N° d'ordre NNT : 2023ECDL0048

THÈSE DE DOCTORAT DE L'ÉCOLE CENTRALE DE LYON
MEMBRE DE L'UNIVERSITÉ DE LYON

ÉCOLE DOCTORALE N° 34
ÉCOLE DOCTORALE MATÉRIAUX DE LYON

SPÉCIALITÉ DE DOCTORAT : MATÉRIAUX

Soutenue publiquement le 8 décembre 2023 par :

Alexandre Epalle

Préparée au Laboratoire de Tribologie et Dynamique des Systèmes - UMR CNRS 5513
36 Avenue Guy de Collongue, 69134 Écully Cedex France

Simulation numérique par méthode Lattice-Boltzmann des propriétés de mouillabilité des surfaces texturées

---

Devant le jury composé de :

Krzysztof Kubiak	Associate professor, University of Leeds	Rapporteur
Samy Merabia	Directeur de recherche CNRS, Institut Lumière Matière	Rapporteur
Elisa Migliorini	Chargée de recherche CNRS, CEA Grenoble	Examinatrice
Vincent Thomy	Professeur, Université de Lille	Président du jury
Thomas Vilajosana	Ingénieur, Framatome	Invité
Manuel Cobian	Maître de conférences, École Centrale de Lyon	Co-encadrant
Stéphane Valette	Professeur, École Centrale de Lyon	Directeur de thèse

Remerciements

Comme il est de coutume en début de ce long, très long, trop long assemblage de pages que l'on nomme plus formellement un manuscrit de thèse, je souhaite débuter par mes sincères remerciements.

En premier lieu, je tiens à exprimer ma gratitude envers les membres du jury. Merci infiniment pour avoir accepté de faire partie de celui-ci et, de manière plus générale, pour l'intérêt manifesté à l'égard de mes travaux. Mes remerciements particuliers vont à mes rapporteurs, Krzysztof Kubiak et Samy Merabia, ainsi qu'à Vincent Thomy, président du jury, et à Elisa Migliorini et Thomas Vilajosana.

En second lieu, je souhaite adresser mes remerciements chaleureux à mes encadrants de thèse, sans lesquels cette aventure n'aurait pas vu le jour. Merci à mon directeur de thèse, Stéphane Valette, et à mon co-encadrant, Manuel Cobian, pour leur bienveillance, leur soutien, et les conseils prodigués tout au long de ce parcours. Je les remercie également pour la confiance qu'ils m'ont accordée lorsque j'ai exploré des thématiques éloignées du sujet initial et lors de mes présentations scientifiques à travers le globe.

Mes sincères remerciements vont également à l'ensemble des chercheurs et du personnel du LTDS que j'ai eu l'occasion de rencontrer au cours de mon séjour au laboratoire. Merci pour les échanges scientifiques, ainsi que les moments conviviaux autour de la machine à café.
Je souhaite également exprimer ma gratitude envers tous les doctorants et post-doctorants du laboratoire, anciens et nouveaux, pour les moments partagés, que ce soit au quotidien ou de manière plus occasionnelle au bar.

Malgré le risque de paraître sélectif, je tiens à remercier particulièrement l'ensemble de l'équipe du D4, à laquelle j'ai eu la chance d'appartenir entre 2019 et 2023. Merci pour ces moult fous rires durant les pauses du midi, les soirées mémorables, et même sur la faille de l'invocateur pour certains. Une pensée spéciale pour Salomé Basset, Mathilde Catherin, Mathilde Delory, Pauline Faura, Mélody Le Falher, Yann Bami-Chatenet, Louis-Jean Lager, Hugo Lannay et Quentin Legrand. Tous les bons moments que l'on a pu partager, les raclettes « *en saison* », les pauses in-*thé*-rminables, resteront gravés dans ma mémoire.

Mes remerciements s'étendent à tous mes amis, qu'ils soient de l'école d'ingénieurs, du lycée ou des Crapochi, pour leur soutien précieux au cours de ces dernières années.

Enfin, je souhaite exprimer ma profonde reconnaissance envers ma famille pour leur support inconditionnel. Merci à Thomas de m'avoir insufflé inconsciemment l'envie de réaliser cette thèse. La Triforce est maintenant complète !

Encore une fois, un grand merci à tous ! Et bon courage pour la suite du manuscrit, là où les choses deviennent plus sérieuses...

Résumé

La texturation des surfaces, qu'elle soit topographique ou chimique, est l'un des principaux leviers pour fonctionnaliser une surface vis-à-vis de ses propriétés de mouillabilité. L'observation des surfaces naturelles présente une grande variété de stratégies de texturation pour contrôler les propriétés de mouillabilité des surfaces. L'ensemble de ces stratégies repose sur des texturations complexes à base de motifs multi-échelles, réentrants ou multi-chimies. Or, expérimentalement, ces texturations complexes limitent la caractérisation des propriétés de mouillabilité. En réponse à cette problématique, le développement d'un outil numérique permet d'accéder à la caractérisation de l'ensemble des interfaces durant l'étalement de la goutte.

Pour simuler les propriétés numériques, ces travaux s'appuient sur le développement d'un code appliquant la méthode Lattice-Boltzmann aux essais de mouillabilité. Cette méthode numérique est particulièrement adaptée au mouillage de par la possibilité de considérer à la fois les interactions macroscopiques d'un fluide et les interactions locales entre les fluides et le solide. De plus, le modèle numérique peut être implémenté de manière à relier le potentiel d'adhésion dans les simulations avec les propriétés de mouillabilité intrinsèques au couple liquide-solide. Par construction, le modèle numérique est applicable à un grand nombre de texturations à la fois chimique et topographique. En simulant l'étalement d'une goutte sur les surfaces, l'impact des textures sur l'équilibre d'une goutte peut être caractérisé numériquement. Puis en inclinant l'orientation des forces de pesanteur, il est également possible de simuler le comportement dynamique lors du décrochage de la goutte.

Suite à une comparaison fructueuse entre l'approche expérimentale et l'approche numérique, diverses simulations ont permis de montrer l'impact de la topographie et de la chimie de surface sur l'étalement de la goutte. L'ensemble des résultats de simulation montrent que l'état d'équilibre dépend fortement de l'historique d'étalement de la goutte et non exclusivement des paramètres de texturation. De plus, parmi ces résultats, certains, ont permis de mettre en évidence les effets de la gravité sur la profondeur d'ancrage des gouttes à l'équilibre.

Enfin, dans le cadre de la fonctionnalisation de surface, un couplage entre la méthode Lattice-Boltzmann et un algorithme génétique a été proposé pour optimiser la forme des texturations. Bien qu'exploratoires, les premiers résultats d'optimisation ont permis de valider la démarche en proposant une texturation pour atteindre un comportement très hydrophobe avec une faible adhésion de la goutte, à partir d'une chimie hydrophile.

