delta)^{N-2} c_2 \mathcal{H}^{N-2}(Sv \cap B_i) \\ &\geq (1-\delta)^{2N} c_2 \mathcal{H}^{N-2}(Sv \cap B_i) \end{aligned} \quad (3.33)$$

Lower bound on A'

By (3.28), u_n tends to u in $L^1(A')$ and Tu_n tends to v in $L^1(\partial A' \cap \partial\Omega)$. We can apply the statement (iii) of Proposition 3.1 with $A := A'$ and $B := \partial A' \cap \partial\Omega$:

$$\begin{aligned} \liminf_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_n, A') &\geq \liminf_{n \rightarrow \infty} G_{\varepsilon_n}^1(u_n, A') \\ &\geq c_1 \mathcal{H}^{N-1}(Su \cap A') + \int_{\partial\Omega \cap \partial A'} |H(Tu) - H(v)| d\mathcal{H}^{N-1}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

⁽⁹⁾ Let λ be a finite positive Borel measure on \mathbb{R}^N and let \mathcal{F} be a family of open balls such that $\lambda(\partial B) = 0$ and for λ almost all x there exist balls in \mathcal{F} centered in x with arbitrary small radius; then there exist a countable disjoint subfamily of \mathcal{F} which cover λ almost all of \mathbb{R}^N . This version of Besicovitch Lemma may be deduced immediately by the usual one (see for instance [EG], section 1.5); in our case $\lambda = \mathcal{H}^{N-2} \llcorner (Sv \cap A)$.

⁽¹⁰⁾ recall (3.26) of Remark 3.10.

Global lower bound

Since $F_{\varepsilon_n}(u_n, \cdot)$ is a non-negative measure, we have that

$$F_{\varepsilon_n}(u_n) = F_{\varepsilon_n}(u_n, \bar{\Omega}) \geq F_{\varepsilon_n}(u_n, A') + \sum_i F_{\varepsilon_n}(u_n, B_i)$$

Hence, by (3.33) and (3.34):

$$\begin{aligned} \liminf_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_n) &\geq \liminf_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_n, A') + \sum_i \liminf_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_n, B_i) \\ &\geq c_1 \mathcal{H}^{N-1}(Su \cap A') + \int_{\partial\Omega \cap \partial A'} |H(Tu) - H(v)| d\mathcal{H}^{N-1} \\ &\quad + (1-\delta)^{2N} c_2 \sum_i \mathcal{H}^{N-2}(Sv \cap B_i) \end{aligned}$$

Eventually we take the limit as $\delta \rightarrow 0$, recalling (3.29) and (3.30)

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} F_{\varepsilon_n}(u_n) \geq c_1 \mathcal{H}^{N-1}(Su) + \int_{\partial\Omega} |H(Tu) - H(v)| + c_2 \mathcal{H}^{N-2}(Sv) = \Phi(u, v). \quad \square$$

4. The Upper Bound Inequality

The aim of this section is to prove statement (iii) of Theorem 2.1 and Theorem 2.4. First we recall that every function u in $BV(\Omega, I_1)$ may be approximated in $L^1(\Omega)$ by functions $u_n \in BV(\Omega, I_1)$ whose jump sets Su_n are smooth manifolds in Ω transversal to $\partial\Omega$ and so that $\mathcal{H}^{N-1}(Su_n)$ converge to $\mathcal{H}^{N-1}(Su)$ (that is, the total variation of u_n converges to the total variation of u). Similarly, every function v in $BV(\partial\Omega, I_2)$ may be approximated in $L^1(\partial\Omega)$ by functions $v_n \in BV(\partial\Omega, I_2)$ whose jump sets Sv_n are smooth manifolds in $\partial\Omega$ and so that $\mathcal{H}^{N-2}(Sv_n)$ converge to $\mathcal{H}^{N-2}(Sv)$.

By using a diagonalization argument, we can easily deduce the statement (iii) of Theorem 2.1 from the following proposition:

Proposition 4.1. *Let $u \in BV(\Omega, I_1)$ and $v \in BV(\partial\Omega, I_2)$ such that Su is a smooth manifold in Ω transversal to $\partial\Omega$ and Sv is a smooth $(N-2)$ -dimensional manifold in $\partial\Omega$. For every $\delta > 0, \varepsilon > 0$, it exist functions $u_\varepsilon \in H^1(\Omega)$ such that $u_\varepsilon \rightarrow u$ in $L^1(\Omega)$, $Tu_\varepsilon \rightarrow v$ in $L^1(\partial\Omega)$, and*

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon) \leq \Phi(u, v) + O(\delta). \quad (4.1)$$

Let us fix u, v and $\delta > 0$. For every $r > 0$, D_r is the half-disk $\{x \in \mathbb{R}^2; |x| < r, x_2 > 0\}$ and E_r is the segment $]-r, r[\times \{0\}$. We can extend the function u to the whole

\mathbb{R}^N , so that Su is still a bounded smooth manifold (without boundary in \mathbb{R}^N) transversal to $\partial\Omega$. We fix also a positive constant M so that

$$\sup \{ \delta + \sqrt{W_1(t)}, W_1(t), W_2(t) \} \leq M \quad \text{for } t \in [\alpha_1 \wedge \alpha_2, \beta_1 \vee \beta_2], \quad (4.2)$$

$$\frac{|s-t|}{\delta} \leq M \quad \text{for } s, t \in I_1 \cup I_2. \quad (4.3)$$

Since, Su and $\partial\Omega$ are transversal manifolds, we may find a constant $\eta \in]0, 1[$, so that for every $x \in Su$

$$\text{dist}(x, \partial\Omega) \geq \eta \text{dist}(x, Su \cap \partial\Omega). \quad (4.4)$$

The proof of Proposition 4.1 is organized as follows: we construct a partition \mathcal{P}_ε of Ω (section 4.5) and define the approximating functions u_ε on each element of the partition (section 4.6). To that aim we need to construct auxiliary functions of one or two variables (sections 4.2 and 4.3). Notice that our partition \mathcal{P}_ε is not fixed, but depends on ε . Of course, one has to check that the different definitions for u_ε agree on the intersection of the boundaries of the elements of \mathcal{P}_ε . In fine (section 4.7), we estimate the energies $F_\varepsilon(u_\varepsilon)$ in order to obtain (4.1).

4.2. Construction of the auxiliary functions g_{ab}

Let g be a (maximal) solution of the ordinary differential equation $g' = \delta + \sqrt{W_1(g)}$. It may be easily verified that g is defined on some interval I and is one-to-one from I to \mathbb{R} , with δ -Lipschitz inverse (the domain I of g is bounded or unbounded according to the behaviour of W_1 at infinity). Now, for every $a, b \in \mathbb{R}$, we set $c_{ab} := |g^{-1}(b) - g^{-1}(a)|$ and

$$g_{ab}(x) := \begin{cases} a & \text{if } x \leq 0, \\ g(x + g^{-1}(a)) & \text{if } x \in [0, c_{ab}] \text{ and } a < b, \\ g(g^{-1}(a) - x) & \text{if } x \in [0, c_{ab}] \text{ and } b < a, \\ b & \text{if } x \geq c_{ab}. \end{cases} \quad (4.5)$$

We may easily check that $c_{ba} \leq |b-a|\delta$, g_{ab} is an M -Lipschitz monotone function which satisfies $g'_{ab} = \delta + \sqrt{W_1(g_{ab})}$ in $]0, c_{ba}[$, and

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} [(g'_{ab})^2 + W_1(g_{ab})] &= \int_0^{c_{ba}} [g'_{ab}(\sqrt{W_1(g_{ab})} + \delta) + \sqrt{W_1(g_{ab})}(g'_{ab} - \delta)] \\ &= \int_0^{c_{ba}} [2\sqrt{W_1(g_{ab})}g'_{ab} + \delta^2] \\ &= 2|H(b) - H(a)| + c_{ba}\delta^2 \\ &\leq 2|H(b) - H(a)| + |b-a|\delta^3. \end{aligned} \quad (4.6)$$

4.3. Construction of the auxiliary functions h_ε

In $\mathbb{R} \times]0, \infty[$ we use polar coordinates by setting $x = (\rho \cos \theta, \rho \sin \theta)$ (with $0 < \theta \leq \pi$, $\rho \geq 0$), and we set

$$h_\varepsilon(x) := \begin{cases} \left(\alpha_2 \frac{\theta}{\pi} + \beta_2 \frac{\pi - \theta}{\pi} \right) \frac{\lambda_\varepsilon \rho}{\varepsilon} & \text{if } 0 \leq \rho < \varepsilon/\lambda_\varepsilon, \\ \left(\alpha_2 \frac{\theta}{\pi} + \beta_2 \frac{\pi - \theta}{\pi} \right) & \text{if } \varepsilon/\lambda_\varepsilon < \rho < \varepsilon. \end{cases} \quad (4.7)$$

Then $h_\varepsilon(t, 0) = \alpha_2$ when $-\varepsilon < t \leq -\varepsilon/\lambda_\varepsilon$ and $h_\varepsilon(t, 0) = \beta_2$ when $\varepsilon/\lambda_\varepsilon \leq t < \varepsilon$. Moreover the restriction of h_ε to the set of all x such that $|x| = \varepsilon$ is $(1/\varepsilon)$ -Lipschitz. We have the following estimate:

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\varepsilon \int_{D_\varepsilon} |Dh_\varepsilon|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_{D_\varepsilon} W_1(h_\varepsilon) + \lambda_\varepsilon \int_{E_\varepsilon} W_2(h_\varepsilon) \right] \leq c_2 \quad (4.8)$$

where c_2 is given by (2.3). Indeed

$$\frac{1}{\varepsilon} \int_{D_\varepsilon} W_1(h_\varepsilon) + \lambda_\varepsilon \int_{E_\varepsilon} W_2(h_\varepsilon) \leq \frac{1}{\varepsilon} M |D_\varepsilon| + \lambda_\varepsilon M |E_\varepsilon| = O(\varepsilon),$$

and we can estimate the gradient part by direct computation

$$\begin{aligned} \varepsilon \int_{D_\varepsilon} |Dh_\varepsilon|^2 &\leq O(\varepsilon) + \varepsilon \int_{D_\varepsilon \setminus D_{\varepsilon/\lambda_\varepsilon}} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial h_\varepsilon}{\partial \theta} \right)^2 \\ &\leq O(\varepsilon) + \varepsilon \int_{\varepsilon/\lambda_\varepsilon}^\varepsilon \left(\frac{\beta_2 - \alpha_2}{\pi \rho} \right)^2 \pi \rho d\rho \\ &= O(\varepsilon) + \frac{(\beta_2 - \alpha_2)^2}{\pi} \varepsilon \log \lambda_\varepsilon \rightarrow c_2. \end{aligned}$$

4.4. Construction of the tubular neighbourhoods of Su, Sv and $\partial\Omega$

Since Sv is a smooth manifold, we may find a positive constant r_0 and a bi-Lipschitz diffeomorphism Ψ_0 which maps $Sv \times D_{r_0}$ into $(Sv)_{r_0} \cap \Omega$ and $Sv \times E_{r_0}$ into $(Sv)_{r_0} \cap \partial\Omega$ (where $(Sv)_{r_0}$ is the set of all points $x \in \Omega$ such that $\text{dist}(x, Sv) < r_0$) and satisfies

$$\Psi_0(y, 0) = y, \quad D\Psi_0(y, 0) = I \quad \text{for every } y \in Sv. \quad (4.9)$$

Moreover we ask that $v(\Psi_0(y, t, 0)) = \alpha_2$ for $t < 0$ and $v(\Psi_0(y, t, 0)) = \beta_2$ for $t > 0$.

Since Su is a smooth manifold, we may find a positive constant r_1 and a bi-Lipschitz diffeomorphism Ψ_1 which maps $Su \times]-r_1, r_1[$ into the set $(Su)_{r_1}$ of all points $x \in \mathbb{R}^N$ such that $\text{dist}(x, Su) < r_1$ and satisfies

$$\Psi_1(y, 0) = y, \quad D\Psi_1(y, 0) = I \quad \text{for every } y \in Su. \quad (4.10)$$

Moreover we ask that $u(\Psi_1(x, t)) = \alpha_1$ for $t < 0$ and $u(\Psi_1(x, t)) = \beta_1$ for $t > 0$ ⁽¹⁾.

Since $\partial\Omega$ is a smooth manifold, we may find a positive constant r_2 and a bi-Lipschitz diffeomorphism Ψ_2 ⁽²⁾ which maps $\partial\Omega \times]0, r_2[$ into the set $(\partial\Omega)_{r_2}$ of all points $x \in \Omega$ such that $\text{dist}(x, Sv) < r_2$ and satisfies

$$\Psi_2(y, 0) = y, \quad D\Psi_2(y, 0) = I \quad \text{for every } y \in \partial\Omega. \quad (4.11)$$

In the following $r := r_0 \wedge r_1 \wedge r_2$ and m is a constant so that all the diffeomorphisms Ψ_i and their inverses are m -Lipschitz.

4.5. Construction of the partition \mathcal{P}_ε

Let us fix ε such that $0 < \varepsilon < \frac{r}{Mm}$ and define the following open sets (see fig. 2):

$$C_\varepsilon^0 := \Psi_0(Sv \times D_\varepsilon),$$

$$A_\varepsilon := \left\{ x \in \Omega \setminus C_\varepsilon^0 : \text{dist}(x, Sv \cup (Su \cap \partial\Omega)) < \frac{2Mm+1}{\eta} \varepsilon \right\},$$

$$\Omega_\varepsilon := \Omega \setminus (\overline{C_\varepsilon^0} \cup \overline{A_\varepsilon})$$

$$C_\varepsilon^1 := \Omega_\varepsilon \cap \Psi_1(Su \times]-M\varepsilon, M\varepsilon[),$$

$$C_\varepsilon^2 := \Omega_\varepsilon \cap \Psi_2(\partial\Omega \times]0, M\varepsilon[),$$

$$C_\varepsilon^3 := \Omega_\varepsilon \setminus (\overline{C_\varepsilon^1} \cup \overline{C_\varepsilon^2}).$$

Then we denote by \mathcal{P}_ε the collection $\{A_\varepsilon, C_\varepsilon^0, C_\varepsilon^1, C_\varepsilon^2, C_\varepsilon^3\}$.

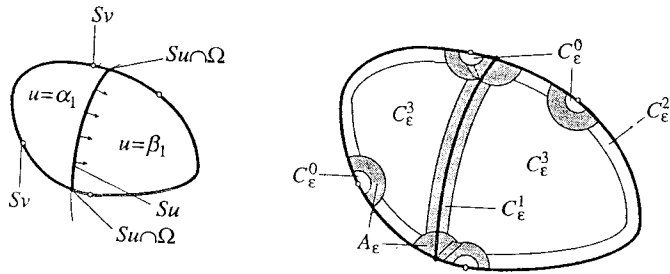


figure 2: asymptotic configuration and associated boundary layers

⁽¹⁾ If we see Su as the boundary of the set $\{u = \beta_1\}$ and we denote by ν the inner normal of Su , we may take $\Psi_1(y, t) := y + t\nu(y)$.

⁽²⁾ If ν is the inner normal of $\partial\Omega$, we may take $\Psi_2(y, t) := y + t\nu(y)$.

By construction, all sets in \mathcal{P}_ε are disjoint open sets whose closures cover $\overline{\Omega}$. As the diffeomorphisms Ψ_i are m -Lipschitz, inequality (4.4) and definition of A_ε , imply that these sets are disjoint (more precisely we have $\text{dist}(C_\varepsilon^0, \Omega_\varepsilon) \geq 2M\varepsilon$ and $\text{dist}(C_\varepsilon^1, C_\varepsilon^2) \geq \varepsilon$).

4.6. Construction of the function u_ε

We define u_ε separately on every element of the partition \mathcal{P}_ε . We write every $x \in \overline{C_\varepsilon^0}$ as $x = \Psi_0(y, t, s)$ with $y \in Sv$ and $(t, s) \in \overline{D_\varepsilon}$ (cf. the definition of C_ε^0) and then we set

$$u_\varepsilon(x) := h_\varepsilon(t, s) \quad \text{for every } x \in \overline{C_\varepsilon^0}, \quad (4.12)$$

where h_ε is taken as in (4.7). Then u_ε is a Lipschitz function on $\overline{C_\varepsilon^0}$ and the trace of u_ε on $\partial C_\varepsilon^0 \cap \overline{A_\varepsilon}$ is (m/ε) -Lipschitz. Moreover $u_\varepsilon = v$ for every $x \in \partial C_\varepsilon^0 \cap \partial\Omega$ except all x of the form $x = \Psi_0(y, t, 0)$ with $y \in Sv$ and $|t| < \varepsilon/\lambda_\varepsilon$. We write every $x \in \overline{C_\varepsilon^1}$ as $x = \Psi_1(y, t)$ with $y \in Su$ and $t \in]-M\varepsilon, M\varepsilon[$ (cf. the definition of C_ε^1) and then we set

$$u_\varepsilon(x) := g_{\alpha_1, \beta_1}(t/\varepsilon) \quad \text{for every } x \in \overline{C_\varepsilon^1}, \quad (4.13)$$

where g_{α_1, β_1} is taken as in (4.5). Since g_{α_1, β_1} is M -Lipschitz, u_ε is (Mm/ε) -Lipschitz on C_ε^1 and moreover $u_\varepsilon = u$ on $\partial C_\varepsilon^1 \cap \Omega_\varepsilon$.

Since $Su \cap \overline{C_\varepsilon^2} = \emptyset$ and $Sv \cap \overline{C_\varepsilon^2} = \emptyset$, for every connected component C of $\overline{C_\varepsilon^2}$, v is equal to some constant a on ∂C and u is equal to some constant b on C . We write every $x \in C$ as $x = \Psi_2(y, t)$ with $y \in \partial\Omega$ and $t \in]0, M\varepsilon[$ (cf. the definition of C_ε^2). Then we set

$$u_\varepsilon(x) := g_{ab}(t/\varepsilon) \quad \text{for every } x \in C. \quad (4.14)$$

Since g_{ab} is M -Lipschitz, then u_ε is (Mm/ε) -Lipschitz on each connected component C of $\overline{C_\varepsilon^2}$. Moreover $u_\varepsilon = u$ on $\partial C_\varepsilon^2 \cap \Omega_\varepsilon$ and $u_\varepsilon = v$ on $\partial C_\varepsilon^2 \cap \partial\Omega$.