Mots clés : Simulation numérique, Méthode Lattice-Boltzmann, Mouillage, Fonctionnalisation, Texturation, Biomimétisme, Algorithme génétique, Optimisation de forme

Abstract

Surface texturing, whether topographic or chemical, is one of the main ways of functionalizing a surface in terms of its wettability properties. The observation of natural surfaces presents a wide variety of texturing strategies to control the wetting properties of surfaces. All of these strategies rely on complex texturing based on multi-scale, reentrant, or multi-chemistry patterns. However, experimentally, these complex textures limit the characterization of wetting properties. In response to this issue, the development of a numerical tool allows access to the characterization of all interfaces during drop spreading.

To simulate the numerical properties, this work is found on the development of a code applying the Lattice-Boltzmann method to wetting tests. This numerical method is particularly suitable for wetting due to its ability to consider both the macroscopic interactions of a fluid and the local interactions between the fluids and the solid. In addition, the numerical model can be implemented in a way that links the adhesion potential in simulations with the intrinsic wetting properties of the liquid-solid couple. By design, the numerical model is applicable to a large number of both chemical and topographical textures. By simulating the spreading of a droplet on surfaces, the impact of textures on the droplet equilibrium can be characterized numerically. Then, by tilting the orientation of gravity forces, it is also possible to simulate the dynamic behavior during droplet detachment.

Following a successful comparison between the experimental approach and the numerical approach, various simulations have shown the impact of surface topography and chemistry on the spreading of the droplet. All simulation results indicate that the equilibrium state strongly depends on the droplet spreading history and not exclusively on the texturing parameters. Furthermore, among these results, some have highlighted the effects of gravity on the depth at which the droplets anchor in equilibrium.

Finally, within the context of surface functionalization, a coupling between the Lattice-Boltzmann method and a genetic algorithm has been proposed to optimize the shape of textures. Although exploratory, the initial optimization results have validated the approach by suggesting a texturing to achieve a highly hydrophobic behavior with low droplet adhesion, starting from a hydrophilic chemistry.

Keywords: Numerical simulation, Lattice-Boltzmann Method, Wetting, Fonctionnalization, Texturing, Biomimicry, Genetic algorithm, Shape optimization

Sommaire

Introduction générale **11**

I Etat de l'art 13

1 Mouillabilité des surfaces texturées 15
1.1 Tension de surface et capillarité 16
1.1.1 Définition de la tension superficielle 16
1.1.2 Discontinuité de la pression aux interfaces fluides 18
1.1.3 Nombre de Bond et longueur capillaire 19
1.2 Propriété de mouillabilité 20
1.2.1 Critère d'étalement 21
1.2.2 Caractérisation du mouillage d'une goutte sessile 21
1.2.3 Hystérèse d'angle de contact 22
1.3 Théories du mouillage 23
1.3.1 Equilibre statique de Young 23
1.3.2 Approche par aire de contact 25
1.3.3 Approche par ligne triple 28
1.3.4 Approche hybride 28
1.3.5 Transition entre les régimes de mouillage 30
1.3.6 Modélisation de l'hystérèse 34
1.4 Topographie des surfaces réelles 37

2 Méthode Lattice-Boltzmann 41
2.1 Comportement des fluides à l'échelle mésoscopique 42
2.1.1 Principe et échelle de description 42
2.1.2 Fonction de distribution 44
2.1.3 Equation de transport de Boltzmann 46
2.2 Méthode de discrétisation à l'échelle mésoscopique 46
2.2.1 Système de discrétisation 47
2.2.2 Discrétisation des équations 48
2.2.3 Opérateur de collision discrétisé 50
2.3 Application à l'étude de la mouillabilité 52
2.3.1 Conditions aux limites 52
2.3.2 Etude des systèmes Multi-Composants Multi-Phasiques 54
2.3.3 Modèle à pseudo-potentiel 55
2.3.4 Synthèse de la méthode appliquée à la mouillabilité 62

3 Bio-inspiration et biomimétisme **65**
3.1 Principe de la démarche . . . 66
3.2 Mouillabilité des surfaces naturelles . . . 67
3.2.1 Propriétés de mouillabilité observables dans la nature . . . 67
3.2.2 Structures des surfaces naturelles hydrophobes . . . 68
3.2.3 Limites fonctionnelles . . . 70
3.3 Méthode d'optimisation évolutionnaire . . . 72
3.3.1 Origine, concepts et applications . . . 72
3.3.2 Algorithme génétique . . . 73

II Etude numérique du mouillage **81**

4 Outil de simulation numérique **83**
4.1 Simulation du mouillage par la méthode Lattice-Boltzmann . . . 84
4.2 Présentation de l'outil de simulation . . . 86
4.2.1 Outils de calcul et caractéristiques techniques . . . 86
4.2.2 Incorporation de surfaces complexes . . . 87
4.2.3 Système adimensionné via le nombre de Bond . . . 88
4.3 Post-traitement et caractérisation numérique du mouillage . . . 91
4.3.1 Angles de contact macroscopiques . . . 91
4.3.2 Quantification de l'interface liquide-solide . . . 92
4.3.3 Imprégnation et ancrage . . . 93
4.3.4 Dynamique d'étalement . . . 95
4.4 Validation du code de simulation . . . 95
4.4.1 Interface fluide-fluide . . . 95
4.4.2 Angles de contact pour une surface plane . . . 98
4.4.3 Courbure des gouttes soumises à la gravité . . . 99
4.4.4 Essai d'inclinaison pour une surface plane . . . 103

5 Etudes sur l'étalement et le décrochage des gouttes **107**
5.1 Mouillabilité numérique d'une surface texturée réelle . . . 108
5.1.1 Propriétés de la surface texturée . . . 108
5.1.2 Comparaison expérimental et numérique . . . 111
5.1.3 Prédiction du comportement pour différentes chimies . . . 115
5.2 Mouillabilité numérique de surfaces modèles . . . 120
5.2.1 Motifs, réseaux et chimies des surfaces modèles . . . 121
5.2.2 Goutte en équilibre statique . . . 122
5.2.3 Décrochement dynamique par inclinaison . . . 132

6 Optimisation de la forme des textures pour la fonctionnalisation de surfaces **143**
6.1 Couplage méthode Lattice-Boltzmann et algorithme génétique . . . 144
6.1.1 Choix des opérateurs de l'algorithme génétique . . . 144
6.1.2 Définition des paramètres géométriques des texturations . . . 145
6.1.3 Critères d'optimisation . . . 148
6.2 Optimisation des motifs pour la super-hydrophobie . . . 151
6.2.1 Optimisation pour une chimie hydrophile . . . 151
6.2.2 Stabilité pour un essai d'inclinaison . . . 156