Eventually we set

$$u_\varepsilon(x) := u(x) \quad \text{for every } x \in \overline{C_\varepsilon^3}, \quad (4.15)$$

$$u_\varepsilon(x) := v(x) \quad \text{for every } x \in \partial\Omega \setminus \overline{C_\varepsilon^0}. \quad (4.16)$$

So far, we have defined the function u_ε on $\overline{\Omega} \setminus A_\varepsilon$ and one readily checks that these definitions of u_ε agree on the intersections of the boundaries of the sets Ω and C_ε^i (actually one has to check only $\partial C_\varepsilon^1 \cap \partial C_\varepsilon^3$, $\partial C_\varepsilon^2 \cap \partial C_\varepsilon^3$ and $\partial\Omega \cap \partial C_\varepsilon^2$).

Moreover u_ε is a Lipschitz function such that $u_\varepsilon = v$ on $\partial\Omega$ except on the set $\Psi_0(Sv \times]-\varepsilon/\lambda_\varepsilon, \varepsilon/\lambda_\varepsilon[\times \{0\})$. Since the restriction of u_ε to ∂A_ε is (Mm/ε) -Lipschitz, we can extend u_ε on A_ε (i.e. to the whole $\overline{\Omega}$) by taking any (Mm/ε) -Lipschitz extension.

4.7. Upper estimate of $F_\varepsilon(u_\varepsilon)$

Let $F_\varepsilon(u, B)$ be the localized functional given in (3.1). The following estimates hold on C_ε^0 :

$$I_\varepsilon(u_\varepsilon, \overline{C_\varepsilon^0}) \leq^{(3)} \varepsilon \int_{\Psi_0(Sv \times D_\varepsilon)} |Du_\varepsilon|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_{\Psi_0(Sv \times D_\varepsilon)} W_1(u_\varepsilon) + \lambda_\varepsilon \int_{\Psi_0(Sv \times E_\varepsilon)} W_2(u_\varepsilon)$$

⁽³⁾ By definition of $\overline{C_\varepsilon^0}$.

$$=^{(4)} (1 + O(\varepsilon)) \mathcal{H}^{N-2}(Sv) \left[\varepsilon \int_{D_\varepsilon} |Dh_\varepsilon|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_{D_\varepsilon} W_1(h_\varepsilon) + \lambda_\varepsilon \int_{E_\varepsilon} W_2(h_\varepsilon) \right]$$

Hence by inequality (4.8)

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon, C_\varepsilon^0) \leq c_2 \mathcal{H}^{N-2}(Sv). \quad (4.17)$$

On C_ε^1 , we have the following estimate:

$$\begin{aligned} F_\varepsilon(u_\varepsilon, C_\varepsilon^1) &= \varepsilon \int_{C_\varepsilon^1} |Du_\varepsilon|^2 + \frac{1}{\varepsilon} \int_{C_\varepsilon^1} W_1(u_\varepsilon) \\ &\leq^{(5)} \int_{\Psi_1(Su \times [-M\varepsilon, M\varepsilon])} \left[\varepsilon |Du_\varepsilon|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W_1(u_\varepsilon) \right] \\ &\leq^{(6)} (1 + O(\varepsilon)) \mathcal{H}^{N-1}(Su) \int_{-M\varepsilon}^{M\varepsilon} \left[\varepsilon |g'_{\alpha_1 \beta_1}(t/\varepsilon)|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W_1(g_{\alpha_1 \beta_1}(t/\varepsilon)) \right] dt \\ &=^{(7)} (1 + O(\varepsilon)) \mathcal{H}^{N-1}(Su) \int_{\mathbb{R}} \left[|g'_{\alpha_1 \beta_1}(s)|^2 + W_1(g_{\alpha_1 \beta_1}(s)) \right] ds. \end{aligned}$$

Now by inequality (4.6)

$$\begin{aligned} \limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon, C_\varepsilon^1) &\leq (|H(\beta_1) - H(\alpha_1)| + |\beta_1 - \alpha_1| \delta^3) \mathcal{H}^{N-1}(Su) \\ &= (c_1 + O(\delta)) \mathcal{H}^{N-1}(Su). \end{aligned} \quad (4.18)$$

In a quite similar way we obtain

$$\limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon, C_\varepsilon^2) \leq c_1 \int_{\partial\Omega} |H(Tu) - H(v)| + O(\delta). \quad (4.19)$$

Moreover

$$F_\varepsilon(u_\varepsilon, C_\varepsilon^3) =^{(8)} 0, \quad (4.20)$$

$$F_\varepsilon(u_\varepsilon, A_\varepsilon) \leq^{(9)} \varepsilon \left(\frac{Mm}{\varepsilon} \right)^2 |A_\varepsilon| + \frac{1}{\varepsilon} M |A_\varepsilon| = O(\varepsilon), \quad (4.21)$$

(4) By (4.9) we obtain that $|D\Psi_0 - I| \leq O(\varepsilon)$ in $Sv \times D_\varepsilon$ and then we apply (3.27) and definition (4.12).

(5) By definition of C_ε^1 .

(6) By (4.10) we obtain that $|D\Psi_1 - I| \leq O(\varepsilon)$ in $Su \times [-M\varepsilon, M\varepsilon]$ and then we apply (3.27) and definition (4.13).

(7) We make the change of variable $s = t/\varepsilon$

(8) Recall that $u_\varepsilon = u$ on C_ε^3 and then u_ε is locally constant and takes values in I_1 .

(9) Because u_ε is (Mm/ε) -Lipschitz on A_ε .

$$F_\varepsilon(u_\varepsilon, \partial\Omega \setminus \partial C_\varepsilon^0) =^{(10)} 0. \quad (4.22)$$

Since $F_\varepsilon(u, B)$ is a measure with respect to B , one checks easily that

$$\begin{aligned} F_\varepsilon(u_\varepsilon) &= F_\varepsilon(u_\varepsilon, \bar{\Omega}) \\ &= F_\varepsilon(u_\varepsilon, \bar{C}_\varepsilon^0) + \sum_{i=1}^3 F_\varepsilon(u_\varepsilon, C_\varepsilon^i) + F_\varepsilon(u_\varepsilon, A_\varepsilon) + F_\varepsilon(u_\varepsilon, \partial\Omega \setminus \partial C_\varepsilon^0). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Passing to the limsup in (4.23) and taking into account (4.17 – 4.22) we get

$$\begin{aligned} \limsup_{\varepsilon \rightarrow 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon) &\leq c_1 \mathcal{H}^{N-1}(Su) + \int_{\partial\Omega} |H(Tu) - H(v)| + c_2 \mathcal{H}^{N-2}(Sv) + O(\delta) \\ &\leq \Phi(u, v) + O(\delta). \end{aligned}$$

The proof of Proposition 4.1 is complete. \square

4.8. Proof of Theorem 2.4

The inequality $F \leq F_0$ is trivial. To prove the opposite inequality, it is enough to show that, for every $(u, v) \in BV(\Omega, I_1) \times BV(\partial\Omega, I_2)$, we can find an approximating sequence (u_n) such that $u_n \rightarrow u$ in $L^1(\Omega)$, $Tu_n \rightarrow v$ in $L^1(\partial\Omega)$ and

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} F_0(u_n) \leq \Phi(u, v). \quad (4.24)$$

To that aim, we apply Lemma 6.6 with $\theta = p^{-1}(v)$ (where p is defined in (2.9)) to obtain an approximating sequence $(u_n) \subset BV(\Omega, I_1)$ such that $u_n \rightarrow u$ in $L^1(\Omega)$, $Tu_n = v$ for every n and

$$\mathcal{H}^{N-1}(Su_n) \rightarrow \mathcal{H}^{N-1}(Su) + \mathcal{H}^{N-1}(\{Tu \neq \theta\}).$$

We get

$$\begin{aligned} \limsup_{n \rightarrow \infty} F_0(u_n) &= \\ &= \limsup_{n \rightarrow \infty} \left\{ c_1 \mathcal{H}^{N-1}(Su_n) + c_2 \mathcal{H}^{N-2}(Sv) + \int_{\partial\Omega} |H(\theta) - H(v)| \right\} \\ &\leq c_1 \mathcal{H}^{N-1}(Su) + c_2 \mathcal{H}^{N-2}(Sv) + c_1 \mathcal{H}^{N-1}(\{Tu \neq \theta\}) + \int_{\partial\Omega} |H(\theta) - H(v)| \\ &=^{(11)} c_1 \mathcal{H}^{N-1}(Su) + c_2 \mathcal{H}^{N-2}(Sv) + \int_{\partial\Omega} \left[|H(Tu) - H(\theta)| + |H(\theta) - H(v)| \right] \end{aligned}$$

(10) Since $u_\varepsilon = v$ on $\partial\Omega \cap A_\varepsilon$, then u_ε takes values in I_2 .

(11) Since Tu and θ take values in I_1 , taking into account (2.2) we have that $c_1 \mathcal{H}^{N-1}(\{Tu \neq \theta\}) = \int_{\partial\Omega} |H(\theta) - H(v)|$.

$$=^{(12)} c_1 \mathcal{H}^{N-1}(Su) + c_2 \mathcal{H}^{N-2}(Sv) + \int_{\partial\Omega} |H(Tu) - H(v)| = \Phi(u, v) \quad (1)$$

5. Application to Capillary Equilibrium with Line Tension

Throughout this section, we keep all the notations defined in sections 1 and 2.

From a mechanical point of view, line tension is usually understood as a line density of energy concentrated on the contact line \mathcal{C} . Of course this makes sense only if \mathcal{C} is \mathcal{H}^{N-2} -rectifiable (i.e., Tu belongs to $BV(\partial\Omega, I_2)$). In that case the expected energy should take the form (1.3). To recover this form in our limit model, we must assume that \mathcal{C} coincides with \mathcal{L} which means that the infimum of $\Phi(u, \cdot)$ in (1.7) is achieved for some v such that $Sv = S(Tu)$. Let us assume in this section that

$$\alpha_2 < \alpha_1 < \beta_1 < \beta_2 \quad (5.1)$$

Then in an equilibrium configuration, \mathcal{L} and \mathcal{C} coincide if and only if $A_2 = \partial A_1 \cap \partial\Omega$. Indeed the other possible configuration $A_2 = \partial B_1 \cap \partial\Omega$ cannot be optimal since, due to (5.1), one of the configurations $A_2 = \partial A_1 \cap \partial\Omega$, $A_2 = \emptyset$, $A_2 = \partial\Omega$ has lower energy. Therefore the relation $v = p(Tu)$ holds (where p is defined by (2.9)).

When \mathcal{L} and \mathcal{C} coincide in an equilibrium configuration, the energy is F_0 defined by (2.10). Here it can be written in the geometric form:

$$F_0(u) = c_1 \mathcal{H}^{N-1}(\partial A_1 \cap \Omega) + \widehat{c}_1 \mathcal{H}^{N-1}(A_1 \cap \partial\Omega) + c_2 \mathcal{H}^{N-2}(\mathcal{C}) + d, \quad (5.2)$$

where $\widehat{c}_1 := |H(\alpha_2) - H(\alpha_1)| - |H(\beta_2) - H(\beta_1)|$ and $d := |H(\beta_2) - H(\beta_1)| \mathcal{H}^{N-1}(\partial\Omega)$.

In Theorem 2.4 we showed that the functional F defined by (2.6) is the relaxation (with respect to the $L^1(\Omega)$ strong topology) of F_0 . Therefore the problem

$$\min \{ F_0(v) : \int_{\Omega} v = m \}. \quad (5.3)$$

has the same infimum as problem (2.8) and every minimizer for (5.3) is also a minimizer for (2.8). Let us remark that, by the lower semicontinuity of F , (2.8) has always a solution. It is not the case for (5.3) (see examples in section 5.2).

5.1. Equilibrium conditions

Let us consider two phases A_1 and B_1 in equilibrium in a container Ω as partially drawn in fig. 3.

⁽¹²⁾ Since $\alpha_2 \leq \alpha_1 < \beta_1 \leq \beta_2$, $H(Tu) - H(\theta)$ and $H(\theta) - H(v)$ have the same sign.

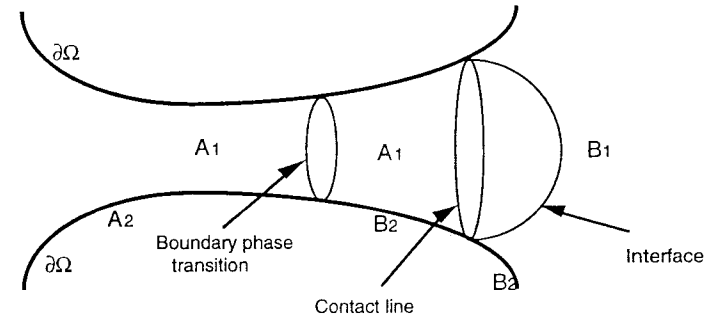


figure 3: example of equilibrium

Assuming everything smooth, we define φ on the \mathcal{L} as the angle between the outward normal to A_2 (tangent to $\partial\Omega$) and the principal normal to \mathcal{L} and we denote by \mathcal{K} the curvature of \mathcal{L} (see fig. 4). We want to write the conditions for equilibrium (i.e. a stationary point for the energy Φ). Two cases have to be considered:

Case 1: \mathcal{L} and \mathcal{C} do not coincide

In this case the equilibrium conditions read as

$$|H(\alpha_1) - H(\alpha_2)| - |H(\alpha_1) - H(\beta_2)| - c_2 \cos \varphi = 0 \quad \text{on } \mathcal{L}, \quad (5.4)$$

$$|H(\beta_1) - H(\beta_2)| - |H(\alpha_1) - H(\beta_2)| + c_1 \cos \theta = 0 \quad \text{on } \mathcal{C}. \quad (5.5)$$

These optimality conditions may be interpreted in term of forces as shown in fig. 4.

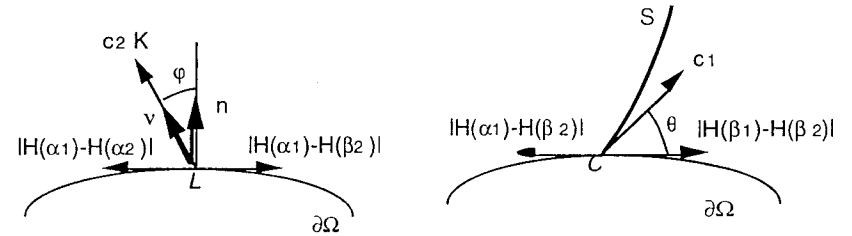


figure 4: equilibrium of forces

Equation (5.4) fixes the value of the contact angle θ . Then for a prescribed volume of the phase A_1 , the position of the interface is given. Equation (5.3) fixes the position of the curve \mathcal{L} through the purely geometrical quantities \mathcal{K} and φ . When \mathcal{C} and \mathcal{L} are disconnected the position of \mathcal{L} does not depend on the position of the interface.

Case 2: \mathcal{L} and \mathcal{C} coincide

In this case the equilibrium conditions read as

$$|H(\alpha_1) - H(\alpha_2)| - |H(\beta_1) - H(\beta_2)| - c_2 \mathcal{K} \cos \varphi - c_1 \cos \theta = 0 \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} c_2 \mathcal{K} \cos \varphi &\geq |H(\alpha_1) - H(\alpha_2)| - |H(\alpha_1) - H(\beta_2)| \\ c_2 \mathcal{K} \cos \varphi &\leq |H(\beta_1) - H(\alpha_2)| - |H(\beta_1) - H(\beta_2)| \end{aligned} \quad (5.7)$$

We remark that in the general case (i.e., without assuming that \mathcal{C} and \mathcal{L} are smooth), it is a difficult problem to write down explicitly conditions (5.4) – (5.7).

5.2. Example: a bubble growing in a cylinder

Let us consider a bubble (which corresponds to the phase A_1) of volume V in a cylinder Ω of radius R and assume that V is large enough for the bubble to reach the boundary (i.e., $V \geq 4\pi R^3/3$).

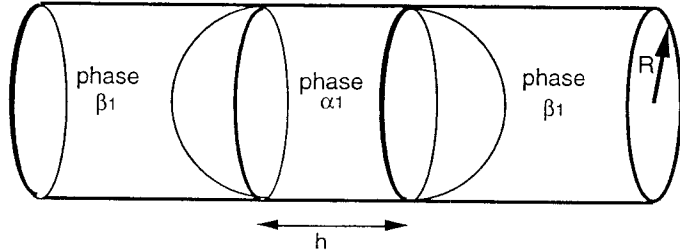


figure 5: a bubble growing in a cylinder

Let us show that the dissociation between the contact line \mathcal{C} and the surface phase transition \mathcal{L} occurs when V is small. We have two possible equilibrium configurations:

- (1) there is a unique boundary phase $B_2 = \partial\Omega$ (i.e. $v = \beta_2$),
- (2) the boundary phases A_2 and B_2 coincide with the volume phases A_1 and A_2 (i.e. $v = p(Tu)$).

In the first case the contact angle is

$$\theta_1 = \arccos \left(\frac{|H(\alpha_1) - H(\beta_2)| - |H(\beta_1) - H(\beta_2)|}{c_1} \right), \quad (5.8)$$

while in the second case the contact angle is

$$\theta_2 = \arccos \left(\frac{|H(\alpha_1) - H(\alpha_2)| - |H(\beta_1) - H(\beta_2)|}{c_1} \right) \quad (5.9)$$

(due to the geometry of the container the line tension does not appear in this formula since $\varphi = \pi/2$).

For small bubbles only the first configuration is less energetic. Indeed let us compute the corresponding energies in the very simple case $\alpha_1 = \alpha_2 < \beta_1 = \beta_2$. We get $\theta_1 = 0$, $\theta_2 = \pi/2$. The energy of the first configuration is given by $E_1 = (2\pi R h + 4\pi R^2)c_1$ where $h = V/(\pi R^2) - 4R/3$. Hence

$$E_1 = \frac{2c_1}{R}V + \frac{4\pi}{3}c_1R^2.$$

The energy of the second configuration is

$$E_2 = 2\pi R^2 c_1 + 4\pi R c_2.$$

Thus the first configuration is less energetic when

$$V \leq V_0 := \pi R^2 \left(\frac{2c_2}{c_1} + \frac{R}{3} \right).$$

In this case problem (5.3) has no solution. Our practical conclusion is the following: the contact angle of the increasing bubble jumps from θ_1 to θ_2 when the volume reaches the critical value V_0 . This example can be extended to a growing bubble on a plane boundary. The explicit computation is tedious in that case. The bubble first grows with a constant contact angle θ_1 given by (5.8) (and a unique boundary phase), then reaches a critical volume V_0 where conditions (5.7) hold. The contact angle suddenly changes. For a larger bubble the effect of line tension in the balance equation (5.6) decreases while the contact angle increases continuously up to θ_2 given by (5.9).

This example shows that capillary equilibrium with line tension cannot be studied forgetting boundary phases: it can happen that line tension is not supported by the geometrical contact line.

6. Appendix

We give here some results we used in the previous sections. We begin with a rearrangement result.