Conclusion générale **161**

Introduction générale

À travers la fonctionnalisation de surface, la science des matériaux répond de manière innovante aux nouveaux défis qui s'imposent à nos sociétés. Le terme de fonctionnalisation de surface tient au fait que les propriétés d'une surface sont modifiées pour lui donner une fonction spécifique. Dans le cadre de ce manuscrit, le sujet porte essentiellement sur les propriétés de mouillabilité des surfaces. Cependant, quelle que soit l'application, la maîtrise des propriétés des surfaces et des interfaces au sein d'un système est cruciale vis-à-vis de son optimisation, son efficacité énergétique, ou encore sa durabilité. Dans une logique de pérennité des solutions, ces innovations techniques ont tout intérêt à s'inscrire dans une démarche respectueuse des utilisateurs et de leur environnement. Ainsi, certains systèmes doivent être repensés pour remplacer des solutions polluantes et toxiques. Dans le cadre de la mouillabilité des surfaces, il est possible de prendre l'exemple de l'utilisation des composés fluorés qui, malgré leur toxicité, sont employés depuis longtemps pour limiter l'adhésion des liquides sur les surfaces. Ces composés sont notamment utilisés dans le domaine du textile pour produire des surfaces imperméables.

Pour pouvoir fonctionnaliser une surface, il est impératif de commencer par comprendre les phénomènes physico-chimiques auxquels la surface est soumise. Dans le cadre de la mouillabilité, le sujet d'étude réside dans les différentes interfaces qui peuvent être créées lors du dépôt d'une goutte sur une surface. Pour une goutte liquide sur un substrat solide, la mouillabilité peut être étudiée à travers l'équilibre et l'évolution de trois interfaces : liquide-gaz, liquide-solide et solide-gaz. De manière générale, le comportement de mouillabilité d'une surface est caractérisé par un angle de contact macroscopique mesuré tangent à l'interface liquide-gaz au niveau du point sécant entre les trois interfaces en présence. Par nature, cet angle de contact est dépendant des chimies du couple liquide-solide.
L'étalement d'une goutte sur une surface est également impacté par la topographie de la surface. De fait, il est possible de modifier le comportement de la goutte par l'ajout de textures pour favoriser l'étalement de la goutte ou au contraire le réduire. De nombreux travaux théoriques et expérimentaux couvrent l'étude du comportement des propriétés de mouillabilité sur les surfaces texturées en fonction de la nature des texturations. Ainsi, il a été montré que le contrôle de la chimie de surface et de la topographie permettent d'imposer un comportement de mouillabilité.
Il est possible d'exprimer un grand nombre de fonctions de surface liées à la mouillabilité. Le cas le plus fréquent étant la fonction d'imperméabilité ou d'auto-nettoyage, porté par une très faible adhésion de la goutte sur la surface, où la goutte roule sur la surface. Mais au contraire, il est également possible de chercher des comportements d'étalement extrême, par exemple pour favoriser des échanges thermiques entre le fluide et la surface.
En mouillage, dans le cadre de la fonction de surface, la nature s'est révélée être une excellente source d'inspiration. Certaines espèces vivantes, qu'elles soient végétales ou animales, ont eu à répondre à la même problématique d'adhésion des liquides. L'exemple le plus commun est la feuille de lotus qui à travers une texturation multi-échelles exhibe un comportement de goutte extrêmement déperlant, lié à une fonction d'auto-nettoyage. De plus, l'étude des nombreuses

espèces vivantes à permis de montrer qu'il n'existe pas une unique façon d'atteindre un même comportement. La nature a développé une grande variété de solutions pour fonctionnaliser les surfaces basées sur des texturations multi-échelles, multi-chimies et à géométries réentrantes.
Cependant, les études de ces surfaces complexes sont particulièrement difficiles en raison des limites techniques rencontrées expérimentalement. En effet, l'approche expérimentale est limitée pour quantifier précisément l'interface liquide-solide, particulièrement pour des texturations topographiques. Or l'interface liquide-solide joue pourtant un rôle important sur l'adhésion de la goutte sur la surface.

Le développement d'outils fiables de simulations numériques du mouillage est porté par la volonté de s'affranchir des limites expérimentales. Intrinsèquement, l'approche numérique n'est pas restreinte quant à l'observation des différentes interfaces, ainsi que leurs évolutions durant l'étalement de la goutte et de l'imprégnation des textures. De plus, elle ouvre la possibilité à des études prédictives pour des surfaces complexes pour lesquelles les essais expérimentaux seraient très coûteux, en raison des contraintes technologiques liées à leur fabrication.
Quant au modèle numérique choisi, les travaux effectués durant cette thèse se concentrent sur la méthode Lattice-Boltzmann. En effet, à l'origine du projet, à l'occasion d'une thèse réalisée précédemment dans l'équipe, la méthode Lattice-Boltzmann a été choisie pour sa capacité à simuler le déplacement des différentes particules à partir de leurs potentiels d'interactions. Dans le cadre de cette thèse, le code créé au sein de l'équipe est développé spécifiquement pour répondre aux problématiques de mouillabilité sous la forme d'un système composé de plusieurs composants, dont au moins deux fluides non-miscibles.

Ce travail de thèse s'inscrit dans une dynamique d'équipe, en discussion constante entre approches numériques et expérimentales, visant à mieux maîtriser la mouillabilité des surfaces afin de designer des surfaces fonctionnelles performantes et durables. Ainsi, cette thèse a pour objectif de développer l'approche numérique pour déterminer les paramètres pertinents pour contrôler les propriétés de mouillabilité des surfaces texturées pour la fonctionnalisation de surface.

Pour répondre au sujet, le présent manuscrit s'articule autour de deux grandes parties. Dans une première partie, dédiée à l'état de l'art, l'ensemble des connaissances nécessaires à la bonne appréhension du sujet sont détaillées. Ensuite, une deuxième partie se concentre sur la présentation des méthodes et des résultats des simulations numériques des propriétés de mouillabilité par la méthode Lattice-Boltzmann.
La première partie est subdivisée en 3 chapitres, chacun abordant un champ d'étude différent. Le premier chapitre présente les fondamentaux du mouillage à travers différentes modélisations théoriques et études expérimentales. Dans le deuxième chapitre, la littérature consacrée à la méthode Lattice-Boltzmann est présentée en s'intéressant à son application à des systèmes multi-composants et multi-phasiques. Enfin, le chapitre trois clôture l'état de l'art, en définissant les notions de biomimétisme et de bio-inspiration, ainsi que leurs applications dans le cadre de la fonctionnalisation de surface.
Quant à la deuxième partie, le chapitre quatre présente l'implémentation de la méthode Lattice-Boltzmann appliquée au mouillage dans le code de calcul, complétée par les différentes validations du modèle. Le chapitre cinq est dédié à l'étude numérique du mouillage à travers plusieurs campagnes de simulations, sur des surfaces réelles et modèles. Pour finir, le chapitre six présente les résultats d'une approche numérique couplant le code de simulation du mouillage avec un algorithme génétique dans le cadre de la fonctionnalisation de surface.