Let ϕ be a positive decreasing function on $]0, +\infty[$. For every couple of Borel sets A and B in \mathbb{R} , we set

$$\Psi(A, B) := \int_{A \times B} \phi(|x' - x|) dx' dx. \quad (6.1)$$

Now, for every $t, y \in \mathbb{R}$, we denote by $L_t(A)$ the interval $[t, t+a]$ and by $R_y(B)$ the interval $[y-b, y]$, where a and b are the measures of A and B respectively.

Proposition 6.1. *If $A \cup B \subset [t, y]$ and $A \cap B = \emptyset$, the following inequality holds:*

$$\Psi(A, B) \geq \Psi(L_t(A), R_y(B)). \quad (6.2)$$

Proof. We write $A \prec B$ if $\sup A \leq \inf B$. We remark that when $t \prec A \prec B \prec y$,

$$\Psi(A, B) \geq \Psi(L_t(A), B) \quad \text{and} \quad \Psi(A, B) \geq \Psi(A, R_y(B)). \quad (6.3)$$

Indeed, by setting $h(x) := t + \int_t^x 1_A(s) ds$, we have that $h(x) \leq x$ for all $x \geq t$, and then, taking into account that ϕ is decreasing

$$\begin{aligned} \Psi(A, B) &= \int_B \left[\int_t^{+\infty} \phi(x' - x) 1_A(x) dx \right] dx' \\ &\geq \int_B \left[\int_t^{+\infty} \phi(x' - h(x)) h'(x) dx \right] dx' \\ &= \int_B \left[\int_t^{t+A} \phi(x' - u) du \right] dx' = \Psi(L_t(A), B). \end{aligned}$$

This proves the first inequality in (6.3). The second one may be proved in the same way.

Now, let us prove the proposition when A and B are finite unions of closed intervals, i.e., $A = A_1 \cup A_2 \cup \dots \cup A_{n_A}$, $B = B_1 \cup B_2 \cup \dots \cup B_{n_B}$, where A_i and B_j are pairwise disjoint closed intervals in $[t, y]$. The proof is achieved by induction on the total number of intervals $n = n_A + n_B$.

When $n = 1$, either A or B is empty and the proposition is trivial. Now, let's assume the proposition true for n and let's prove it for $n + 1$.

Let be given A and B such that $n_A + n_B = n + 1$; with no loss in generality, we may suppose that A is non-empty and $A_1 \prec A_i$ for all $i > 1$ and $A_1 \prec B_j$ for all j and we set $c := |A_1|$ and $A' := A_2 \cup A_3 \cup \dots \cup A_{n_A}$. Then we may write $\Psi(A, B)$ as $\Psi(A_1, B) + \Psi(A', B)$, and since $t \prec A_1 \prec B \prec y$, inequalities (6.3) yield

$$\Psi(A_1, B) \geq \Psi(L_t(A_1), B) \geq \Psi(L_t(A_1), R_y(B))$$

moreover, $A', B \subset [t+c, y]$, $A' \cap B = \emptyset$ and $n_{A'} + n_B = n$, and then the inductive hypothesis yields

$$\Psi(A', B) \geq \Psi(L_{t+c}(A'), R_y(B)).$$

Hence

$$\Psi(A, B) \geq \Psi(L_t(A_1), R_y(B)) + \Psi(L_{t+c}(A'), R_y(B))$$

and (6.2) follows for A and B because $L_t(A_1) \cup L_{t+c}(A') = L_t(A)$.

Eventually we prove the proposition when A and B are (disjoint) compact sets by outer approximation with finite unions of closed intervals and when A and B are (disjoint) Borel sets by inner approximation with compact sets. \square

The next three statements are concerned with the best constant in some trace inequalities involving the L^2 norm of the gradient of a function and the $H^{1/2}$ norm of its trace on a line. The proofs are standard application of Fourier Transform techniques (cf. [N], chapter 2, section 5).

In the following, $u = u(x, y)$ is a real function on \mathbb{R}^2 , $v = v(x)$ denotes the trace of u on the line $\mathbb{R} \times \{0\}$, $\hat{u} = \hat{u}(\xi, \nu)$ denotes the Fourier Transform of u and $\hat{v} = \hat{v}(\xi)$ the Fourier Transform of v .

Lemma 6.2. *Let u be a function in $L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^2)$ such that Du belongs to L^2 . Then u belongs to $H^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^2)$ and the trace v of u on $\mathbb{R} \times \{0\}$ is a well-defined function in $L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R})$. Moreover*

$$\int_{\mathbb{R}^2} \left| \frac{v(x') - v(x)}{x' - x} \right|^2 dx' dx \leq \pi \int_{\mathbb{R}^2} |Du|^2 dx dy. \quad (6.4)$$

Proof. First we prove (6.4) when u is a smooth function with compact support by Fourier Transform:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^2} \left| \frac{v(x') - v(x)}{x' - x} \right|^2 dx' dx &= \int_{\mathbb{R}} \left[\int_{\mathbb{R}} |v(x+h) - v(x)|^2 dx \right] \frac{dh}{h^2} \\ &\stackrel{(1)}{=} \int_{\mathbb{R}} \left[\int_{\mathbb{R}} |\hat{v}(\xi)(e^{2\pi i h \xi} - 1)|^2 d\xi \right] \frac{dh}{h^2} \\ &= \int_{\mathbb{R}} \left[\int_{\mathbb{R}} \frac{2 - 2 \cos(2\pi h \xi)}{h^2} dh \right] |\hat{v}(\xi)|^2 d\xi \\ &\stackrel{(2)}{=} 4\pi^2 \int_{\mathbb{R}} |\hat{v}(\xi)|^2 |\xi| d\xi \end{aligned}$$

and taking into account that $\hat{v}(\xi) = \int_{\mathbb{R}} \hat{u}(\xi, \nu) d\nu$ for every ξ ,

$$\begin{aligned} &= 4\pi^2 \int_{\mathbb{R}} \left[\int_{\mathbb{R}} |\hat{u}(\xi, \nu)|^2 |\xi|^{1/2} d\nu \right]^2 d\xi \\ &= 4\pi^2 \int_{\mathbb{R}} \left[\int_{\mathbb{R}} \left(\hat{u}(\xi, \nu)(\xi^2 + \nu^2)^{1/2} \right) \left(\frac{|\xi|}{\xi^2 + \nu^2} \right)^{1/2} d\nu \right]^2 d\xi \\ &\leq^{(3)} 4\pi^2 \int_{\mathbb{R}} \left[\int_{\mathbb{R}} |\hat{u}|^2 (\xi^2 + \nu^2) d\nu \right] \left[\int_{\mathbb{R}} \frac{|\xi|}{\xi^2 + \nu^2} d\nu \right] d\xi \\ &\stackrel{(4)}{=} 4\pi^3 \int_{\mathbb{R}^2} |\hat{u}|^2 (\xi^2 + \nu^2) d\xi d\nu \\ &\stackrel{(5)}{=} \pi \int_{\mathbb{R}^2} |Du|^2 dx dy. \end{aligned}$$

Now we want to prove that inequality (6.4) holds for all functions in the Beppo-Levi space $X := \{u \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^2) : Du \in L^2\}$ ⁽⁶⁾.

First of all, we remark that (6.4) is stable under convergence in this space. Indeed, if a sequence (u_n) converge to u and satisfies (6.4) for all n , then $\int |Du_n|^2 \rightarrow \int |Du|^2$,

(1) Apply Plancherel Theorem, recalling that $\widehat{v_h}(\xi) = e^{2\pi i h \xi} \hat{v}(\xi)$.

(2) $\int_{\mathbb{R}} (2 - 2 \cos(2\pi h \xi)) h^{-2} dh = 4\pi |\xi| \int_{\mathbb{R}} (1 - \cos(t)) t^{-2} dt = 4\pi^2 |\xi|$ for all ξ .

(3) Apply Schwarz-Hölder inequality.

(4) $\int_{\mathbb{R}} |\xi| (\xi^2 + \nu^2)^{-1} d\nu = \pi$ for all $\xi \neq 0$.

(5) Apply Plancherel theorem, recalling that $\widehat{Du}(\xi, \nu) = 2\pi i \hat{u}(\xi, \nu) \cdot (\xi, \nu)$.

(6) X is endowed with the topology induced by the L^1_{loc} topology and the semi-norm $\|Du\|_2$; this is a Fréchet topology.

$u_n \rightarrow u$ in the H_{loc}^1 topology and then $v_n \rightarrow v$ in the L_{loc}^2 topology. Then, possibly passing to a suitable subsequence, v_n tends to v a.e. and by Fatou's Lemma we get

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^2} \left| \frac{v(x') - v(x)}{x' - x} \right|^2 dx' dx &\leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^2} \left| \frac{v_n(x') - v_n(x)}{x' - x} \right|^2 dx' dx \\ &\leq \pi \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^2} |Du_n|^2 = \pi \int_{\mathbb{R}^2} |Du|^2. \end{aligned}$$

Eventually, we want to prove that the space $\mathcal{D}(\mathbb{R}^2)$ of all smooth functions with compact support is dense in X . Since $\mathcal{D}(\mathbb{R}^2)$ is dense in $H^1(\mathbb{R}^2)$ and $X \cap L^\infty$ is dense in X ⁽⁷⁾, it is enough to prove that H^1 is dense in $X \cap L^\infty$ (with respect to the X topology).

For every bounded function u in X and every integer n , set $u_n(x) := g_n(x)u(x)$ where

$$g_n(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } |x| \leq n^{1/e}, \\ \log(\log n) - \log(\log |x|) & \text{if } n^{1/e} \leq |x| \leq n, \\ 0 & \text{if } n \leq |x|. \end{cases}$$

Each u_n belongs to H^1 , u_n tends to u in L_{loc}^1 , $Du_n = g_n Du + u Dg_n$. Moreover $g_n Du \rightarrow Du$ in L^2 and we claim that $u Dg_n \rightarrow 0$ in L^2 . Indeed,

$$\int |u Dg_n|^2 \leq \|u\|_\infty^2 \int |Dg_n|^2 = \|u\|_\infty^2 \frac{2\pi(e-1)}{\log n} \rightarrow 0$$

and so u_n tends to u in X . \square

Corollary 6.3. *Let A be the half-plane $\{(x, y) : y > 0\}$ and let u be a function in $L_{\text{loc}}^1(A)$ such that $Du \in L^2$. Then u belongs to $H_{\text{loc}}^1(A)$ and the trace v of u on $\mathbb{R} \times \{0\}$ is a well-defined function in $L_{\text{loc}}^2(\mathbb{R})$. Moreover*

$$\int_{\mathbb{R}^2} \left| \frac{v(x') - v(x)}{x' - x} \right|^2 dx' dx \leq 2\pi \int_A |Du|^2 dx dy. \quad (6.5)$$

Proof. Extend the function u to the whole \mathbb{R}^2 by reflection and then apply Lemma 6.2. \square

Corollary 6.4. *Let r be a positive real number, D the half-disk $\{(x, y) : x^2 + y^2 < r, y > 0\}$ and u a function in $H^1(\Omega)$. Then the trace v of u on the interval $E \times \{0\}$ (with $E =]-r, r[$) belongs to $H^{1/2}(E)$ and*

$$\int_{E^2} \left| \frac{v(x') - v(x)}{x' - x} \right|^2 dx dx' \leq 2\pi \int_D |Du|^2 dx dy. \quad (6.6)$$

⁽⁷⁾ Any $u \in X$ may be approximated by the truncated functions $u_n := (u \wedge n) \vee (-n)$.

Proof. First we extend the function u to the whole half-plane $A := \{(x, y) : y > 0\}$ by setting

$$\tilde{u}(z) = \begin{cases} u(z) & \text{if } |z| < r, \\ u(r^2/\bar{z}) & \text{if } |z| > r, \end{cases}$$

(we identify the point (x, y) with the complex number $z = x + iy$). Taking into account that $z \mapsto r^2/\bar{z}$ is a conformal mapping, we have $\int_{A \setminus D} |D\tilde{u}|^2 = \int_D |D\tilde{u}|^2 = \int_D |Du|^2$. Thus $D\tilde{u}$ belongs to L^2 and by Corollary 6.3 we get

$$\begin{aligned} 4\pi \int_D |Du|^2 &= 2\pi \int_A |D\tilde{u}|^2 \geq \int_{\mathbb{R}^2} \left| \frac{\tilde{v}(x') - \tilde{v}(x)}{x' - x} \right|^2 dx' dx \\ &\geq \int_{E^2} \left| \frac{\tilde{v}(x') - \tilde{v}(x)}{x' - x} \right|^2 dx' dx + \int_{(\mathbb{R} \setminus E)^2} \left| \frac{\tilde{v}(x') - \tilde{v}(x)}{x' - x} \right|^2 dx' dx \\ &= \int_{E^2} \left| \frac{v(x') - v(x)}{x' - x} \right|^2 dx' dx + \int_{E^2} \left| \frac{v(x') - v(x)}{r/x' - r/x} \right|^2 \frac{r^4}{(x')^2} dx' dx \\ &= 2 \int_{E^2} \left| \frac{v(x') - v(x)}{x' - x} \right|^2 dx' dx. \quad \square \end{aligned}$$

The next result of this appendix is a lemma which allow us to study the compactness in the L^1 norm of a family of functions on \mathbb{R}^h by checking the compactness of the traces of these functions on 1-dimensional affine subspaces.

Let A be an open bounded subset of \mathbb{R}^h , let e be a direction in \mathbb{R}^h (i.e. $e \in \mathbb{R}^h$, $|e| = 1$), M the orthogonal complement of e and A' the projection of A on M . For every $y \in M$, let R^y be the straight line $y + \text{Span}\{e\}$, $A^y := A \cap R^y$ and for every function v on A let $v^y := v \lfloor A^y$. Then the following statement holds:

Lemma 6.5. *Let \mathcal{F} be a family of uniformly bounded functions in $L^1(A)$ and let S be the set of all directions e which satisfy the following property:*

$$(P) \quad \begin{cases} \text{For every } \delta > 0 \text{ and for every } v \in \mathcal{F}, \text{ there exists a Borel set } B_v \subset M \\ \text{such that } \mathcal{H}^{h-1}(B_v) \leq \delta \text{ and such that for } \mathcal{H}^{h-1} \text{ a.a. } y \in A': \\ F_\delta^y := \{v^y, v \notin y\} \text{ is relatively compact in } L^1(A^y). \end{cases}$$

Then, if S spans \mathbb{R}^h , \mathcal{F} is relatively compact in $L^1(A)$.

Remark. This statement admits the following weaker version: let \mathcal{F} be a set of uniformly bounded functions in $L^1(A)$ and let S be set of all directions e such that for all $y \in A'$ the set $\mathcal{F}^y := \{v^y : v \in \mathcal{F}\}$ is relatively compact in $L^1(A^y)$. Then, if S spans \mathbb{R}^h , \mathcal{F} is relatively compact in $L^1(A)$.

Proof of Lemma 6.5:

With no loss in generality, we may assume that $|v| \leq 1$ for all $v \in \mathcal{F}$, $|A^y| \leq 1$ for all y and $|A'| \leq 1$. We extend each function v to 0 in $\mathbb{R}^h \setminus A$ and each function v^y to 0 in $\mathbb{R}^y \setminus A^y$. For all $y \in A'$, and all $t > 0$, set

$$\omega_\delta^y(t) := \sup \left\{ \int_{\mathbb{R}^y} |v^y(x + he) - v^y(x)| dx : v^y \in \mathcal{F}_\delta^y, h \in [-t, t] \right\}.$$

Since $|v^y| \leq 1$ for all $v \in F$, $\omega_\delta^y(t) \leq 2$ for all $t > 0$ and since \mathcal{F}_δ^y is relatively compact in $L^1(A^y)$, Fréchet-Kolmogorov Theorem yields that $\omega_\delta^y(t) \downarrow 0$ as $t \downarrow 0$. Then, for every $v \in \mathcal{F}$,

$$\int_{\mathbb{R}^d} |v^y(x+he) - v^y(x)| dx \leq \omega_\delta^y(|h|) \quad \forall h \in \mathbb{R}, y \in A' \setminus B_v.$$

Integrating with respect to y , we get

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} |v(x+he) - v(x)| dx &= \\ &= \int_M \left(\int_{\mathbb{R}^d} |v^y(x+he) - v^y(x)| dx \right) dy \\ &= \int_{B_v} (\dots) dy + \int_{A' \setminus B_v} (\dots) dy \\ &\leq \int_{B_v} 2|A^y| dy + \int_{A' \setminus B_v} \omega_\delta^y(|h|) dy \leq 2\delta + \int_{A'} \omega_\delta^y(|h|) dy. \end{aligned} \quad (6.7)$$

For every $\delta > 0$, $t > 0$, we set $\omega_\delta(t) := \int_{A'} \omega_\delta^y(t) dy$. Then $\omega_\delta \leq 2$ and $\omega_\delta(t) \downarrow 0$ as $t \downarrow 0$ because the same holds for all ω_δ^y (apply Dominated Convergence Theorem). Eventually, if we set for all $t > 0$

$$\omega(t) := \inf_{\delta > 0} (2\delta + \omega_\delta(t)),$$

ω is bounded, $\omega(t) \downarrow 0$ as $t \downarrow 0$ and by (6.7):

$$\int_{\mathbb{R}^d} |v(x+he) - v(x)| dx \leq \omega(|h|) \quad \forall h \in \mathbb{R}, v \in \mathcal{F}.$$

Now, if we take vectors e_1, \dots, e_d in S which span \mathbb{R}^d , we may apply Fréchet-Kolmogorov Theorem and we obtain that \mathcal{F} is relatively compact in $L^1(A)$. \square

The last result of this appendix is used in the proof of Theorem 2.4.

Lemma 6.6. *Let be given $u \in BV(\Omega)$ and $\theta \in L^1(\partial\Omega)$. Then there exists an approximating sequence $(u_n) \subset BV(\Omega)$ such that $u_n \rightarrow u$ in $L^1(\Omega)$, $Tu_n = \theta$ for every n and*

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \|Du_n\| \leq \|Du\| + \int_{\partial\Omega} |Tu - \theta|. \quad (6.8)$$

Moreover if u and θ takes values in $I := \{\alpha, \beta\}$, we may take the approximating sequence (u_n) in $BV(\Omega, I)$ and (6.8) becomes

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \mathcal{H}^{N-1}(Su_n) \leq \mathcal{H}^{N-1}(Su) + \mathcal{H}^{N-1}(\{Tu \neq \theta\}). \quad (6.9)$$

Proof. Using a well-known result by Gagliardo (see for instance [Gi]) we may find a sequence of smooth functions (v_n) such that $v_n \rightarrow 0$ everywhere in Ω , $Tv_n = \theta - Tu$ for every n and

$$\|Dv_n\| \rightarrow \int_{\partial\Omega} |Tu - \theta|.$$

Hence, if we set $u_n := u + v_n$ for every n , the sequence (u_n) satisfies the thesis.