Partie I

Etat de l’art

Chapitre 1

Mouillabilité des surfaces texturées

« They were scientists enough to admit that they were wrong. »

Isaac Asimov, *Foundation*

Sommaire

1.1 Tension de surface et capillarité 16
1.1.1 Définition de la tension superficielle 16
1.1.2 Discontinuité de la pression aux interfaces fluides 18
1.1.2.1 Cas d'une interface sphérique 18
1.1.2.2 Généralisation aux interfaces courbées 18
1.1.3 Nombre de Bond et longueur capillaire 19
1.2 Propriété de mouillabilité 20
1.2.1 Critère d'étalement 21
1.2.2 Caractérisation du mouillage d'une goutte sessile 21
1.2.3 Hystérèse d'angle de contact 22
1.3 Théories du mouillage 23
1.3.1 Equilibre statique de Young 23
1.3.2 Approche par aire de contact 25
1.3.2.1 Modèle de Wenzel 25
1.3.2.2 Modèle de Cassie-Baxter 26
1.3.2.3 Modèle mixte 27
1.3.3 Approche par ligne triple 28
1.3.4 Approche hybride 28
1.3.5 Transition entre les régimes de mouillage 30
1.3.6 Modélisation de l'hystérèse 34
1.4 Topographie des surfaces réelles 37

Ce premier chapitre a pour objectif de définir les phénomènes physiques autour des questions de mouillabilité des surfaces. En début de chapitre, les différentes notions de base sont définies. Dans une deuxième partie, les méthodes de caractérisation des propriétés de mouillabilité sont présentées dans le cas d'une goutte liquide sur une surface solide. Ensuite, un état de l'art des modèles théoriques du mouillage est réalisé, par ordre chronologique, avant de discuter des effets dynamiques. Pour conclure, une dernière partie traite des paramètres de rugosité pour quantifier la topographie des surfaces texturées et le lien avec leurs propriétés de mouillabilité.

1.1 Tension de surface et capillarité

1.1.1 Définition de la tension superficielle

Le mouillage correspond à l'étude des phénomènes capillaires relatifs aux comportements des interfaces fluides [1–3]. La tension superficielle, ou tension de surface, est généralement notée γ et représente une force s'opposant à la déformation de l'interface. La tension superficielle peut également être représentée comme l'énergie associée à la création d'une interface. En effet, il existe plusieurs approches pour définir la tension superficielle [4].

1. Suivant une approche énergétique, la tension superficielle peut être définie comme l'énergie à fournir pour augmenter la surface de l'interface.
   Un liquide peut être décrit comme un ensemble de molécules dont la cohésion est assurée par des interactions de courte portée et de faible intensité (liaison Van der Waals et liaison hydrogène). Au sein d'un volume de liquide, l'ensemble des interactions est à l'équilibre, ainsi la somme des forces s'exerçant sur les molécules est nulle. Au contraire, à l'interface liquide-gaz, les molécules du liquide sont en déséquilibre. En effet, au niveau de l'interface, les molécules du liquide sont au voisinage d'un nombre inférieur de molécules liquides, comme illustré dans la figure 1.1. Et la présence de molécules du gaz ne compense pas cette perte, en raison de leur moindre densité. De plus, les interactions liquide-gaz sont significativement plus faibles que les interactions entre les molécules du liquide. Ce déséquilibre engendre donc un excès d'énergie libre en surface.

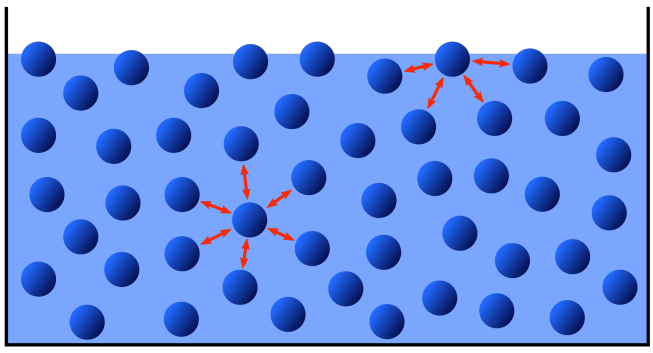

Figure 1.1 : Représentation de la différence d'interactions pour une molécule au sein du fluide ou en surface.

Par définition, le travail nécessaire pour augmenter la surface liquide-gaz A, d'une valeur infinitésimale $\mathrm{d}A$, peut s'écrire :

$$\delta W = \gamma \, \mathrm{d}A \tag{1.1}$$

Gibbs propose de relier l'excédant d'énergie libre à la tension superficielle [5]. Il consid-

ère un système fermé, à nombre de molécules n, température T et volume V constants, composé d'une phase liquide et d'une phase gazeuse. Il exprime alors la tension superficielle de l'interface, en fonction de la variation d'énergie libre E_F

$$\gamma = \left(\frac{\partial E_F}{\partial A}\right)_{n,T,V} \tag{1.2}$$

De cette manière, la tension superficielle est exprimée en $J \cdot m^{-2}$.

2. Une seconde approche, d'origine mécanique, définit la tension superficielle comme une force qui s'oppose à la déformation de l'interface. Il est possible d'illustrer cette force à travers une expérience simple. L'expérience consiste à former un film d'eau savonneuse dans un cadre rigide, à l'exception d'un côté libre de translater, comme représenté dans la figure 1.2.

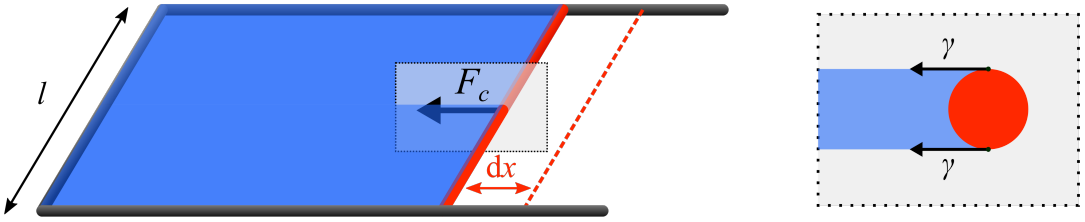

Figure 1.2 : Schéma représentatif de l'approche mécanique de la tension superficielle, avec le cadre rigide (en noir) et le côté mobile (en rouge).

Il est possible de translater le côté mobile de longueur l d'un déplacement infinitésimal $\mathrm{d}x$, de manière à augmenter la surface du film. La tension superficielle est la force attractive qui s'oppose à ce déplacement. Cette force est définie tangentielle à l'interface, et donc normale au contour.
Dans cette configuration, la tension superficielle s'applique aux deux interfaces liquide-gaz. Ainsi, le travail associé aux forces capillaires totales F_c sur la partie mobile, fourni lors du déplacement $\mathrm{d}x$ du côté mobile s'écrit :

$$\delta W = F_c \, \mathrm{d}x = 2 \, \gamma \, l \, \mathrm{d}x \tag{1.3}$$

Il est donc possible d'exprimer la tension superficielle γ comme une force par unité de longueur, d'unité le $N \cdot m^{-1} \equiv J \cdot m^{-2}$, telle que :

$$\gamma = \frac{F_c}{2\,l} \tag{1.4}$$

Sous les effets de la tension superficielle, les interfaces tendent à minimiser leurs surfaces pour minimiser le coût énergétique. Or, à volume constant, la sphère est la forme qui minimise la surface d'interface. Ainsi, une goutte de liquide, libre dans un second fluide non-miscible, adopte une forme parfaitement sphérique. En généralisant à des systèmes fluides quelconques, chaque interface fluide se courbe.

1.1.2 Discontinuité de la pression aux interfaces fluides

1.1.2.1 Cas d'une interface sphérique

Comme expliqué précédemment, en réduisant leur énergie de surface, les interfaces fluides tendent vers une configuration sphérique. Cet effet direct de la tension superficielle provoque une discontinuité de la pression de part et d'autre de l'interface. Ce phénomène peut être quantifié à travers la Loi de Laplace qui relie les forces capillaires avec les forces de pression [1].

Dans un premier temps, il est possible de démontrer la Loi de Laplace dans le cas idéal d'une goutte de liquide libre dans un second fluide non-miscible. Si une goutte parfaitement sphérique de rayon R subit une augmentation de son rayon d'une valeur infinitésimale $\mathrm{d}R$, alors il est possible d'exprimer la variation de la surface $\mathrm{d}A$ et la variation de volume $\mathrm{d}V$ de la goutte.

$$\mathrm{d}A = 8\,\pi\,R\,\mathrm{d}R \tag{1.5}$$

$$\mathrm{d}V = 4\,\pi\,R^2\,\mathrm{d}R \tag{1.6}$$

Le travail des forces capillaires δW_c et le travail des forces de pression δW_p peuvent s'exprimer respectivement tel que :

$$\delta W_c = \gamma\,\mathrm{d}A = 8\,\gamma\,\pi\,R\,\mathrm{d}R \tag{1.7}$$

$$\delta W_p = (p_{int} - p_{ext})\mathrm{d}V = 4(p_{int} - p_{ext})\pi\,R^2\,\mathrm{d}R \tag{1.8}$$

À l'équilibre, le travail des forces de pression et le travail des forces capillaires se compensent.

$$\delta W_p - \delta W_c = 0 \tag{1.9}$$

Ainsi, en réécrivant et en simplifiant l'expression (1.9) à partir de (1.7) et (1.8), il est possible de retrouver la Loi de Laplace pour une sphère [1].

$$\Delta p = \frac{2\,\gamma}{R} \tag{1.10}$$

Le saut de pression à l'interface $p_{int} - p_{ext}$, souvent noté Δp, dépend donc uniquement de la tension superficielle γ et de la taille de la goutte.

1.1.2.2 Généralisation aux interfaces courbées

Dans la réalité, il est rare d'observer une goutte parfaitement sphérique. En effet, que ce soit sous l'effet de forces extérieures telles que la gravité, d'effets visqueux entre les deux fluides ou de l'interaction avec un troisième corps, l'interface fluide est généralement déformée et présente des courbures quelconques. Ainsi, il est crucial de généraliser la loi de Laplace à des interfaces courbes.
Pour toute surface quelconque, il est possible de définir, en un point de la surface X, le plan tangent à la surface. Localement, il existe une infinité de plans orthogonaux au plan tangent et passant par X, auquel est associée une courbure définie comme l'intersection de la surface avec le plan. Parmi ces plans orthogonaux, les deux plans générant respectivement la valeur maximale et minimale de courbure définissent les directions principales. Pour ces deux plans, les courbures principales C_1 et C_2 sont définies comme illustré dans la figure 1.3.
Ainsi, il est possible de construire la loi de Laplace pour une surface quelconque en fonction des deux rayons associés aux directions principales, notés R_1 et R_2.

$$\Delta p = \gamma\left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right) \tag{1.11}$$

Dans le cas particulier des interfaces planes, les rayons de courbure étant infinis, il n'existe pas de discontinuité de la pression au niveau de l'interface.

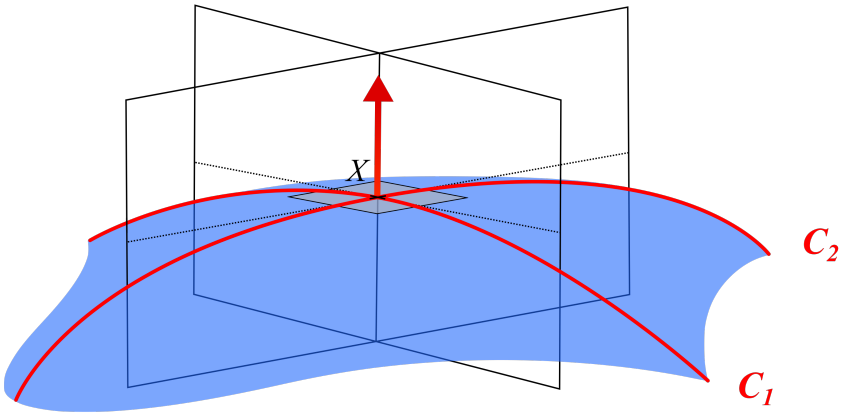

Figure 1.3 : Représentation des courbures principales pour une surface quelconque.

1.1.3 Nombre de Bond et longueur capillaire

Couramment, la forme d'une goutte à l'équilibre est le résultat de la compétition des forces capillaires à l'interface et des forces gravitationnelles sur les particules des fluides. En mécanique des fluides, un nombre adimensionnel a été proposé pour décrire l'équilibre de ces contributions, appelé le nombre de Bond et généralement noté Bo. Le nombre de Bond est construit en réalisant le rapport entre la pression hydrostatique due à la déformation de l'interface par la gravité et la pression de Laplace pour la goutte supposée sphérique, tel que :

$$Bo = \frac{\Delta\rho\, g\, l^2}{\gamma} \tag{1.12}$$

Avec g l'accélération gravitationnelle et l une longueur caractéristique de la goutte, initialement choisie comme étant le rayon de courbure R de la goutte supposée sphérique. Et où $\Delta\rho$ représente la différence de masse volumique entre les deux fluides.
Pour $Bo = 1$, il est possible de définir la longueur capillaire l_c. Cette longueur représente l'échelle pour laquelle les effets de pesanteur et les effets capillaires se compensent, pour un couple de fluides spécifique. Par définition, la longueur capillaire s'exprime sous la forme suivante :

$$l_c = \sqrt{\frac{\gamma}{\Delta\rho\, g}} \tag{1.13}$$

Dans le cas d'une goutte de liquide dans un gaz, la masse volumique du gaz ρ_G est généralement négligée devant celle du liquide ρ_L, permettant de retrouver l'expression usuelle de la longueur capillaire :

$$l_c = \sqrt{\frac{\gamma}{\rho_L\, g}} \tag{1.14}$$

En guise d'exemple, la longueur capillaire de l'eau, dans l'air avec la pesanteur terrestre et à température ambiante (20°C), vaut environ 2,7 mm.
Le nombre de Bond permet de différencier les gouttes suivant l'impact de la gravité sur la forme de l'interface, en fonction de la quantité et de la nature du liquide, comme représenté sur la figure 1.4.