Now, let $I := \{0, 1\}$ and assume that u and θ take values in the set I . We take a sequence (w_n) such that $w_n \rightarrow u$ in $L^1(\Omega)$, $Tw_n = \theta$ and (6.8) holds. Using a truncation argument it may be easily proved that we can assume $0 \leq w_n \leq 1$ everywhere.

For every n and every $t \in]0, 1[$, we denote by w_n^t the characteristic function of the sub-level $\{x \in \Omega : w_n(x) \geq t\}$. Then (possibly passing to a subsequence) $w_n^t \rightarrow u$ in $L^1(\Omega)$ and $Tw_n^t = \theta$ for almost every $t \in]0, 1[$ (we recall that both u and θ take values in I). By using coarea formula (see for instance [Gi]) and Fatou's lemma, we may write

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \|Du_n\| = \limsup_{n \rightarrow \infty} \int_0^1 \|Dw_n^t\| dt \geq \int_0^1 (\liminf_{n \rightarrow \infty} \|Dw_n^t\|) dt$$

so that (6.8) yields

$$\int_0^1 (\liminf_{n \rightarrow \infty} \|Dw_n^t\|) dt \leq \mathcal{H}^{N-1}(Su) + \mathcal{H}^{N-1}(\{Tu \neq \theta\}). \quad (6.10)$$

Now we choose $\hat{t} \in]0, 1[$ so that

$$\int_0^1 (\liminf_{n \rightarrow \infty} \|Dw_n^t\|) dt = \liminf_{n \rightarrow \infty} \|Dw_n^{\hat{t}}\| = \liminf_{n \rightarrow \infty} \mathcal{H}^{N-1}(Sw_n^{\hat{t}}).$$

Thus, as we know that $w_n^{\hat{t}} \rightarrow u$ in $L^1(\Omega)$, we deduce (6.9) from (6.10) by taking for (u_n) a suitable subsequence of $(w_n^{\hat{t}})$. \square

7. Acknowledgements: the research of the second author is part of the project EU-RHomogenization, contract SC1-CT91-0732 of the program SCIENCE of the commission of the European Communities and was partially conducted during a visit at the University of Trento, while the first author gratefully acknowledges the University of Toulon for the hospitality and support.

8. References.

- [ABS] G. Alberti, G. Bouchitté and P. Seppecher: Un résultat de perturbations singulières avec la norme $H^{1/2}$, *C. R. Acad. Sci. Paris*, **319**, Série I (1994) 333-338.
- [ABS2] G. Alberti, G. Bouchitté and P. Seppecher: Boundary effects in phase transitions, to appear on the proceedings of the meeting *Motion by Mean Curvature and Related Topics*, Leivico 1994.

- [BS] G. Bouchitté and P. Seppecher: Cahn and Hilliard fluid on an oscillating boundary, *Motion by Mean Curvature*, De Gruyter, New York 1994.
- [Ba] S. Baldo: Minimal interface criterion for phase transitions in mixtures of Cahn-Hilliard fluids, *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire* 7 (1990) 289-314
- [CH1] J.W. Cahn and J.E. Hilliard: Free energy of a non-uniform system I: interfacial energy, *J. Chem. Phys.* 28 (1958) 258-267.
- [CH2] J.W. Cahn and J.E. Hilliard: Free energy of a non-uniform system *J. Chem. Phys.* 31 (1959) 688-699.
- [DG] P.G. de Gennes: Wetting: statics and dynamics, *Rev. Modern Phys.* 57 (1985) 827-863.
- [DM] G. dal Maso: *An Introduction to Γ -convergence*, Progress in non linear diff.eq. and their app. Birkhauser, Boston 1993.
- [EG] L.C. Evans and R.F. Gariepy: *Measure Theory and Fine Properties of Functions*, Studies in Advanced Mathematics, CRC Press, Ann Arbor 1992.
- [F] R. Finn: *Equilibrium Capillary Surfaces*, Springer-Verlag, New Yor 1986.
- [Gi] E. Giusti: *Minimal Surfaces and Functions of Bounded Variation*, Monographs in Math.80, Birkhauser, Boston 1984.
- [Gu] M.E. Gurtin: On a theory of phase transitions with interfacial energy, *Arch. Rational Mech. Anal.* 87 (1984) 187-212.
- [M1] L. Modica: The gradient theory of phase transition and the minimal interface criterion, *Arch. Rational Mech. Anal.* 98 (1987) 123-142.
- [M2] L. Modica: Gradient theory of phase transitions with boundary contact energy, *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire* 5 (1987) 453-486.
- [MM] L. Modica and S. Mortola: Un esempio di Γ -convergenza, *Boll. Un. Mat. Ital.* (3) 14-A (1977) 526-529.
- [N] J. Necas: *Les méthodes directes en théorie des équations elliptiques*, Masson et Cie, Paris (1967).
- [RW] J.S.Rowlinson and B.Widom: *Molecular Theory of Capillarity*, Clarendon Press, Oxford(1984).
- [V] M. Valadier: Young measures, in *Methods of Non-convex Analysis* (A. Cellina ed.), Lect. Notes in Math. 1446, Springer Verlag, berlin 1990, 152-188.

4.4 Gouttes 1-D microscopiques

Dans ce paragraphe nous étudions un modèle asymptotique capable de modéliser des gouttes dont le rayon est très petit, comparable à L , l'épaisseur interfaciale. La question qui a motivé ce travail a déjà été abordée au paragraphe 3.3: quelle est l'influence de la taille de la goutte sur la tension superficielle ou plus précisément sur l'énergie de la goutte? L'article qui suit ne constitue qu'une réponse partielle: nous nous y limitons à la dimension 1. D'un point de vue physique cela correspond à l'énergie par unité de surface d'un film liquide plan. En théorie classique de la capillarité (quand l'épaisseur est beaucoup plus grande que L), cette énergie ne dépend pas de l'épaisseur du film: elle est toujours égale au double de la tension superficielle. L'objet de notre travail est d'estimer cette énergie pour de faibles épaisseurs en théorie de Cahn-Hilliard.

Dire qu'un intervalle Ω contient une petite goutte, est équivalent à dire que la densité de masse moyenne sur Ω est proche de la densité ρ_v de la phase vapeur:

$$\tilde{\rho}_d = \frac{M}{|\Omega|} - \rho_v \ll \rho_l - \rho_v. \quad (4.17)$$

Si l'on utilise l'adimensionnalisation décrite précédemment, la relation (4.17) s'écrit

$$m - \alpha_1 |\Omega| \ll 1.$$

Il nous faut donc considérer un problème avec une contrainte de masse m_ε tendant vers $\alpha_1 |\Omega|$ quand ε tend vers zéro. Ce comportement de m_ε peut être transféré artificiellement en un comportement de W_1 par le choix de $\tilde{\rho}_d$ à la place de ρ_d comme densité caractéristique. Dans les définitions (4.5), (4.6) remplaçons ρ_d par $\tilde{\rho}_d$, sauf dans la définition de u que nous remplaçons par $u = \frac{\rho - \rho_v}{\tilde{\rho}_d}$. Le problème variationnel s'écrit de nouveau sous la forme (4.7) avec une contrainte de masse $\int_\Omega u \, d\mathcal{H}^3 = |\Omega|$ ne contenant plus de petit paramètre. En contrepartie W_1 est une fonction qui s'annule en 0 et $\beta_1 = \frac{\rho_l - \rho_v}{\tilde{\rho}_d} \gg 1$. On a donc un problème asymptotique à deux paramètres $\varepsilon \rightarrow 0$ et $\beta_1 \rightarrow +\infty$. Considerer que ε tend vers 0 infiniment plus vite que β_1^{-1} revient à



utiliser le résultat de Modica et donc la théorie classique de capillarité: l'énergie de la goutte est alors le double de la tension superficielle. Dans l'article qui suit, qui n'est qu'une première approche, nous étudions le cas où β_1 tend vers l'infini infiniment plus vite que ε^{-1} en considérant une fonction W_1 indépendante de ε , ayant un puits en 0 et un puits à l'infini.

Nous traduisons l'idée de puits à l'infini par une hypothèse de dégénérescence $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{W_1(t)}{t} = 0$. Nous étudions les cas où $W_1(t) \sim ct^p$ pour $p < 1$. L'interprétation physique des différents comportements à l'infini de W_1 reste encore à élucider.

L'ordre de grandeur de l'énergie limite dépend de p , c'est pourquoi nous étudions une énergie rescalée par un facteur λ_ε dépendant de p :

$$\frac{1}{\lambda_\varepsilon} \int_{\Omega} (W_1(u(x)) + \varepsilon u^2(x)) \, dx \quad (4.18)$$

où $\lambda_\varepsilon = \varepsilon^{\inf(\frac{p-1}{p-4}, \frac{1}{2})}$ si $p \neq -2$, $\lambda_\varepsilon = \sqrt{\varepsilon} \log \varepsilon$ si $p = -2$.

Nous montrons qu'une suite u_ε d'énergie bornée ne peut converger que vers une mesure atomique, i.e. une somme de mesures de Dirac. L'énergie de chaque mesure de Dirac (i.e. de chaque goutte) est exprimée en fonction de W_1 et de la masse de la goutte. On ne retrouve le double de la tension superficielle que dans le cas où $\int_0^{+\infty} \sqrt{W_1(t)} \, dt$ est une intégrale convergente.

L'article qui suit a été soumis aux Comptes Rendus à l'Académie des Sciences (C.Dubs, G.Pouchitté and P.Seppecher, C.R.Acad.Sci., 1995).

Attention: Les notations de cet article diffèrent de celles utilisées dans l'introduction.

Transitions de phases avec un potentiel dégénéré à l'infini, application à l'équilibre de petites gouttes.

Guy Bouchitté, Christophe Dubs et Pierre Seppecher

Résumé- Dans le but de modéliser l'équilibre de gouttes de très petite taille, nous étudions le comportement limite des solutions lorsque ε tend vers 0 des problèmes de minimisation:

$$(P_\varepsilon) \quad \inf \left\{ \int_{\Omega} W(u(x)) + \varepsilon u^2(x) \, dx \quad ; \quad \int_{\Omega} u \, dx = M \right\}$$

où W est une fonction positive nulle seulement en un point $u_0 \in \mathbb{R}$ et telle que $\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{W(t)}{t} = 0$. La configuration limite fait apparaître une mesure atomique correspondant à une répartition de masse en gouttelettes.

Phase transition with a potential degenerated at infinity, application to droplets equilibrium.

Abstract- In order to modelize the equilibrium of very small drops, we study the asymptotic behaviour as ε tends to 0 of the minimizers of:

$$(P_\varepsilon) \quad \inf \left\{ \int_{\Omega} W(u(x)) + \varepsilon u^2(x) \, dx \quad ; \quad \int_{\Omega} u \, dx = M \right\}$$

The function W is non negative, vanishes only at $u_0 \in \mathbb{R}$ and satisfies $\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{W(t)}{t} = 0$. In the limit configuration, the mass distribution contains an atomic measure which corresponds to droplets.

Abridged english version - Let u_0 and $M > 0$ be two real numbers, Ω a compact subset of \mathbb{R} and W a fonction on \mathbb{R} satisfying the assumptions:

(H1) $W \geq 0$, $W(u) = 0 \iff u = u_0$,

(H2) W is continuous on $[u_0, +\infty[$, $W = +\infty$ on $] -\infty, u_0[$,

(H3) $\exists p < 1$, $\exists c > 0$, such that $\lim_{t \rightarrow +\infty} W(t) \cdot t^{-p} = c$,

(H4) W is increasing on $[u_0, u_1]$ ($u_1 > u_0$) and $\lim_{u \rightarrow u_0^+} \frac{W(u)}{u - u_0} > 0$.

We study the asymptotic behaviour as ε tends to 0 of the minimization problems:

$$(P_\varepsilon) \quad \inf \left\{ \int_{\Omega} W(u(x)) + \varepsilon u^2(x) \, dx \quad ; \quad \int_{\Omega} u(x) \, dx = M \right\}.$$

In this note, we show that the value of $\inf P_\varepsilon$ behaves like λ_ε defined by $\lambda_\varepsilon = \varepsilon^\gamma$ with $\gamma = \inf(\frac{p-1}{p-4}, \frac{1}{2})$ if $p \neq -2$ and $\lambda_\varepsilon = \varepsilon^{1/2} \log \varepsilon$ if $p = -2$ and we identify the limit of the rescaled energies:

$$F_\varepsilon(u) = \begin{cases} \frac{1}{\lambda_\varepsilon} \int_{\Omega} W(u(x)) + \varepsilon u^2(x) \, dx & \text{if } u \in H^1(\Omega) \\ +\infty & \text{else.} \end{cases}$$

This problem is close to the classical problem solved by Modica (Modica, 1987) where the function W is a two-wells function (in this case $\gamma = 1/2$). In our case, the degenerated behaviour of W at infinity ($\lim_{t \rightarrow \infty} t^{-1}W(t) = 0$) replaces the second well. The limit problem still exhibits two "phases": a "vapour phase" represented by the measure $u_0 \, dx$ and a "liquid phase" represented by a purely atomic measure $\mu = \sum m_i \delta_{x_i}$. In part 3, we show how this problem arises from the mechanical study of very small (one-dimensional) drops. In this model a drop of mass m located at x is represented

by the measure $m\delta_x$. We show that the contribution of such a drop to the total energy depends on the mass at the position through the function f defined by:

$$f(x, m) = 2^{2\gamma} k(m)^{1-2\gamma} \text{ if } x \notin \partial\Omega, \quad f(x, m) = k(m)^{1-2\gamma} \text{ if } x \in \partial\Omega$$

where k is a scalar depending on the shape of W :

$$k = k_p := \begin{cases} 2 \int_{u_0}^{+\infty} \sqrt{W(s)} ds & \text{if } p < -2, \\ (1 - 2\gamma) c^{1-\gamma} \left(\frac{2}{1-p} \int_0^{+\infty} (t^2 + 1)^{-\frac{5-2p}{2-2p}} dt \right)^{2\gamma} & \text{if } p \in] -2, 1[, \\ \sqrt{c}/3 & \text{if } p = -2. \end{cases}$$

More precisely, F being defined by (5), our convergence result is the following:

Theorem : *Under the assumptions (H1)-(H4) we have :*

(i) *For every measure μ in $\mathcal{M}(\Omega)$, for every sequence (u_ϵ) tending to μ in $\mathcal{M}(\Omega)$ weak*, we have*

$$\liminf_{\epsilon \rightarrow 0} F_\epsilon(u_\epsilon) \geq F(\mu).$$

(ii) *For every μ in $\mathcal{M}(\Omega)$ there exists a sequence (u_ϵ) such that*

$$u_\epsilon \rightharpoonup \mu \text{ in } \mathcal{M}(\Omega) \text{ weak*} \quad \text{and} \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} F_\epsilon(u_\epsilon) = F(\mu),$$

moreover we can choose this sequence such that $\int_\Omega u_\epsilon dx = \mu(\Omega)$.

To obtain the lowerbound (i) for the energy, we prove that the energy on almost every interval can be estimated by imposing, in addition, Dirichlet conditions on its boundary (Lemma 1). This estimate is given by Lemma 2. Then an argument of concentration-compactness for measures implies that the limit liquid mass distribution is purely atomic. The explicit construction of an approximating sequence gives the upperbound (ii) for the energy.

1. INTRODUCTION ET ENONCE DU RESULTAT - Soit deux réels u_0 et $M > 0$,

Ω un intervalle compact de \mathbb{R} et W une fonction sur \mathbb{R} vérifiant les hypothèses:

(H1) $W \geq 0, W(u) = 0 \iff u = u_0,$

(H2) W est continue sur $[u_0, +\infty[, W = +\infty$ sur $] -\infty, u_0[$,

(H3) $\exists p < 1, \exists c > 0$, tel que $\lim_{t \rightarrow +\infty} W(t).t^{-p} = c$,

(H4) W est croissante sur un intervalle $[u_0, u_1]$ ($u_1 > u_0$) et $\lim_{u \rightarrow u_0^+} \frac{W(u)}{u - u_0} > 0$.

On étudie le comportement limite quand ϵ tend vers 0 des problèmes de minimisation:

$$(\mathcal{P}_\epsilon) \quad \inf \left\{ \int_\Omega W(u(x)) + \epsilon u'^2(x) dx, \int_\Omega u dx = M \right\}$$

Dans cette note nous montrons que la valeur de $\inf \mathcal{P}_\epsilon$ se comporte comme

$$(1) \quad \lambda_\epsilon = \begin{cases} \epsilon^\gamma \text{ avec } \gamma = \inf \left(\frac{p-1}{p-4}, \frac{1}{2} \right) & \text{si } p \neq -2 \\ \epsilon^{1/2} \log \epsilon & \text{si } p = -2. \end{cases}$$

Nous identifions la limite des énergies rescalées:

$$(2) \quad F_\epsilon(u) = \begin{cases} \frac{1}{\lambda_\epsilon} \int_\Omega W(u(x)) + \epsilon u'^2(x) dx & \text{si } u \in H^1(\Omega) \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ce problème est voisin du problème classique traité par Modica (Modica, 1987) dans lequel la fonction W est une fonction à deux puits (dans ce cas $\gamma = 1/2$). Dans notre cas c'est la dégénérescence de W à l'infini ($\lim_{t \rightarrow \infty} t^{-1}W(t) = 0$) qui joue le rôle du deuxième puits. Le problème limite fait encore apparaître deux "phases", la répartition de la masse étant, pour l'une, la mesure de densité u_0 par rapport à la mesure de Lebesgue, pour l'autre, une mesure purement atomique $\mu = \sum m_i \delta_{x_i}$. La partie 3 montre comment ce problème dérive de l'étude mécanique de gouttes (unidimensionnelles) de taille très petite ce qui conduit à appeler "goutte" chacune des mesures $m_i \delta_{x_i}$. Nous montrons que la contribution d'une goutte $m\delta_x$ à l'énergie du système dépend en général de sa masse m et de sa position x . Cette contribution est égale à $f(x, m)$ défini par:

$$(3) \quad f(x, m) = 2^{2\gamma} k(m)^{1-2\gamma} \text{ si } x \notin \partial\Omega, \quad f(x, m) = k(m)^{1-2\gamma} \text{ si } x \in \partial\Omega$$

où k est un scalaire dépendant de la forme de la fonction W :

$$(4) \quad k = k_p := \begin{cases} 2 \int_{u_0}^{+\infty} \sqrt{W(s)} ds & \text{si } p < -2, \\ (1 - 2\gamma) c^{1-\gamma} \left(\frac{2}{1-p} \int_0^{+\infty} (t^2 + 1)^{-\frac{5-2p}{2-2p}} dt \right)^{2\gamma} & \text{si } p \in] -2, 1[, \\ \sqrt{c}/3 & \text{si } p = -2. \end{cases}$$

Plus précisément, définissons F par:

$$(5) \quad F(\mu) = \begin{cases} \sum_{i=1}^n f(x_i, m_i) & \text{si } \mu = u_0 dx + \sum_{i=1}^n m_i \delta_{x_i}, m_i > 0 (x_i \text{ distincts}), \\ +\infty & \text{si } \mu \text{ n'est pas de la forme ci-dessus.} \end{cases}$$

Theorème : *Sous les hypothèses (H1)-(H4) on a :*

(i) *Pour toute mesure μ de $\mathcal{M}(\Omega)$, pour toute suite (u_ϵ) tendant vers μ dans $\mathcal{M}(\Omega)$ *faible, on a*

$$\liminf_{\epsilon \rightarrow 0} F_\epsilon(u_\epsilon) \geq F(\mu).$$

(ii) *Pour tout μ dans $\mathcal{M}(\Omega)$ il existe une suite (u_ϵ) telle que*

$$u_\epsilon \rightharpoonup \mu \text{ dans } \mathcal{M}(\Omega) \text{ *faible} \quad \text{et} \quad \lim_{\epsilon \rightarrow 0} F_\epsilon(u_\epsilon) = F(\mu),$$

on peut de plus imposer à cette suite de vérifier la contrainte $\int_\Omega u_\epsilon dx = \mu(\Omega)$.