1. Si $Bo < 1$ (soit $R < l_c$), les forces capillaires régissent la courbure de l'interface. La goutte conserve alors une forme de calotte sphérique.

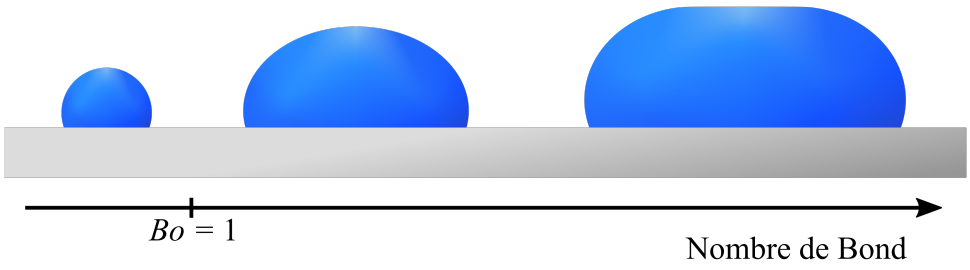

Figure 1.4 : Représentation de l'impact de la gravité sur la forme d'une goutte pour différentes valeurs de Bo.

2. Au contraire, si $Bo > 1$ (soit $R > l_c$), les forces gravitationnelles sont prépondérantes et déforment la goutte. En effet, la goutte s'affaisse sous les effets de la pesanteur. Dans les cas où $Bo \gg 1$, la goutte forme un film d'épaisseur constant hormis au niveau des bords qui conservent une forme sphérique, ces gouttes sont communément appelées flaques.

Ainsi, pour les études de mouillabilité, si les effets gravitationnels sont négligés, il est important de s'assurer que $Bo \ll 1$.

1.2 Propriété de mouillabilité

Cette partie est consacrée à la présentation des propriétés de mouillabilité. Tout d'abord, le mouillage étant l'étude du comportement des interfaces fluides à des échelles où les forces capillaires sont prédominantes, il est possible de définir plusieurs systèmes d'intérêt. Généralement, le comportement d'une goutte fluide au sein d'un second milieu non-miscible est étudié en interaction avec au moins un troisième élément (fluide ou solide). Il est possible d'imaginer un grand nombre de systèmes étudiables, dont les trois plus courants sont illustrés dans la figure 1.5 [1].

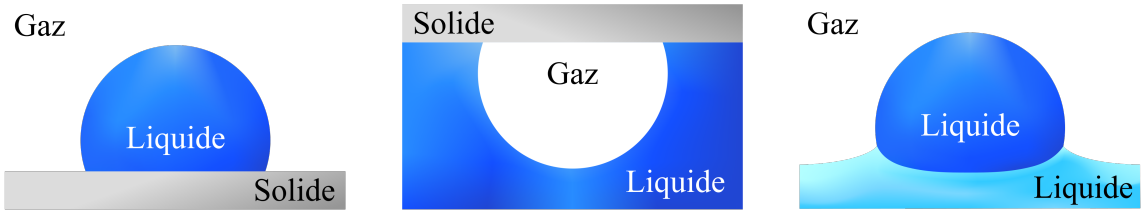

Figure 1.5 : Illustration de trois différents systèmes couramment étudiés dans le cadre de la mouillabilité.

Dans le cadre de cette thèse, les travaux présentés se concentrent sur l'étude du comportement d'une goutte de liquide déposée sur un substrat solide dans un environnement constitué d'air ambiant.

1.2.1 Critère d'étalement

Lorsqu'une goutte de liquide est déposée sur une surface solide, le comportement de la goutte est dépendant des tensions superficielles au niveau des trois interfaces en présence. Les tensions superficielles sont notées γ_{SV}, γ_{SL} et γ_{LV} respectivement pour les différentes interfaces : solide-vapeur, solide-liquide et liquide-vapeur. Il est possible d'exprimer le critère d'étalement S d'une goutte, en fonction de l'équilibre des tensions superficielles du système [6, 7].

$$S = \gamma_{SV} - (\gamma_{SL} + \gamma_{LV}) \tag{1.15}$$

Ainsi, quand $S > 0$, le liquide forme un film et le mouillage est qualifié de total. À l'opposé, le mouillage partiel est défini pour $S < 0$, quand la goutte prend la forme d'une calotte sphérique.

1.2.2 Caractérisation du mouillage d'une goutte sessile

Dans le cas d'une goutte en mouillage partiel, les propriétés de mouillabilité d'un liquide sur un substrat spécifique peuvent être caractérisées via une expérience de goutte sessile. Cette expérience consiste simplement à déposer, à l'aide d'une aiguille, un faible volume de liquide sur une surface et à observer le comportement de la goutte. Pour une goutte d'eau, le volume utilisé est compris entre 1 µL et 10 µL. Cette gamme de volume permet d'une part de conserver une bonne répétabilité du volume employé et d'autre part d'assurer que les effets de la gravité sur la courbure soient limités.
À partir d'observations de la goutte à l'équilibre, il est possible de caractériser les propriétés de mouillabilité. Généralement, la goutte est étudiée suivant des vues de côté, parfois complétées avec une vue de dessus. Comme illustré dans la figure 1.6, l'observation de la goutte à l'équilibre permet de déterminer la position de la ligne à l'interface des trois phases du système, communément appelée la ligne triple. Sur la vue de côté, au niveau des points de la ligne triple, est défini l'angle de contact à l'équilibre θ_e, comme étant l'angle entre la tangente à l'interface solide-liquide et la tangente à l'interface liquide-vapeur. Il est également possible de définir la notion de ligne de base, qui correspond sur les observations en deux dimensions à la ligne de contact liquide-solide reliant les deux points triples.