Remarque: - La relative compacité faible d'une suite u_ϵ est assurée lorsque celle-ci vérifie la contrainte de masse $\int_\Omega u_\epsilon dx = M$ (comme dans le problème (\mathcal{P}_ϵ)). On en déduit immédiatement qu'il existe C tel que $\inf \mathcal{P}_\epsilon \sim C\lambda_\epsilon$. En effet, d'après le théorème, toute solution u_ϵ du problème \mathcal{P}_ϵ converge (à une suite extraite près) vers une mesure μ de la forme $u_0 dx + \sum_{i=1}^n m_i \delta_{x_i}$, qui minimise $F(\mu)$ sous la contrainte

$\sum_{i=1}^n m_i = M - u_0|\Omega|$. La sous aditivité de $f(x, \cdot)$ montre que $\mu - u_0 dx$ est une unique masse de Dirac (située sur le bord de Ω).

- En l'absence de contrainte intégrale, la relative compacité des suites u_ϵ ne peut se déduire (excepté dans le cas $p \geq 0$) du simple fait que $\sup F_\epsilon(u_\epsilon) < +\infty$.

- Le théorème peut être appliqué à d'autres problèmes de minimisation du même type que \mathcal{P}_ϵ , par exemple: $\inf\{\int_\Omega [W(|u'|) + \epsilon u''^2 + |u - g|^2] dx ; u \in H^2(\Omega)\}$ (dont la limite fait apparaître la fonctionnelle de Mumford et Shah (Munfor, 1989) introduite dans les problèmes de segmentation d'images).

2. PREUVE DU THEOREME - Soit (u_ϵ) une suite vérifiant $\sup F_\epsilon(u_\epsilon) < +\infty$ et convergeant $*$ -faiblement vers une mesure μ . Il est facile de déduire des hypothèses (H1) et (H2) qu'il existe une sous-suite de u_ϵ (encore notée u_ϵ) telle que $u_\epsilon \rightarrow u_0$ Lebesgue p.p. Dorénavant, nous supposons sans perte de généralité que $u_0 = 0$. On définit les fonctionnelles localisées en posant pour toute fonction v de $H^1(\mathbb{R})$, pour tout intervalle I , $F_\epsilon(v, I) = \epsilon^{-\gamma} \int_I W(v) + \epsilon v'^2 dx$. On cherche à estimer la limite inférieure de $F_\epsilon(\cdot, I)$ pour tout intervalle I . Le lemme 1 montre que, pour la plupart des intervalles, cette limite ne varie pas si l'on impose de plus à la suite u_ϵ de vérifier $u_\epsilon = 0$ sur ∂I . On peut alors minorer $F_\epsilon(u_\epsilon, I)$ par l'infimum d'un problème de Dirichlet dont le calcul précis est donné par le Lemme 2.

Lemme 1 : Soit un intervalle $I \not\subseteq \Omega$ tel que $u_\epsilon \rightarrow 0$ sur $\partial I \setminus \partial\Omega$. Alors il existe un intervalle $I_\delta \supset I$ et une suite (u_ϵ^0) définie sur I_δ vérifiant :

(i) $u_\epsilon^0 = 0$ sur ∂I_δ , $u_\epsilon^0 = u$ sur I , $\int_{I_\delta \setminus I} u_\epsilon^0 dx \rightarrow 0$.

(ii) $\liminf_{\epsilon \rightarrow 0} F_\epsilon(u_\epsilon^0, I_\delta \cap \Omega) = \liminf_{\epsilon \rightarrow 0} F_\epsilon(u_\epsilon, I)$

(iii) Dans le cas où I rencontre le bord de Ω , on peut imposer de plus à u_ϵ^0 d'être symétrique par rapport au point d'intersection de I avec Ω .

Preuve : Dans le cas où $\partial I \cap \partial\Omega = \emptyset$, on prolonge de manière affine la fonction u_ϵ en dehors de I jusqu'à ce qu'elle atteigne la valeur 0 sur une distance adaptée pour que $F_\epsilon(u_\epsilon^0, I_\delta \setminus I)$ tende vers 0 lorsque $\epsilon \rightarrow 0$. Dans le cas où $\partial I \cap \partial\Omega \neq \emptyset$, on prolonge u_ϵ par réflexion et on se ramène au cas précédent. \square

Lemme 2 : Soit $a \in \mathbb{R}^+$, (m_ϵ) une suite de réels positifs tendant vers $m > 0$. On note $\mathcal{K}_\epsilon = \{v \in H^1(\mathbb{R}) : v(\pm a) = 0, \int_{-a}^a v(x) dx = m_\epsilon\}$. Alors le problème $\inf\{F_\epsilon(v, [-a, a]) ; v \in \mathcal{K}_\epsilon\}$ admet une solution \bar{v}_ϵ paire croissante sur $[-a, 0]$. De plus, k étant défini par (4):

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} F_\epsilon(\bar{v}_\epsilon, [-a, a]) = 2^{2\gamma} k(m)^{1-2\gamma}.$$

Preuve : L'existence d'une solution paire croissante sur $[-a, 0]$ se déduit d'un argument de réarrangement (Mossino, 1984). Pour l'estimation de l'énergie minimale, on limite donc notre étude à $[-a, 0]$. Nous supposons¹ qu'il existe b tel que $W(u) = c \cdot u^p$ pour $u > b$. L'intégration de l'équation d'Euler $W'(\bar{v}_\epsilon) - 2\epsilon \bar{v}_\epsilon'' = C_\epsilon$, vérifiée sur l'intervalle ouvert $\{\bar{v}_\epsilon > 0\}$, conduit à:

$$(6) \quad \epsilon (\bar{v}_\epsilon'(x))^2 = W(\bar{v}_\epsilon(x)) - C_\epsilon \bar{v}_\epsilon(x) - D_\epsilon, \quad \forall x \in [-a, 0] \cap \{\bar{v}_\epsilon > 0\}$$

¹ La généralisation à une fonction quelconque vérifiant (H3) est obtenue en construisant pour tout encadrement $c_1 < c < c_2$, un encadrement $W_1 < W < W_2$ tel que $W_i(t)/t = c_i$ pour t suffisamment grand.

où C_ϵ est le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte m_ϵ et D_ϵ est une constante d'intégration. La croissance de \bar{v}_ϵ exclut en fait une discontinuité de \bar{v}_ϵ' sur la frontière du support $[-\ell_\epsilon, 0]$ de \bar{v}_ϵ . Ainsi l'équation (6) est satisfaite sur tout l'intervalle $[-a, 0]$. En particulier, en $-a$, on obtient $D_\epsilon \leq 0$. Par ailleurs, la convergence p.p. vers 0 de \bar{v}_ϵ entraîne que \bar{v}_ϵ converge faiblement vers $m\delta_0$, que $b_\epsilon := \bar{v}_\epsilon(0)$ tend vers l'infini (avec $\bar{v}_\epsilon'(0) = 0$). De l'équation (6) on déduit que la longueur ℓ_ϵ du support de \bar{v}_ϵ vérifie $\ell_\epsilon = |\{\bar{v}_\epsilon \geq \alpha\}| + \sqrt{\epsilon} \int_0^\alpha (W(u) - C_\epsilon u - D_\epsilon)^{-1/2} du$ pour tout α positif. Le premier terme tend vers 0. D_ϵ étant négatif, le second peut être majoré par l'intégrale $\int_0^\alpha \sqrt{\epsilon} (W(u) - C'_\epsilon u)^{-1/2} du$ (où $C'_\epsilon = b_\epsilon^{-1} W(b_\epsilon) \rightarrow 0$) qui tend vers 0 du fait que l'intégrale de $W^{-1/2}$ est convergente en 0 (cf. (H4)). Comme ℓ_ϵ tend vers 0, $\bar{v}_\epsilon'(-a) = 0$ et donc $D_\epsilon = 0$ pour ϵ suffisamment petit. En réutilisant (6), on obtient $C_\epsilon = b_\epsilon^{-1} W(b_\epsilon) \rightarrow 0$ et les égalités suivantes:

$$(7) \quad m_\epsilon = 2 \sqrt{\epsilon} \int_0^{b_\epsilon} \frac{u}{\sqrt{W(u) - C_\epsilon u}} du,$$

$$(8) \quad I_\epsilon := 2F_\epsilon(\bar{v}_\epsilon, [-a, 0]) = 2\epsilon^{\frac{1}{2}-\gamma} \int_0^{b_\epsilon} \frac{2W(u) - C_\epsilon u}{\sqrt{W(u) - C_\epsilon u}} du.$$

Lorsque $p < -2$ ($\gamma = 1/2$) l'intégrale $\int_0^{+\infty} \sqrt{W(s)} ds$ est convergente. Dans la décomposition $I_\epsilon = 2 \int_0^{b_\epsilon} (W(u) - C_\epsilon u)^{1/2} du + \int_0^{b_\epsilon} C_\epsilon u (W(u) - C_\epsilon u)^{-1/2} du$, le premier terme converge vers $k = 2 \int_0^{+\infty} \sqrt{W(s)} ds$ et le deuxième, dû au comportement de W à l'infini, tend vers zéro. De ce fait la limite de I_ϵ est indépendante de m . Dans le cas où $-2 < p < 1$, comme $\gamma < 1/2$, les intégrales I_ϵ et m_ϵ sont équivalentes aux contributions sur l'intervalle $[b_\epsilon, b_\epsilon]$. En posant $t_b = (C_\epsilon^{-1} c b_\epsilon^{p-1} - 1)^{1/2}$ et le changement de variable $t = (C_\epsilon^{-1} c u^{p-1} - 1)^{1/2}$ on obtient:

$$F_\epsilon(\bar{v}_\epsilon) \sim 2 c^{\frac{3}{4-p}} \frac{2+p}{4-p} \left(\frac{2}{1-p} \int_0^{t_b} (t^2 + 1)^{-\frac{5-2p}{2p-2}} dt \right)^{\frac{2p-2}{p-4}} (m_\epsilon/2)^{\frac{p+2}{4-p}} + 2 \epsilon^{\frac{5}{2}} \left(\frac{p+2}{4-p} \right) c^{\frac{3}{4-p}} \frac{4}{4-p} \frac{t_b}{(t_b^2 + 1)^{\frac{3}{2-2p}}} \left(\frac{2}{1-p} \int_0^{t_b} (t^2 + 1)^{-\frac{5-2p}{2p-2}} dt \right)^{\frac{p+2}{4-p}} (m_\epsilon/2)^{\frac{p+2}{4-p}}.$$

t_b tendant vers l'infini, le résultat est obtenu par passage à la limite $\epsilon \rightarrow 0$. \square

Fin de la preuve du théorème. Quitte à extraire une sous suite on peut supposer que $\liminf F_\epsilon(u_\epsilon) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} F_\epsilon(u_\epsilon) < +\infty$ et que la suite $f_\epsilon := \epsilon^{-\gamma} [W(u_\epsilon) + \epsilon u_\epsilon'^2]$, bornée dans $L^1(\Omega)$, converge $*$ -faiblement vers une mesure de Radon ν . Comme u_ϵ converge vers 0 sauf sur un ensemble Δ de mesure de Lebesgue nulle, on peut appliquer les lemmes 1 et 2 à tout intervalle I tel que $\partial I \cap \Delta = \emptyset$. En se restreignant de plus à des intervalles dont le bord n'est chargé ni par μ ni par ν , on obtient:

$$(9) \quad \nu(I) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_I f_\epsilon(t) dt \geq c(\mu(I))^{1-2\gamma} \text{ avec } c = \begin{cases} k 2^{2\gamma} & \text{si } I \cap \partial\Omega = \emptyset \\ k & \text{si } I \cap \partial\Omega \neq \emptyset \end{cases}$$

L'inégalité (9) s'étend à tout Borélien B par approximation: $\nu(B) \geq c(\mu(B))^{1-2\gamma}$. Du fait que $0 < 1 - 2\gamma < 1$ on peut appliquer l'argument de concentration des mesures dû à P.L.Lions (cf. Evans, 1989): ν est une combinaison de masses de Dirac. L'inégalité (9) donne alors immédiatement la minoration de l'assertion (i). Soit maintenant μ une

mesure de Radon de la forme $\sum_{i=1}^n m_i \delta_{x_i}$ et (I_i) des intervalles deux à deux disjoints centrés sur les points x_i . La suite (u_ε) égale sur chaque I_i à la fonction \bar{v}_ε définie dans le lemme 2 (et nulle en dehors) vérifie la proposition (ii) du théorème. \square

3. ORIGINE MECANIQUE DU PROBLEME - L'étude de l'équilibre diphasique d'une masse M de fluide confiné dans un domaine borné $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ et d'énergie libre volumique W correspond au problème variationnel (P_ε) . La fonction W est continue, positive et s'annule seulement en deux valeurs α et β correspondant aux deux phases. Ce modèle de fluide (dit de Cahn-Hilliard (Cahn, 1959)) possède sa propre longueur caractéristique (l'épaisseur de la couche de transition), en général beaucoup plus petite que la taille de Ω . Dans le problème adimensionnel, ε apparaît comme un petit paramètre caractéristique du rapport entre ces deux longueurs. Si l'on cherche à étudier le comportement de petites gouttes dans un grand domaine, la densité moyenne $\rho_m = \frac{1}{|\Omega|} \int_\Omega \rho \, dv$ est proche de α . Le rapport $\eta = \frac{\rho_m - \alpha}{\beta - \alpha}$ introduit un nouveau petit paramètre. Le choix de $\rho_m - \alpha$ comme densité caractéristique nous amène à considérer des fonctions W dont le deuxième puits est η^{-1} qui tend vers l'infini. Cette note constitue une première étape dans l'étude de ce problème à deux paramètres: nous considérons une fonction W dont le deuxième puits est directement porté à l'infini (hypothèses (H1)-(H4)).

Références

- J.MOSSINO, Inégalités isopérimétriques et applications en physique, *Hermann* (1984).
 L.MODICA, The gradient theory of phase transitions and the minimal interface criterium, *Arch. Rational Mech. Anal.*, 98, (1987), pp.123-142.
 J.W.CAHN and J.E.HILLIARD, Free energy of a non-uniform system, *J. Chem. Phys.* 31, 3, (1959), pp.688-699.
 D.MUMFORD and J.SHAH, Optimal approximation by piecewise smooth functions and associated variational problems, *Comm. Pure Appl. Math.*, XLII, (1989), pp.577.
 L.EVANS Weak convergence methods for non linear partial differential equations, *CBMS*, N.74 (1989).

G.B.,C.D.,P.S.: Laboratoire d'Analyse Non Linéaire Appliquée,
 Université de Toulon et du Var, 83957 La Garde Cedex, France.

Chapitre 5

Digression

5.1 Relaxation et non localité

L'article présenté dans cette partie n'est pas directement lié aux fluides de Cahn-Hilliard. Il est né d'une réflexion sur l'apparition de la non localité dans les modèles variationnels. La question posée était de comprendre quand et comment la non localité apparaissait lors du calcul de la Γ -limite d'une suite de fonctionnelles locales ou plus simplement lors du calcul de la relaxée d'une fonctionnelle locale¹. Nous avons vu un exemple de ces situations dans le paragraphe 4.3 où la relaxée d'une fonctionnelle locale (l'énergie capillaire avec tension de ligne (4.11)) est une fonctionnelle non locale. De plus cette fonctionnelle non locale est la Γ -limite d'une suite d'énergies de Cahn-Hilliard (qui sont, bien évidemment, des énergies locales).

Raisonnons sur un exemple très simple pour lequel le même phénomène se produit. Considérons une couronne plane Ω conductrice de la chaleur associée à un fil conducteur S sur son diamètre $[AD]$ (cf. figure 5.1).

Un problème thermique dans ce système est lié à la minimisation

¹Précisons que nous disons qu'une fonctionnelle F dans un domaine Ω est locale si et seulement si il existe une fonctionnelle "localisée" $\bar{F}(u, A)$ définie pour tout ouvert A telle que i) $\bar{F}(u, \cdot)$ soit la restriction aux ouverts d'une mesure de Borel ii) $\bar{F}(u, \Omega) = F(u)$ et iii) $\bar{F}(u, A) = \bar{F}(v, A)$ dès que $u = v$ sur A

de la fonctionnelle

$$F(u) = \int_{\Omega} (\nabla u)^2 d\mathcal{H}^2 + \int_S \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 d\mathcal{H}^1 \quad (5.1)$$

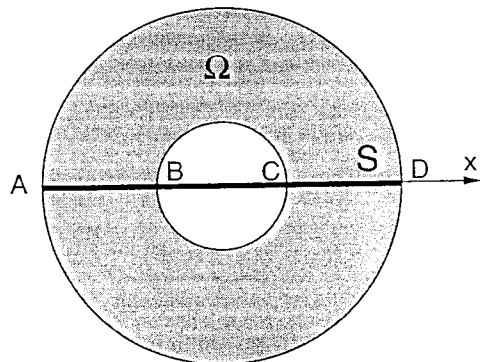


Figure 5.1 Un problème simple de conduction de la chaleur
La relaxée dans $L^2(\Omega)$ de F est

$$\mathcal{F}(u) = \inf \left\{ \int_{\Omega} (\nabla u)^2 d\mathcal{H}^2 + \int_{[AD]} \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2 d\mathcal{H}^1 ; \right. \\ \left. u|_{[BC]} \in H^1([BC]), v = u \text{ sur } [AB] \cup [CD] \right\}. \quad (5.2)$$

Ce problème se résout trivialement en v et on a:

$$\mathcal{F}(u)^* = \int_{\Omega} (\nabla u)^2 d\mathcal{H}^2 + \int_{[AB] \cup [CD]} \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 d\mathcal{H}^1 + \frac{(u(B) - u(C))^2}{\|[BC]\|}. \quad (5.3)$$

Cette dernière fonctionnelle est non locale. L'apparition de la non localité ressemble beaucoup à ce qui se produit lors de la relaxation de l'énergie capillaire avec tension de ligne. Mais sur cet exemple, le

phénomène est très clair: d'un point de vue intuitif le problème thermique est local et c'est la disparition "artificielle" de la trace de u sur le segment $[BC]$ qui est responsable de la non localité. Cette disparition est due au choix "artificiel" de la topologie de $L^2(\Omega)$. Remarquons que si l'on avait choisit la topologie de $L^2(S)$ on aurait trouvé une fonctionnelle relaxée tout à fait différente (non locale elle aussi). L'apparition de la non localité semble être, de manière générale, la conséquence d'un choix non adapté des espaces fonctionnels.