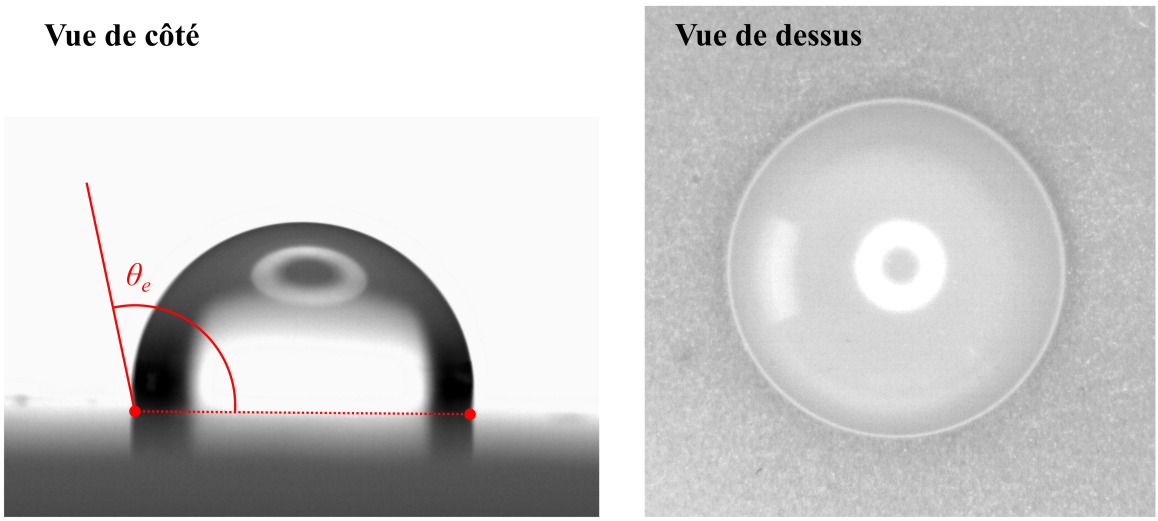

Figure 1.6 : Vue de côté et de dessus d'une goutte d'eau à l'équilibre sur une surface polie miroir en polypropylène teintée (mPP) avec $\theta_e \approx 101°$.

Le caractère hydrophile ou hydrophobe de la surface est déterminé en fonction de la valeur de

l'angle θ_e. En effet, l'hydrophilie est caractérisée par $\theta_e < 90°$. Au contraire, l'hydrophobie se définit pour $\theta_e > 90°$. Ces termes, initialement utilisés pour caractériser le comportement d'une goutte d'eau sur une surface, sont communément employés pour tout type de liquide. Toutefois, dans le cas d'étude avec des huiles, il est commun de parler spécifiquement d'oléophilie et d'oléophobie.

1.2.3 Hystérèse d'angle de contact

Il a été montré expérimentalement qu'il n'existe pas un unique angle de contact d'équilibre macroscopique pour une goutte sur une surface réelle, pouvant comporter des hétérogénéités chimiques et topographiques. Pour un même système solide-liquide-vapeur à l'équilibre, il est possible d'observer différentes valeurs d'angle de contact. Cet écart, au-delà de l'incertitude de mesure, est d'origine physique [8–10]. En effet, une goutte sessile peut s'équilibrer sur une large gamme d'angles de contact macroscopiques $\theta_e \in [\theta_r, \theta_a]$. Les angles critiques, qui bornent le domaine d'équilibre de la goutte, sont respectivement désignés θ_r l'angle de reculée et θ_a l'angle d'avancée [9]. Par construction, durant l'écoulement de la goutte, si l'angle de contact dépasse la valeur de θ_a, la ligne triple se déplace pour augmenter la taille de l'interface solide-liquide. À l'opposé, si l'angle de contact passe sous la valeur de θ_r, la ligne triple se déplace pour diminuer l'interface solide-liquide.

La non-unicité de l'angle d'équilibre est appelée l'hystérèse d'angle de contact, ou en anglais *contact angle hysteresis* (CAH). L'hystérèse d'angle de contact, notée $\Delta\theta$, s'exprime en fonction des angles d'avancée et de reculée :

$$\Delta\theta = \theta_a - \theta_r \tag{1.16}$$

L'origine du phénomène d'hystérésis est liée à la nature imparfaite du substrat solide. Les défauts locaux de la surface affectant l'étalement de la goutte et entraînant la non-unicité d'angle de contact. L'origine de ces défauts peut être liée à la fois à une variation de chimie (hétérogénéité chimique) et à la rugosité (hétérogénéité topographique) [8, 10, 11].

Les angles de contact θ_a et θ_r peuvent être caractériser en soumettant la goutte à une sollicitation extérieure. Ainsi, il existe différentes expériences pour déterminer les angles dynamiques et quantifier CAH. Dans le cadre de cette thèse, seules les deux méthodes les plus couramment utilisées sont présentées et illustrées dans la figure 1.7.

1. La méthode de détermination par inclinaison repose sur les effets de pesanteur en tant que sollicitation uniforme sur la goutte. Cette méthode consiste à incliner la plaque sur laquelle a été déposée la goutte sessile, suivant l'angle d'inclinaison α. L'inclinaison est réalisée de manière progressive jusqu'à $\alpha = 90°$, où la composante parallèle à la surface des forces de pesanteur est maximale. Au cours de l'inclinaison, les effets de la pesanteur vont déformer l'interface liquide-vapeur jusqu'au décrochage de la goutte. Lorsque la ligne triple se déplace, il est possible de mesurer les angles d'avancée et de reculée [12]. Il existe une limite majeure à l'utilisation de cette méthode. En effet, si la goutte est très adhérente, il est possible de ne pas observer de décrochage [12]. Il est alors nécessaire d'employer une autre méthode de détermination. De plus, les angles d'avancée et de reculée étant mesurés au cours d'un unique essai, les deux mesures sont interdependantes.

2. Une deuxième méthode consiste à caractériser les angles θ_a et θ_r par variation du volume de goutte. Dans un premier temps, le volume de la goutte est augmenté jusqu'à forcer le

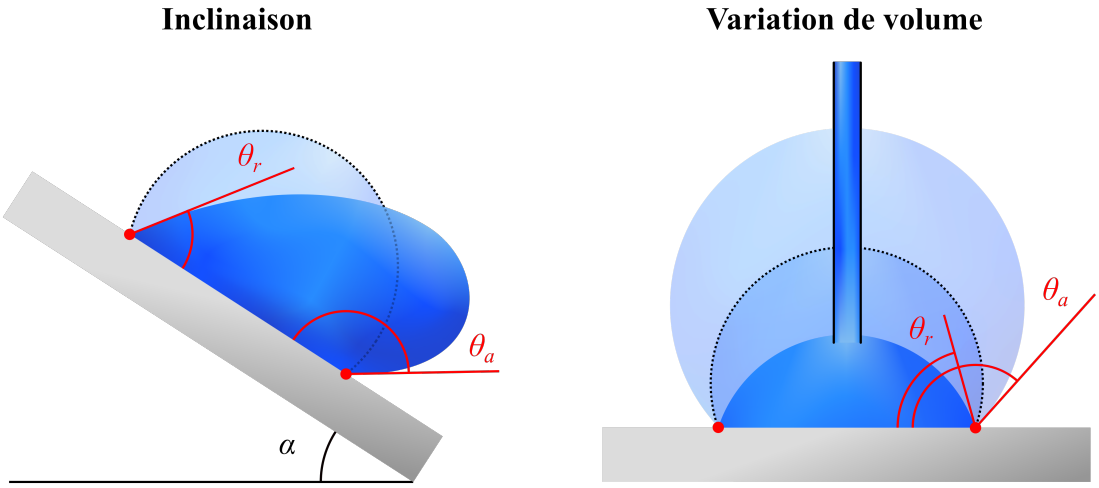

Figure 1.7 : Illustration des méthodes de détermination de l'hystérèse d'angle de contact par inclinaison et variation de volume.