La question qui se pose naturellement après ces remarques est celle de l'identification des espaces fonctionnels adaptés à traiter les problèmes de relaxation du type précédent et la détermination des énergies relaxées dans ces espaces. C'est l'objet de l'article qui suit dans lequel nous considérons des fonctionnelles du type $F(u) = \int f(x, Du) d\mu$, μ étant une mesure de Borel finie, $f(\cdot, z)$ une fonction μ -mesurable et $f(x, \cdot)$ une fonction convexe de croissance d'ordre p ($c_1|z|^p \leq f(x, z) \leq c_2(1 + |z|^p)$). En pratique μ est la mesure portée par une variété de dimension k plongée dans \mathbb{R}^n ($k \leq n$) ou plus généralement par une réunion de telles variétés. La possibilité que ces variétés soient de dimensions différentes permet de traiter le problème des jonctions.

Après avoir défini de manière générale, l'espace vectoriel tangent en un point à une mesure, $T_{\mu}^p(x)$, nous définissons le gradient tangentiel $D_{\mu}u$ d'une fonction régulière u , en effectuant la projection orthogonale sur $T_{\mu}^p(x)$ du gradient usuel. Nous définissons alors la norme $\|u\|_{1,p,\mu} = \|u\|_{L^p_{\mu}} + \|D_{\mu}u\|_{L^p_{\mu}}$. L'espace de Sobolev adapté à notre problème variationnel, $W_{\mu}^{1,p}$, sera défini comme le complété de $\mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$ pour cette norme. Nous montrons que la relaxée de F dans cet espace est la fonctionnelle locale

$$\bar{F}(u) = \int f_{\mu}(x, D_{\mu}u) d\mu \quad (5.4)$$

où

$$f_{\mu}(x, z) = \inf \left\{ f(x, z + \xi) : \xi \in (T_{\mu}^p(x))^{\perp} \right\} \quad (5.5)$$

Le lien avec la relaxée habituelle dans $L^p(\Omega)$, \mathcal{F} , (Ω contenant le support de μ) est donné par la relation suivante

$$\mathcal{F}(u) = \inf \left\{ \bar{F}(v) : v \in W_{\mu}^{1,p}, v = u \text{ p.p. sur } \Omega \right\}, \quad (5.6)$$

fonctionnelle en général non locale.

L'article qui suit a été publié sous la référence: "*Energies with respect to a measure and applications to low dimensional structures*, G. Buttazzo, G. Bouchitté, P. Seppecher, à paraître dans *Calcovar*".

Energies with Respect to a Measure and Applications to Low Dimensional Structures

Guy BOUCHITTE

Giuseppe BUTTAZZO

Pierre SEPPECHER

Département de Mathématiques
Université de Toulon et du Var
BP 132
83957 LA GARDE Cedex
(FRANCE)

Dipartimento di Matematica
Università di Pisa
Via Buonarroti, 2
56127 PISA
(ITALY)

Département de Mathématiques
Université de Toulon et du Var
BP 132
83957 LA GARDE Cedex
(FRANCE)

Abstract. We consider functionals of the form

$$F(u) = \int f(x, Du) d\mu \quad (u \in \mathcal{D}(\mathbf{R}^n))$$

where μ is a finite Borel measure on \mathbf{R}^n , and their relaxation \bar{F} with respect to weak convergence we characterize in a suitable Sobolev space $W_{\mu}^{1,p}$. Applications to low dimensional structures and junctions are given.

1. Introduction

The problem of finding variational models for low dimensional elastic structures has been widely considered in the literature (see, for instance, the classical books of Landau and Lifchitz [10], and Love [12]). More recently, the justification of some classical models has been obtained via Γ -convergence (see, for instance, Acerbi, Buttazzo and Percivale [1],[2], Percivale [15]), or via asymptotic development of solutions (see, for instance, Ciarlet [7], Ciarlet and Destuynder [8], Le Dret and Raoult [11]); this method consists in fattening the structure S into a n -dimensional ($n = 3$ in the applications) one, S_{ε} , having ε as a thickness parameter, and then in passing to the limit as $\varepsilon \rightarrow 0$, obtaining in this way the description of the limit problem.

Here we adopt another, more intrinsic, point of view which consists in describing the structure by means of a measure μ on \mathbf{R}^n ; the energy functional will be initially defined by

$$F(u) = \int f(x, Du) d\mu \quad (u \in C^1(\mathbf{R}^n; \mathbf{R}^m))$$

where f is the n -dimensional energy density integrand. The low dimensional elastic model will be simply obtained by a suitable relaxation \bar{F} of the functional F ; this will give

$$\bar{F}(u) = \int f_{\mu}(x, D_{\mu}u) d\mu \quad (u \in W_{\mu}^{1,p}(\mathbf{R}^n; \mathbf{R}^m))$$

where $W_\mu^{1,p}$ is the space of functions with finite energy, f_μ is the relaxed integrand, and D_μ stands for the "tangential gradient" operator with respect to μ . Given a low dimensional manifold S of dimension k , it will suffice to take $\mu = H^k \llcorner S$ to obtain the desired elasticity model on S .

In Section 2 we introduce the concept of tangential gradient with respect to a measure μ which enables us to construct the associated Sobolev space $W_\mu^{1,p}$, in Section 3 we state and prove the relaxation result, and in Section 4 we consider some examples of measures which describe junctions of elastic materials with different dimensions. Also, the occurrence of nonlocal effects is pointed out, with possible links to the theory of Dirichlet forms (see Mosco [13],[14]).

2. Notation and Preliminary Results

Let n be a positive integer, let $p \in]1, +\infty[$, and let μ be a nonnegative finite Borel measure on \mathbb{R}^n . As usual, we denote by p' the conjugate exponent of p given by $1/p + 1/p' = 1$. We consider the space

$$X_\mu^{p'} = \{ \phi \in L_\mu^{p'}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^n) : \text{div}(\phi\mu) \in L_\mu^{p'}(\mathbb{R}^n) \},$$

where the divergence operator div is intended in the sense of distributions on \mathbb{R}^n . In other words, a function ϕ belongs to $X_\mu^{p'}$ if and only if $\phi \in L_\mu^{p'}(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^n)$ and there exists $K > 0$ such that

$$\int \phi \cdot D\psi \, d\mu \leq K \|\psi\|_{L_\mu^p} \quad \forall \psi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n).$$

For μ -a.e. $x \in \mathbb{R}^n$ we define

$$T_\mu^p(x) = \mu\text{-ess} \bigcup \{ \phi(x) : \phi \in X_\mu^{p'} \}$$

where the μ -essential union is defined as a μ -measurable closed valued multifunction such that (see for instance Bouchitté and Valadier [4]):

- $\phi \in X_\mu^{p'} \Rightarrow \phi(x) \in T_\mu^p(x)$ μ -a.e.
- $T_\mu^p(x) \subset \Gamma(x)$ μ a.e. for all multifunctions $\Gamma(x)$ satisfying the properties above.
- There exists a sequence $(v_{h \rightarrow +\infty})$ in $X_\mu^{p'}$ such that $T_\mu^p(x) = \text{cl}(\{v_h(x); h \in \mathbb{N}\})$ μ -a.e.

It is immediate to see that for μ -a.e. $x \in \mathbb{R}^n$ the set $T_\mu^p(x)$ is a linear subspace of \mathbb{R}^n that we call the *tangent space* of μ at x . We denote by $P_\mu(x, \cdot)$ the orthogonal projection on $T_\mu^p(x)$.

Given $u \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$ we define, for μ -a.e. $x \in \mathbb{R}^n$, the tangential derivative $D_\mu u(x)$ as the projection of $Du(x)$ on $T_\mu^p(x)$:

$$D_\mu u(x) = P_\mu(x, Du(x)).$$

We remark that $D_\mu u(x)$, as an element of $(L_\mu^p)^n$, depends only on the equivalence class of u in the space L_μ^p . Then we can consider the operator on L_μ^p : $u \mapsto D_\mu u$ whose domain is $\mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$. To extend this operator we need

Proposition 2.1. *Let (u_h) in $\mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$ and v in $(L_\mu^p)^n$ be such that*

$$u_h \rightarrow 0, \quad D_\mu u_h \rightarrow v \quad \text{weakly in } L_\mu^p.$$

Then $v = 0$ μ -a.e..

Before proving this result, we remark that it enables us to introduce the smallest closed extension of D_μ (still denoted D_μ) by setting

$$w = D_\mu u \iff \exists u_h \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n); (u_h, D_\mu u_h) \rightarrow (u, w) \text{ in } (L_\mu^p)^{n+1}.$$

We define the Sobolev space $W_\mu^{1,p}$ as the domain of this extension endowed with the norm

$$\|u\|_{1,p,\mu} = \|u\|_{L_\mu^p} + \|D_\mu u\|_{L_\mu^p}.$$

We notice that $W_\mu^{1,p}$ is the completion of $\mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$ with respect to $\|\cdot\|_{1,p,\mu}$. On this separable Banach space the weak convergence is defined by

$$u_h \rightharpoonup u \text{ weakly in } W_\mu^{1,p} \iff \begin{cases} u_h \rightharpoonup u \text{ weakly in } L_\mu^p \\ D_\mu u_h \rightharpoonup D_\mu u \text{ weakly in } L_\mu^p. \end{cases}$$

Using Proposition 2.1, it can be easily checked that for every $p \in]1, +\infty[$ the space $W_\mu^{1,p}$ is reflexive. In order to describe the formula of integration by parts on $W_\mu^{1,p}$, we notice that if $\phi \in X_\mu^{p'}$ then $\phi(x) \in T_\mu^p(x)$ for μ -a.e. x , and so, for every $u \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$,

$$\begin{aligned} \int D_\mu u \cdot \phi \, d\mu &= \int P_\mu(x, Du) \cdot \phi \, d\mu \\ &= \int Du \cdot \phi \, d\mu \\ &= -\langle u, \text{div}(\phi\mu) \rangle. \end{aligned}$$

which, by means of a density argument, yields

$$(2.1) \quad \int D_\mu u \cdot \phi \, d\mu = -\langle u, \text{div}(\phi\mu) \rangle$$

for every $u \in W_\mu^{1,p}$.

Proof of Proposition 2.1. Using the integration by parts formula (2.1) for every $\phi \in X_\mu^{p'}$, we obtain

$$\int v \cdot \phi \, d\mu = \lim_{h \rightarrow +\infty} \int D_\mu u_h \cdot \phi \, d\mu = - \lim_{h \rightarrow +\infty} \int u_h \text{div}(\phi\mu) \, d\mu = 0.$$

We notice that $X_\mu^{p'}$ verifies the following locality property:

$$\phi \in X_\mu^{p'}, \varphi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n) \Rightarrow \phi\varphi \in X_\mu^{p'}.$$

Hence, by using an argument of commutation between \int and \sup (cf. Lemma 4.3 of Bouchitté and Dal Maso [3], or Bouchitté and Valadier [4]), we get

$$0 = \sup_{\phi \in X_\mu^{p'}} \int v \cdot \phi \, d\mu = \int \mu\text{-ess} \sup_{\phi \in X_\mu^{p'}} (v \cdot \phi) \, d\mu.$$

We can choose a sequence ϕ_h in $X_\mu^{p'}$ such that $\mu\text{-ess} \sup_{\phi \in X_\mu^{p'}} (v \cdot \phi)(x) = \sup_h (v \cdot \phi_h)(x)$ and such that the set $\{\phi_h(x); h \in \mathbb{N}\}$ is dense in $T_\mu^p(x)$, μ a.e. We deduce

$$0 = \int \sup_h (v \cdot \phi_h) \, d\mu = \int \sup_{z \in T_\mu^p(x)} (v(x) \cdot z) \, d\mu$$

which implies that

$$(2.2) \quad v(x) \in (T_\mu^p(x))^\perp \quad \text{for } \mu\text{-a.e. } x.$$

Since the linear space $X = \{v \in (L_\mu^p)^n : v(x) \in T_\mu^p(x) \text{ for } \mu\text{-a.e. } x\}$ is closed, and since $D_\mu u_h \in X$, we have $v \in X$. This, together with (2.2), implies that $v = 0$ μ -a.e. ■

Remark 2.2. Here we list some properties of the tangent space $T_\mu^p(x)$, recalling that $T_\mu^p(x)$ is only μ -almost every defined. Proofs are straightforward and left to the reader.

(i) For every open subset $A \subset \mathbb{R}^n$, the following locality property holds:

$$\mu \llcorner A = \nu \llcorner A \Rightarrow T_\mu^p(x) = T_\nu^p(x) \quad \mu\text{-a.e. on } A.$$

- (ii) If $p < q$, then $T_\mu^p(x) \subset T_\mu^q(x)$. For all the measures μ we considered (see examples 2.3-2.5) we find that the space $T_\mu^p(x)$ does not depend on p . We think that, in general, the inclusion could be strict, although we were not able to find any counterexample.
- (iii) If ν is absolutely continuous with respect to μ , then $T_\nu^p(x) \subset T_\mu^p(x)$ for ν -a.e. x .
- (iv) If μ_1, μ_2 are Radon measures on \mathbf{R}^{n_1} and \mathbf{R}^{n_2} , respectively, then the tensor product $\mu = \mu_1 \otimes \mu_2$ satisfies

$$T_\mu^p(x, y) = T_{\mu_1}^p(x) \times T_{\mu_2}^p(y) \quad \text{for } \mu\text{-a.e. } (x, y) \in \mathbf{R}^{n_1} \times \mathbf{R}^{n_2}.$$

Some other useful properties of the tangent space $T_\mu^p(x)$ are included in the Appendix (Lemma 5.2 and Corollaries 5.4, 5.5).

In the following examples we denote 1_E the function defined by $1_E(x) = 1$ if $x \in E$, $1_E(x) = 0$ otherwise.

Example 2.3. Let Ω be a bounded open subset of \mathbf{R}^n with Lipschitz boundary, and let $\mu = H^n \llcorner \Omega$. Then we get

$$X_\mu^p = \{ \phi \in L^p(\Omega; \mathbf{R}^n) : \operatorname{div} \phi \in L^p(\Omega), \phi \cdot \nu = 0 \text{ on } \partial\Omega \}, \quad W_\mu^{1,p} = W^{1,p}(\Omega), \quad D_\mu u = 1_\Omega Du.$$

Example 2.4. Let S be a smooth compact manifold in \mathbf{R}^n , of dimension $k < n$, with smooth boundary ∂S , and let $\mu = H^k \llcorner S$. Then (see Appendix, Corollary 5.4)

$$\begin{aligned} T_\mu^p(x) &= T_S(x) \quad (\text{do not depend on } p), \\ X_\mu^p &= \{ \phi \in L^p(S; \mathbf{R}^n) : \operatorname{div}_S \phi_S \in L^p(S), \phi_\nu = 0 \text{ on } S, \phi_S \cdot \tau_S = 0 \text{ on } \partial S \}, \\ W_\mu^{1,p} &= W^{1,p}(S), \quad D_\mu u = 1_S D_S u, \end{aligned}$$

where the subscript S and the subscript ν denote respectively the tangential and normal components to S , and τ_S is the versor tangential to S and normal to ∂S .

Having in mind the problem of junctions between multi-dimensional structures, we can generalize this example to the case where S is a finite union of smooth compact manifolds S_i ($i = 1, \dots, N$). Assume that S_i has dimension k_i and that the corresponding measures $\mu_i = H^{k_i} \llcorner S_i$ are mutually singular. Then, setting $\mu = \sum_i \mu_i$, we can prove (see Appendix, Corollary 5.5) that

$$T_\mu^p(x) = T_{S_i}(x) \quad \mu_i \text{ a.e.}, \quad W_\mu^{1,p} = \{ u : u|_{S_i} \in W^{1,p}(S_i) \text{ for every } i \}, \quad D_\mu u = \sum_i 1_{S_i} D_{S_i} u.$$

Example 2.5. Let C be a closed subset of \mathbf{R} such that $\mathbf{R} \setminus C$ is dense in \mathbf{R} , let $\alpha \in [0, 1]$ be such that $H^\alpha(C) < +\infty$, and let $\mu = H^\alpha \llcorner C$. Then for every p , the tangent space $T_\mu^p(x)$ reduces to $\{0\}$, so that $W_\mu^{1,p} = L_\mu^p$ and $D_\mu u = 0$ for every $u \in W_\mu^{1,p}$. Indeed, if $\phi \in X_\mu^p$ we have that, for some suitable $g \in L_\mu^p$,

$$(2.3) \quad \frac{d}{dx}(\phi \mu) = g \mu$$

As $g \mu$ is a Radon measure, we deduce from (2.3) that the measure $\phi \mu$ can be written as $f H^1$, where f is a function with bounded variation.

In the case $\alpha < 1$, the measure $\phi \mu$ is singular with respect to H^1 ; hence it vanishes and $\phi = 0$ μ -a.e. (in fact the same conclusion holds for all measures μ which are singular with respect to H^1).

In the case $\alpha = 1$, from (2.3) we get that $f = \phi 1_C$ is absolutely continuous. As it vanishes on the dense set $\mathbf{R} \setminus C$, by continuity we have $\phi = 0$ on C and so $\phi = 0$ μ -a.e..

3. The Relaxation Result

- Given a function $f : \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ such that
- (3.1) for every $z \in \mathbf{R}^n$ the function $f(\cdot, z)$ is μ -measurable,
- (3.2) for μ -a.e. $x \in \mathbf{R}^n$ the function $f(x, \cdot)$ is convex,
- (3.3) there exist $c_1 > 0, c_2 > 0$ such that

$$c_1 |z|^p \leq f(x, z) \leq c_2 (1 + |z|^p) \quad \forall (x, z) \in \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^n,$$

we consider the associated functional defined on $W_\mu^{1,p}$ by

$$F(u) = \begin{cases} \int f(x, Du) d\mu & \text{if } u \in \mathcal{D}(\mathbf{R}^n) \\ +\infty & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Our goal is to represent the relaxed functional

$$\bar{F} = \max\{G : W_\mu^{1,p} \rightarrow \mathbf{R} : G \text{ is weakly l.s.c., } G \leq F\}$$

in a suitable integral form. To this aim, we introduce the function $f_\mu : \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}$ defined by

$$f_\mu(x, z) = \inf \{ f(x, z + \xi) : \xi \in (T_\mu^p(x))^\perp \}.$$

We are now in a position to state our relaxation result.

Theorem 3.1. For every $u \in W_\mu^{1,p}$ we have

$$\bar{F}(u) = \int f_\mu(x, D_\mu u) d\mu.$$

Proof. By assumption (3.3) and by the reflexivity of $W_\mu^{1,p}$, the relaxed functional \bar{F} does not change if we substitute the weak $W_\mu^{1,p}$ -convergence by the weak L_μ^p -convergence, and since F is convex, this last one can be substituted by the strong L_μ^p -convergence. Then, a well known result of convex analysis (see for example [6]) states that \bar{F} is the bipolar functional of F in the duality $\langle L_\mu^p, L_\mu^p \rangle$:

$$(3.4) \quad \bar{F}(u) = F^{**}(u) := \sup \{ \langle u, v \rangle - F^*(v) : v \in L_\mu^p \}$$

where

$$F^*(v) = \sup \{ \langle w, v \rangle - F(w) : w \in L_\mu^p \}.$$

Let us consider $A : u \in \mathcal{D}(\mathbf{R}^n) \rightarrow Du$ the densely defined linear operator from L_μ^p to $(L_\mu^p)^n$ and A^* its adjoint operator. For $\phi \in D(A^*)$ and $\psi \in \mathcal{D}(\mathbf{R}^n)$, we have

$$\langle A^* \phi, \psi \rangle = \langle \phi, A\psi \rangle = \int \phi \cdot D\psi d\mu,$$

so that $D(A^*) = X_\mu^p$ and, using (2.1), we get $A^* \phi = -\operatorname{div}(\phi \mu)$.

Denote I_f the functional $w \in L_\mu^p \rightarrow \int f(x, w(x)) d\mu$ which by (3.3) is convex continuous. Its polar I_f^* (see [6]) is given by $I_f^*(\phi) = \int f^*(x, \phi(x)) d\mu$. Then, by Theorem 5.1 of the Appendix, the polar of $F^*(v) = I_f(Av)$ is given by

$$F^{**}(v) = \inf \left\{ \int f^*(x, \phi) d\mu : A^* \phi = v \right\}.$$

Thus equation (3.4) becomes

$$\begin{aligned} \bar{F}(v) &= \sup_v \sup_{A^* \phi=v} \{ (u, v) - \int f^*(x, \phi(x)) d\mu \} \\ &= \sup \{ - \int u \operatorname{div}(\phi \mu) d\mu - \int f^*(x, \phi) d\mu : \phi \in X_\mu^{p'} \} \\ &= \sup \{ \int (\phi \cdot D_\mu u - f^*(x, \phi)) d\mu : \phi \in X_\mu^{p'} \}. \end{aligned}$$

Using the localization property $(\theta, \phi) \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n) \times X_\mu^{p'} \Rightarrow \theta \phi \in X_\mu^{p'}$ and the same argument of commutation as in the proof of Proposition 2.1 (see [3], [4]), we get

$$\bar{F}(u) = \int \mu\text{-ess sup}_{\phi \in X_\mu^{p'}} (\phi \cdot D_\mu u - f^*(x, \phi)) d\mu.$$

We can choose a sequence ϕ_h such that the set $\{\phi_h(x); h \in \mathbb{N}\}$ is dense in $T_\mu^p(x)$ μ a.e. and such that

$$\bar{F}(u) = \int \sup_h (\phi_h \cdot D_\mu u - f^*(x, \phi_h(x))) d\mu.$$

Then, by the continuity of f^* due to (3.3), we get for every $u \in W_\mu^{1,p}$

$$\bar{F}(u) = \int g(x, D_\mu u) d\mu.$$

where

$$g(x, z) = \sup \{ w \cdot z - f^*(x, w) : w \in T_\mu^p(x) \}.$$

Let us define f_μ by

$$f_\mu(x, z) = \inf \{ f(x, z + \xi) : \xi \in (T_\mu^p(x))^\perp \},$$

An easy computation shows that

$$\begin{aligned} f_\mu^{**}(x, z) &= \sup_{z^*} \left[z \cdot z^* - \sup_t (t \cdot z^* - f_\mu(x, t)) \right] \\ &= \sup_{z^*} \left[z \cdot z^* - \sup \{ t \cdot z^* - f(x, t + s) : t \in \mathbb{R}^n, s \in T_\mu^\perp \} \right] \\ &= g(x, z) \end{aligned}$$

Since $f_\mu(x, \cdot)$ is convex and $f_\mu \leq f$, $f_\mu(x, \cdot)$ is a continuous function. Hence $f_\mu^{**} = f_\mu$ and $g = f_\mu$. ■

Remark 3.2. A result similar to Theorem 3.1 holds for vector valued functions $u : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$. In this case $D_\mu u$ is a $m \times n$ matrix which satisfies the formula

$$\int \phi \cdot D_\mu u d\mu = - \int u \cdot \operatorname{div}(\phi \mu) d\mu = - \sum_{i,j} \int u_i \omega_j(\phi_{ij} \mu) d\mu$$

for every matrix $\phi(x) = \phi_{ij}(x)$ such that $\phi_{ij} \in X_\mu^{p'}$ for all i . In this case

$$f_\mu(x, z) = \inf \{ f(x, z + \xi) : \ker \xi \supset T_\mu^p(x) \}.$$

Let Ω be a bounded open subset of \mathbb{R}^n with a Lipschitz boundary, and let μ be a measure vanishing outside Ω such that $\mu \geq H^n \llcorner \Omega$, so that (see Example 2.3) $W_\mu^{1,p} \subset W^{1,p}(\Omega)$. Taking into account (3.3), we may consider the relaxation problem for F with respect to the weak $W^{1,p}(\Omega)$ convergence, and this will

provide a relaxed functional that we denote by \mathcal{F} . The relation between \mathcal{F} and \bar{F} is given by the following result.

Theorem 3.3. For every $u \in W^{1,p}(\Omega)$ we have

$$(3.5) \quad \mathcal{F}(u) = \inf \{ \bar{F}(v) : v \in W_\mu^{1,p}, v = u \text{ } H^n\text{-a.e. on } \Omega \}.$$

Proof. Denote by \mathcal{F}_0 the right-hand side of (3.5), take $u \in W^{1,p}(\Omega)$, and take a sequence (u_h) of smooth functions such that $u_h \rightarrow u$ weakly in $W^{1,p}(\Omega)$ and $F(u_h)$ is bounded. Then, by (3.3) and the reflexivity of $W_\mu^{1,p}$, (a subsequence of) (u_h) converges weakly in $W_\mu^{1,p}$ to some $v \in W_\mu^{1,p}$, and, since $\mu \geq H^n \llcorner \Omega$, we have $v = u$ H^n -a.e. on Ω . By using Theorem 3.1 we get

$$\mathcal{F}_0(u) \leq \bar{F}(v) \leq \liminf_{h \rightarrow +\infty} F(u_h)$$

so that, by the arbitrariness of (u_h) , inequality $\mathcal{F}_0 \leq \mathcal{F}$ is proved. In order to prove the opposite inequality, for fixed $u \in W^{1,p}(\Omega)$ and $\varepsilon > 0$, take $v \in W_\mu^{1,p}$ with $v = u$ H^n -a.e. on Ω such that $\mathcal{F}_0(v) \geq \bar{F}(v) - \varepsilon$ (this if there exists at least one of such v , otherwise the inequality $\mathcal{F}_0(v) \geq \mathcal{F}(u)$ is trivial). By the relaxation result of Theorem 3.1 there exists a sequence (u_h) of smooth functions such that $u_h \rightarrow v$ weakly in $W_\mu^{1,p}$ and

$$\bar{F}(v) = \lim_{h \rightarrow +\infty} F(u_h).$$

Since $\mu \geq H^n \llcorner \Omega$ the sequence (u_h) converges to u weakly in $W^{1,p}(\Omega)$, so that

$$\mathcal{F}_0(u) \geq \bar{F}(v) - \varepsilon \geq \mathcal{F}(u) - \varepsilon$$

and, by the arbitrariness of ε , we get $\mathcal{F}_0(u) \geq \mathcal{F}(u)$, and the proof is concluded. ■

Remark 3.4. A formula analogous to (3.5) holds if $\mu \geq \nu$ and \mathcal{F}_ν is the relaxed functional of F with respect to the L_p^p convergence, that is

$$\mathcal{F}_\nu(u) = \inf \{ \bar{F}(v) : v \in W_\mu^{1,p}, v = u \text{ } \nu\text{-a.e.} \}.$$

In particular, this is true for the measure $\nu = \frac{d\mu}{dx}$.

4. Some Examples

In this section we present some examples which fall within the framework considered in this paper. We start with an example similar to the one already considered in Buttazzo and Dal Maso [5], Section 6.

Example 4.1. Let Ω be a bounded open subset of \mathbb{R}^n ($n \geq 3$), let x_1 and x_2 be two points in Ω and Γ be a smooth simple path in Ω joining x_1 to x_2 . Fix $p > 1$, define the function

$$a(x) = |x - x_1|^q + |x - x_2|^q \quad (q < p - n),$$

let $b : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ be a positive H^1 -measurable function, set $\mu = a(x)H^n \llcorner \Omega + b(x)H^1 \llcorner \Gamma$, and consider the integrand

$$f(x, z) = |z|^p.$$

As an application of the results of Section 3, we get

$$\bar{F}(v) = \int_\Omega a(x) |Dv|^p dx + \int_\Gamma b(x) |D_\tau v|^p dH^1 \quad \forall v \in W_\mu^{1,p}.$$

We compute now the relaxed functional \mathcal{F} of Theorem 3.3. It should be noticed that a function $u \in W^{1,p}(\Omega)$ with $\mathcal{F}(u) < +\infty$ must be defined in x_1 and in x_2 ; indeed, the capacity in Ω of the two points x_1, x_2 with respect to the energy $\int_{\Omega} a(x)|Du|^p dx$ is positive. Therefore, the equality $u = v$ in the inf of formula (3.5) must hold at x_1 and at x_2 , whereas, being Γ of capacity zero in Ω , u and v are completely independent on $\Gamma \setminus \{x_1, x_2\}$. Hence, formula (3.5) gives

$$\mathcal{F}(u) = \int_{\Omega} a(x)|Du|^p dx + \inf \left\{ \int_{\Gamma} b(x)|D_{\tau}v|^p dH^1 : v(x_i) = u(x_i), i = 1, 2 \right\},$$

and, after an easy computation, one obtains

$$\mathcal{F}(u) = \int_{\Omega} a(x)|Du|^p dx + |u(x_2) - u(x_1)|^p \left(\int_{\Gamma} b(x)^{1/(1-p)} dH^1 \right)^{1-p}.$$

Similar results hold if the coefficient a "charges" a finite number of points x_1, \dots, x_N of Γ , that is $a(x) = \sum_{i=1}^N |x - x_i|^q$ ($q < p - n$). For instance, in the case of Figure 4.1 we get

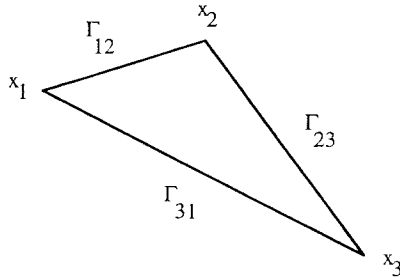


Figure 4.1.

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(u) = & \int_{\Omega} a(x)|Du|^p dx + |u(x_1) - u(x_2)|^p \left(\int_{\Gamma_{12}} b(x)^{1/(1-p)} dH^1 \right)^{1-p} + \\ & + |u(x_2) - u(x_3)|^p \left(\int_{\Gamma_{23}} b(x)^{1/(1-p)} dH^1 \right)^{1-p} + \\ & + |u(x_3) - u(x_1)|^p \left(\int_{\Gamma_{31}} b(x)^{1/(1-p)} dH^1 \right)^{1-p}, \end{aligned}$$

whereas in the case of Figure 4.2

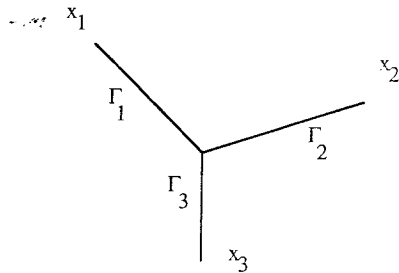


Figure 4.2.

$$\mathcal{F}(u) = \int_{\Omega} a(x)|Du|^p dx + \inf_{s \in \mathbb{R}} \left\{ \sum_{i=1}^3 |u(x_i) - s|^p \left(\int_{\Gamma_i} b(x)^{1/(1-p)} dH^1 \right)^{1-p} \right\}.$$

In all examples above, when $p = 2$, we may rewrite \mathcal{F} in the form

$$\mathcal{F}(u) = \int_{\Omega} a(x)|Du|^2 dx + \int \int |u(x) - u(y)|^2 j(dx, dy)$$

where the measure j on $\Omega \times \Omega$ is a suitable symmetric combination of Dirac masses laying outside the diagonal $\{x = y\}$. This is the standard integral representation of \mathcal{F} in Dirichlet form (see for instance Mosco [13],[14], for further examples).

Example 4.2. Let $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$, let S_1, S_2 be the 2-dimensional disks in \mathbb{R}^3

$$S_1 = \{(x, y, z) : x = x_1, y^2 + z^2 < 1\}$$

$$S_2 = \{(x, y, z) : x = x_2, y^2 + z^2 < 1\},$$

let $\Gamma_0, \Gamma_1, \Gamma_2$ be the 1-dimensional segments

$$\Gamma_0 = \{(x, y, z) : x \in [x_1, x_2], y = z = 0\}$$

$$\Gamma_1 = \{(x, y, z) : x = x_1, |y| < 1/2, z = 0\}$$

$$\Gamma_2 = \{(x, y, z) : x = x_2, |y| < 1/2, z = 0\},$$

let Ω be an open set containing $S_1 \cup S_2 \cup \Gamma_0$ (see Figure 4.3), and let

$$\mu = H^3 \llcorner \Omega + H^2 \llcorner (S_1 \cup S_2) + H^1 \llcorner (\Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2).$$

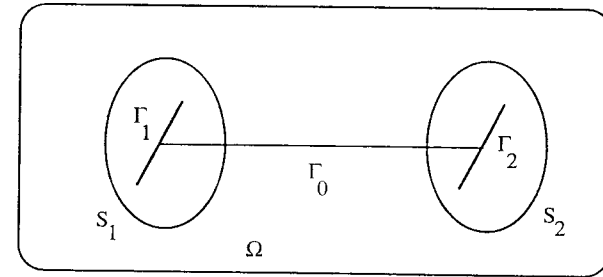


Figure 4.3.

Then we have, with $f(x, z) = |z|^p$,

$$\bar{\mathcal{F}}(u) = \int_{\Omega} |Dv|^p dx + \int_{S_1 \cup S_2} |D_{\tau}v|^p dH^2 + \int_{\Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2} |D_{\tau}v|^p dH^1.$$

In order to characterize the functional \mathcal{F} through formula (3.5), we remark that every $u \in W^{1,p}(\Omega)$ with $\mathcal{F}(u) < +\infty$ belongs to $W^{1,p}(S_1 \cup S_2)$, hence to $W^{1,p}(\Gamma_1 \cup \Gamma_2)$. Hence u is defined at the points $\xi_1 = (x_1, 0, 0)$ and $\xi_2 = (x_2, 0, 0)$, and the equality $u = v$ in formula (3.5) occurs on $S_1 \cup S_2$, on $\Gamma_1 \cup \Gamma_2$, and at ξ_1 and ξ_2 . We obtain

$$\mathcal{F}(u) = \int_{\Omega} |Du|^p dx + \int_{S_1 \cup S_2} |D_{\tau}u|^p dH^2 + \int_{\Gamma_1 \cup \Gamma_2} |D_{\tau}u|^p dH^1 + \frac{|u(\xi_2) - u(\xi_1)|^p}{|x_2 - x_1|^{p-1}}.$$

We notice that the elimination of the two disks S_1 and S_2 from the structure would make the set $\Gamma_0 \cup \Gamma_1 \cup \Gamma_2$ of capacity zero, so that \mathcal{F} would become

$$\mathcal{F}(u) = \int_{\Omega} |Du|^p dx.$$

Analogously, the elimination of the two junctions Γ_1 and Γ_2 would make u and v completely independent on Γ_0 , so that

$$\mathcal{F}(u) = \int_{\Omega} |Du|^p dx + \int_{S_1 \cup S_2} |D_{\tau}u|^p dH^2.$$

Example 4.3. Let Ω be a bounded open subset of \mathbb{R}^n ($n \geq 2$), let $A \subset \subset \Omega$ be a smooth open set, and let S be a smooth $(n-1)$ -dimensional manifold intersecting ∂A transversally (see Figure 4.4).

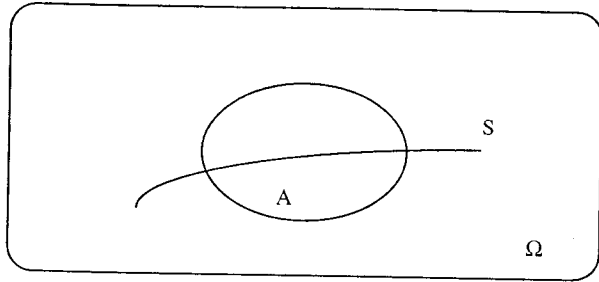


Figure 4.4.

Take $f(x, z) = |z|^p$ and

$$\mu = H^n \llcorner (\Omega \setminus A) + H^{n-1} \llcorner S.$$

Then, by Theorem 3.1 we have for every $v \in W_{\mu}^{1,p}$

$$\bar{F}(v) = \int_{\Omega \setminus A} |Dv|^p dx + \int_S |D_{\tau}v|^p dH^{n-1}.$$

Moreover, if $u \in W^{1,p}(\Omega \setminus A)$ is such that $\mathcal{F}(u) < +\infty$, then u admits a trace on $S \cap (\Omega \setminus A)$ which is in $W^{1,p}(\Omega \setminus A)$, so that equality $u = v$ in formula (3.5) occurs on $S \cap (\Omega \setminus A)$, hence on $S \cap \partial A$, whereas u and v are completely independent on $S \cap A$. Therefore we obtain

$$\mathcal{F}(u) = \int_{\Omega \setminus A} |Du|^p dx + \int_{S \cap (\Omega \setminus A)} |D_{\tau}u|^p dH^{n-1} + \inf \left\{ \int_{S \cap A} |D_{\tau}v|^p dH^{n-1} : v = u \text{ on } S \cap \partial A \right\}.$$

Let us take, for instance, $n = 3$ and $p = 2$. Then the surface S is divided into two parts $S_1 = S \cap A$ and $S_2 = S \setminus A$, separated by the curve $\Gamma = \partial \cap S$. As an element of $H^1(S_2)$, the function u has a trace on Γ , still denoted by u . Then the solution $v \in H^1(S_1)$ of the problem

$$\min \left\{ \int_{S_1} |D_{\tau}v|^2 dH^2 : v = u \text{ on } \Gamma \right\}$$

can be represented in terms of a function $G : \Gamma \times \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ (Poisson kernel), i.e.,

$$v(x) = \int_{\Gamma} G(x, y)u(y) dH^1(y).$$

Therefore, denoting by γ the vector tangential to S_1 but normal to Γ (pointing outward), and setting

$$K(x, y) = -\frac{1}{2} \frac{\partial G}{\partial \gamma}$$

we get

$$\begin{aligned} \int_{S_1} |D_{\tau}v|^2 dH^2 &= \int_{\Gamma} v \frac{\partial v}{\partial \gamma} dH^1 \\ &= -2 \int_{\Gamma \times \Gamma} K(x, y)u(x)u(y) dH^1(x) dH^1(y) \\ &= \int_{\Gamma \times \Gamma} K(x, y)|u(x) - u(y)|^2 dH^1(x) dH^1(y). \end{aligned}$$

Hence we may write \mathcal{F} as a traditional Dirichlet form

$$\mathcal{F}(u) = \int_{\Omega \setminus A} |Du|^2 dx + \int_{S \setminus A} |D_{\tau}u|^2 dH^{n-1} + \int_{\Gamma \times \Gamma} K(x, y)|u(x) - u(y)|^2 dH^1(x) dH^1(y).$$

Example 4.4. Consider an elastic 2-dimensional medium on S , where S is a smooth 2-dimensional manifold of \mathbb{R}^3 . Let μ be the measure $H^2 \llcorner S$, and as energy density we take an integrand

$$f(x, z) = g(x, z^{\circ})$$

where z° denotes the symmetric part of the 3×3 matrix z . We assume that $g(x, \cdot)$ is convex and

$$c_1 |\xi|^p \leq g(x, \xi) \leq c_2 (1 + |\xi|^p)$$

for every $x \in \mathbb{R}^3$ and every symmetric 3×3 matrix ξ . It is easy to check that the results of previous sections still hold if the coerciveness assumption (3.3) is weakened as follows:

$$c_1 \int |Du|^p d\mu \leq \int f(x, Du) d\mu \leq c_2 \int (1 + |Du|^p) d\mu$$

for every $u \in C^1(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^m)$. By Theorem 3.1 we have that

$$\bar{F}(u) = \int_S f_S(x, D_S u) dH^2,$$

where D_S is the tangential gradient on S and f_S is given by

$$\begin{aligned} f_S(x, z) &= \inf \{ f(x, z + a \otimes \nu) : a \in \mathbb{R}^3 \} \\ &= \inf \{ g(x, z^{\circ} + (a \otimes \nu)^{\circ}) : a \in \mathbb{R}^3 \} \end{aligned}$$

where ν denotes the normal to S at x .

As $z^{\circ} = (I - \nu \otimes \nu)z^{\circ}(I - \nu \otimes \nu) + [(2z^{\circ} \cdot \nu - (\nu z^{\circ} \nu) \nu) \otimes \nu]^{\circ}$, it is easy to see that $f_S(x, \cdot)$ actually depends only on the matrix

$$z_S^{\circ} = (I - \nu \otimes \nu)z^{\circ}(I - \nu \otimes \nu).$$

For instance, in the linear isotropic model, where

$$(4.1) \quad g(x, \xi) = \frac{\lambda}{2} |\text{Tr } \xi|^2 + \mu |z|^2,$$

we obtain the usual 2-dimensional membrane energy density (see Landau and Lifchitz [10])

$$f_S(x, z) = \frac{\lambda \mu}{\lambda + 2\mu} |\text{Tr } z_S^{\circ}|^2 + \mu |z_S^{\circ}|^2.$$

Analogously, for an elastic string modelled by a smooth 1-dimensional manifold S we obtain

$$\bar{F}(u) = \int_S f_S(x, D_S u) dH^1$$

where, denoting by τ the tangent vector to S ,

$$\begin{aligned} f_S(x, z) &= \inf \{ f(x, z + \xi) : \xi \tau = 0 \} \\ &= \inf \{ g(x, z^{\circ} + \xi^{\circ}) : \xi \tau = 0 \}. \end{aligned}$$

For instance, in the linear isotropic case (4.1) we get

$$f_S(x, z) = \frac{3\mu(3\lambda + 2\mu)}{2(3\lambda + 11\mu)} |z \tau \cdot \tau|^2.$$

5. Appendix

5.1. A Convex Analysis Lemma

In this section we prove under very general assumptions a convex analysis result which we found in the literature under more restrictive hypotheses (see for instance Castaing and Valadier [6]).

Theorem 5.1. *Let X, Y be Banach spaces, let $A : X \rightarrow Y$ be a linear operator with dense domain $D(A)$, and let $f : Y \rightarrow]-\infty, +\infty]$ be a convex function which we assume to be continuous in at least a point of the image of A . Then we have for every $x^* \in X^*$*

$$(5.1) \quad (f \circ A)^*(x^*) = \inf\{f^*(y^*) : A^*y^* = x^*\}$$

and, when the quantities above are finite, the infimum at the right-hand side is achieved.

Proof. As usual, we use the conventions that $(f \circ A)(x) = +\infty$ whenever $x \notin D(A)$, and that $\inf \emptyset = +\infty$. Moreover, it is not restrictive to assume that the point of $A(X)$ where f is continuous is the origin. Let us fix $x^* \in X^*$ and for every $y \in Y$ define

$$(5.2) \quad h(y) = \inf\{f(Ax + y) - \langle x, x^* \rangle\}.$$

Then we have:

- (i) $(f \circ A)^*(x^*) = -h(0)$;
- (ii) $h(y) \leq f(y)$ for every $y \in Y$ (take $x = 0$ in (5.2));
- (iii) h is convex on Y (indeed the function $(x, y) \mapsto f(Ax + y) - \langle x, x^* \rangle$ is convex on $D(A) \times Y$);
- (iv) $h^*(y^*) = \sup_y \sup_x [(y, y^*) + \langle x, x^* \rangle - f(Ax + y)]$
 $= \sup_x \left[\langle x, x^* \rangle + \sup_y ((y, y^*) - f(Ax + y)) \right]$
 $= \sup_x [\langle x, x^* \rangle - \langle Ax, y^* \rangle + f^*(y^*)].$

Let us now prove inequality \leq in (5.1). We may assume that the right-hand side is finite, so that there exists $y_0^* \in Y^*$ with $A^*y_0^* = x^*$. That yields, by (iv),

$$h^*(y^*) = f^*(y^*) + \sup_x \langle Ax, y_0^* - y^* \rangle = \begin{cases} f^*(y^*) & \text{if } A^*y^* = x^* \\ +\infty & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Hence

$$\inf\{f^*(y^*) : A^*y^* = x^*\} = \inf h^* = -h^{**}(0) \geq -h(0) = (f \circ A)^*(x^*)$$

which proves inequality \leq in (5.1).

Let us now prove the opposite inequality. We may assume that the left-hand side is finite, so that by i), $h(0) > -\infty$. As h is convex, $h \leq f$, and f is continuous at 0, we have that h is continuous and subdifferentiable at 0. In particular, there exists z^* such that

$$h^*(z^*) = -h(0) < +\infty,$$

and so, by iv),

$$f^*(z^*) < +\infty, \quad \sup_x [\langle x, x^* \rangle - \langle Ax, z^* \rangle] < +\infty.$$

Hence

$$\sup_{\|x\| \leq 1} |\langle Ax, z^* \rangle| \leq M + \|x^*\| < +\infty,$$

which implies that $z^* \in D(A^*)$. Therefore, we can write $\langle Ax, z^* \rangle = \langle x, A^*z^* \rangle$, so that (since $D(A)$ is dense in X)

$$h^*(z^*) = f^*(z^*) + \sup_x \langle x, x^* - A^*z^* \rangle = \begin{cases} f^*(z^*) & \text{if } A^*z^* = x^* \\ +\infty & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Since $h^*(z^*) < +\infty$, we have $A^*z^* = x^*$, and so

$$(f \circ A)^*(x^*) = -h(0) = f^*(z^*) \geq \inf\{f^*(y^*) : A^*y^* = x^*\}. \blacksquare$$

5.2. Different Notions of Tangent Space

In the literature we found different notions of tangent space relative to a measure (see De Giorgi [9], Simon [16]). In [16] the following definition was proposed, using blow-up of the measure μ . Let $x_0 \in \mathbb{R}^n$ and for every $\rho > 0$ define the measure $\mu_\rho^{x_0}$ by

$$(5.3) \quad \langle \mu_\rho^{x_0}, \varphi \rangle = \frac{1}{\mu(B_\rho(x_0))} \int \varphi\left(\frac{x - x_0}{\rho}\right) d\mu \quad (\varphi \in C_c^0(\mathbb{R}^n)).$$

Then the k -dimensional subspace P of \mathbb{R}^n is said to be tangent to μ at x_0 if there exist $\rho_k \downarrow 0$ and $\theta > 0$ such that

$$(5.4) \quad \lim_{h \rightarrow +\infty} \langle \mu_{\rho_k}^{x_0}, \varphi \rangle = \theta \int_P \varphi dH^k \quad \text{for every } \varphi \in C_c^0(\mathbb{R}^n).$$

Let us notice that the existence of such a P , unlike our notion T_μ^P , is not guaranteed (in case $\mu = H^k \llcorner S$, the existence of P μ a.e. is equivalent to the k -rectifiability of the set S [16]). The link between the two notions is given through the following result.

Lemma 5.2. *Assume that there exists a μ -measurable multifunction $P(x)$ such that (5.4) holds μ -a.e. Then for every $p \in [1, +\infty[$, we have*

$$T_\mu^p(x) \subset P(x) \quad \text{for } \mu\text{-a.e. } x \in \mathbb{R}^n.$$

Proof. Let $\Phi \in X_\mu^p$. We only need to show that $\Phi(x_0) \in T_\mu^p(x_0)$ μ a.e. By definition of the space X_μ^p , we know that $m = \{\text{div}(\Phi\mu)\}$ is a μ -absolutely continuous Radon measure. Hence, for μ -a.e. x_0 we have

$$(5.5) \quad \limsup_{\rho \rightarrow 0} \frac{m(B_\rho(x_0))}{\mu(B_\rho(x_0))} < \infty.$$

Let Ψ be a smooth function such that $\text{spt } \Psi \subset B_1(0)$ and set $\psi_\rho(x) = \Psi\left(\frac{x - x_0}{\rho}\right)$, $M = \sup |\Psi|$. We have

$$\begin{aligned} m(B_\rho(x_0)) &\geq \frac{1}{M} \left| \int \Phi \cdot D\psi_\rho d\mu \right| \\ &\geq \frac{1}{\rho M} \left| \int \Phi \cdot D\psi_\rho\left(\frac{x - x_0}{\rho}\right) d\mu \right| \end{aligned}$$

By (5.5) and (5.4), we deduce that

$$(5.6) \quad \begin{aligned} 0 &= \lim_k \frac{1}{\mu(B_{\rho_k}(x_0))} \int \Phi \cdot D\psi_{\rho_k}\left(\frac{x - x_0}{\rho_k}\right) d\mu \\ &= \Phi(x_0) \cdot \theta(x_0) \int_{P(x_0)} D\Psi(y) H^k(x_0)(dy) \end{aligned}$$

Now integrating by parts the orthogonal projection on $P(x_0)$ of $D\Psi$, we find easily that $(P(x_0))^\perp$ is spanned by the set $\{\int_{P(x_0)} D\Psi(y) H^k(x_0)(dy), \Psi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n), \text{spt } \Psi \subset B_1(x_0)\}$. Hence by (5.6), we have $\Phi(x_0) \in P(x_0)$ for μ -a.e. x_0 . ■

Remark 5.3. The inclusion $T_\mu^p(x) \subset P(x)$ can be strict; indeed, taking $\alpha = 1$ in Example 2.5, we get $P(x) = \mathbb{R}$ on all points of C with density 1 (with respect to the Lebesgue measure), whereas $T_\mu^p(x) = 0$ for all $x \in \mathbb{R}$.

Now we justify the results stated in Example 2.4.

Corollary 5.4. Let S be a C^2 manifold in \mathbb{R}^n of dimension $k \leq n$, let $T_S(x)$ be the tangent space at every $x \in S$, and let $\mu = H^k \llcorner S$. Then for every $p \in [1, +\infty[$ we have

$$T_\mu^p(x) = T_S(x) \quad \mu\text{-a.e.}$$

Proof. By Lemma 5.2 and the rectifiability of S , we have $T_\mu^p(x) \subset T_S(x)$ for μ -a.e. x . Using integration by parts on S , we find that every C^2 vector field Ψ such that $\Psi(x) \in T_S(x)$ for every $x \in S$ and $\Psi = 0$ on ∂S belongs to X_μ^p (for every $p \geq 1$). Hence (as $H^k(\partial S) = 0$), we have $T_S(x) \subset T_\mu^p(x)$ μ -a.e. ■

Corollary 5.5. Let S be a finite union of C^2 manifolds S_i ($i = 1, \dots, N$); assume that S_i has dimension k_i and that the measures $\mu_i = H^{k_i} \llcorner S_i$ are mutually singular. Setting $\mu = \sum_i \mu_i$ and denoting by $T_{S_i}(x)$ the tangent space to S_i at x , we have for every $p \in [1, +\infty[$

$$T_\mu^p(x) = T_{S_i}(x) \quad \mu_i\text{-a.e.}$$

Proof. Since $\mu \geq \mu_i$, it is easy to see that $T_\mu^p(x) \subset T_{\mu_i}^p(x)$ μ_i -a.e. while, by Cor. 5.4, $T_{\mu_i}^p(x) = T_{S_i}(x)$ μ_i -a.e. To prove the opposite inclusion, we consider the blown-up measure μ_ρ^x defined in (5.3). We have

$$\mu_\rho^x = \sum_j \frac{\mu_j(B_\rho(x))}{\mu(B_\rho(x))} (\mu_j)_\rho^x.$$

Since the measures μ_j are mutually singular, we have that for every i and for μ_i -a.e. $x \in \mathbb{R}^n$

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \frac{\mu_j(B_\rho(x))}{\mu(B_\rho(x))} = \begin{cases} 1 & \text{if } j = i \\ 0 & \text{if } i \neq j. \end{cases}$$

Hence, for μ_i almost all x , the weak limit of μ_ρ^x in the sense of measures is the same as that of $(\mu_i)_\rho^x$, which, by Cor. 5.4 is given by (5.4) with $P = T_{S_i}(x)$ and $k = k_i$. We deduce that $T_{S_i}(x)$ is the tangent plane to μ in the sense of the definition (5.4), and so, by Lemma 5.2, we conclude that $S_i(x)$ contains $T_\mu(x)$, μ_i a.e. ■

Acknowledgements. This research is part of the project "EURHomogenization", contract SC1-CT91-0732, of the program SCIENCE of the Commission of the European Communities. The first author wishes to thank the Department of Mathematics of Università di Pisa where this paper was written. The second author warmly acknowledges the hospitality of the Department of Mathematics of the Université de Toulon, where this paper was initiated.

References

- [1] E. ACERBI, G. BUTTAZZO, D. PERCIVALE: *Thin inclusions in linear elasticity: a variational approach*. J. Reine Angew. Math., **386** (1988), 99–115.
- [2] E. ACERBI, G. BUTTAZZO, D. PERCIVALE: *A variational definition of the strain energy for an elastic string*. J. Elasticity, **25** (1991), 137–148.
- [3] G. BOUCHITTE, G. DAL MASO: *Integral representation and relaxation of convex local functionals on a space of measures*. Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa Cl. Sci., **20** (1993), 483–533.
- [4] G. BOUCHITTE, M. VALADIER: *Integral representation of convex functionals on a space of measures*. J. Funct. Anal., **80** (1988), 398–420.
- [5] G. BUTTAZZO, G. DAL MASO: Γ -limits of integral functionals. J. Analyse Math., **37** (1980), 145–185.
- [6] C. CASTAING, M. VALADIER: *Convex Analysis and Measurable Multifunctions*. Lecture Notes in Math. **580**, Springer-Verlag, Berlin (1977).
- [7] P. G. CIARLET: *A justification of the von Kármán equations*. Arch. Rational Mech. Anal., **73** (1980), 349–389.
- [8] P. G. CIARLET, P. DESTUYNDER: *A justification of the two dimensional linear plate model*. J. Mécanique, **18** (1979), 315–344.
- [9] E. DE GIORGI: *Introduzione ai problemi di discontinuità libera*. In "Symmetry in Nature", a volume in honor of Luigi A. Radicati di Brozolo, Scuola Normale Superiore, Pisa (1989).
- [10] L. LANDAU, E. LIFCHITZ: *Théorie de l'Élasticité*. MIR, Moscow (1967).
- [11] H. LE DRET, A. RAOULT: *The nonlinear membrane model as variational limit of nonlinear three-dimensional elasticity*. Preprint n. 93034, Laboratoire d'Analyse Numérique, Paris (1993).
- [12] A. E. H. LOVE: *A treatise on the mathematical theory of elasticity*. Cambridge (1927).
- [13] U. MOSCO: *Composite media and asymptotic Dirichlet forms*. J. Funct. Anal., **123** (1994), 368–421.
- [14] U. MOSCO: *Composite media and Dirichlet forms*. Proceedings of "Compositis Media and Homogenization", ICTP, Trieste, 1989, Birkhäuser, Basel (1991).
- [15] D. PERCIVALE: *The variational method for tensile structures*. Preprint Dipartimento di Matematica, Politecnico di Torino, Torino (1991).
- [16] L. SIMON: *Lectures on Geometric Measure Theory*. Proc. C. M. A. **3**, Australian Natl. U. Canberra (1983).