déplacement de la ligne triple et ainsi mesurer l'angle d'avancée. Ensuite, le volume de la goutte est diminué. De manière analogue, lorsque la goutte se résorbe et la ligne triple se déplace, il est possible de mesurer l'angle de reculée.
Cette méthode possède également un désavantage majeur. En effet, pour faire varier le volume, la présence d'une aiguille dans la goutte est nécessaire durant toute l'expérience. La présence de l'aiguille induit une déformation de l'interface qui peut influer sur la mesure de l'angle de contact. Ce problème est particulièrement impactant pour les cas avec une faible valeur de θ_r, et donc, par extension, pour les cas où l'hystérèse est très élevée [10].

Chacune des expériences de mesure des angles d'avancée et de reculée comporte des inconvénients différents qui peuvent entraîner des différences de valeurs en fonction de la méthode utilisée [10, 12]. De manière générale, il est donc fortement recommandé de comparer les valeurs de ces angles pour une même méthode de mesure.

Enfin, cette notion d'hystérèse d'angle de contact est primordiale pour comprendre et définir les surfaces super-hydrophobes, fortement étudiées en science des matériaux. En effet, la super-hydrophobie, qui se traduit par des gouttes faiblement adhérentes au solide, est définie sous conditions d'un angle d'équilibre élevé et d'une hystérèse très faible. En général, il est considéré que la super-hydrophobie est atteinte si $\theta_e > 150°$ et $\Delta\theta < 10°$ [13, 14].

1.3 Théories du mouillage

Différentes approches et théorie ont été proposées pour modéliser le mouillage d'une goutte liquide sur un substrat solide. Dans cette partie, un état de l'art des principales théories du mouillage statique et dynamique est présenté.

1.3.1 Equilibre statique de Young

Pour commencer, les premiers travaux sur la mouillabilité s'intéressent à décrire le comportement d'une goutte en équilibre statique sur une surface solide. Le premier modèle énoncé par

Young en 1805 propose de relier l'angle de contact à l'équilibre θ_Y aux tensions superficielles [15]. À condition de supposer la surface comme étant parfaitement plane et chimiquement homogène, θ_Y est exprimé par l'équilibre mécanique des forces capillaires au niveau de la ligne triple, comme illustré dans la figure 1.8.

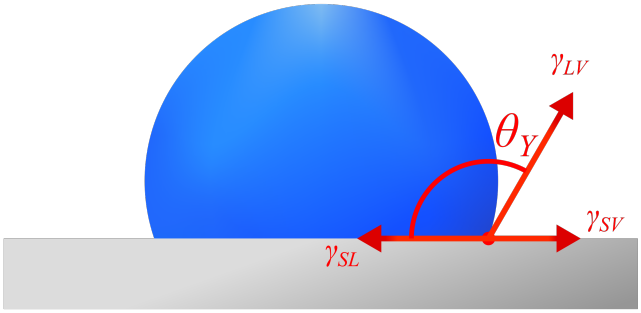

Figure 1.8 : Représentation de l'équilibre des tensions superficielles au niveau de la ligne triple et de l'angle de contact θ_Y comme défini dans la loi de Young.

En appliquant le principe fondamental de la dynamique, il est possible d'écrire le bilan des forces capillaires projeté suivant l'axe horizontal.

$$\gamma_{SV} - \gamma_{SL} - \gamma_{LV} \cos\theta_Y = 0 \tag{1.17}$$

Ainsi, en réécrivant l'expression, la loi de Young s'écrit telle que :

$$\cos\theta_Y = \frac{\gamma_{SV} - \gamma_{SL}}{\gamma_{LV}} \tag{1.18}$$

Parallèlement, Dupré exprime le travail d'adhésion entre un matériau 1 et un matériau 2 en fonction des tensions de surface selon l'expression [16] :

$$W_{12} = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{12} \tag{1.19}$$

Dans le cas du travail d'adhésion entre un liquide et une surface solide, noté W_{SL}, l'expression de Dupré peut s'écrire sous la forme suivante :

$$W_{SL} = \gamma_{SV} + \gamma_{LV} - \gamma_{SL} \tag{1.20}$$

Ainsi, en associant la loi de Young au travail d'adhésion W_{SL}, il est possible d'écrire l'équation de Young-Dupré [16] :

$$W_{SL} = \gamma_{LV} \left(1 + \cos\theta_Y\right) \tag{1.21}$$

Par construction, l'angle de Young θ_Y est un angle de contact intrinsèque, défini localement au niveau de la ligne triple, qui dépend uniquement des interactions chimiques entre les trois milieux composant le système. Il est donc important de différencier l'angle de contact intrinsèque θ_Y et l'angle de contact d'équilibre macroscopique θ_e observé expérimentalement. Cet angle intrinsèque est inaccessible expérimentalement bien qu'il puisse être approché pour des

substrats polis miroirs composés d'une chimie homogène, à condition de pouvoir assurer de l'absence de contaminations.
Enfin, au vu des hypothèses sur la planéité et l'homogénéité de la surface, aucune notion d'hystérèse ne peut être considérée. Cependant, le modèle de Young est la base de nombreux modèles ayant été développés par la suite pour traiter des surfaces texturées chimiquement ou topographiquement. Parmi les différents modèles théoriques du mouillage, il est possible de dissocier deux types de modèles : les approches par aire de contact et les approches par ligne triple.

1.3.2 Approche par aire de contact

Dès le 20ème siècle, plusieurs études expérimentales ont mis en avant le rôle de la rugosité sur le mouillage [3]. Il est alors question de développer le modèle de Young aux surfaces texturées topographiquement et chimiquement. Historiquement, les premiers modèles proposés sont construits suivant une approche par aire de contact.

1.3.2.1 Modèle de Wenzel

En 1936, Wenzel modélise le mouillage d'une goutte sur une surface rugeuse, mais parfaitement homogène chimiquement [17]. L'angle de contact à l'équilibre sur surface texturée, déterminé par le modèle de Wenzel est noté θ_W. Sous l'hypothèse que le liquide imprègne complètement la surface solide, le modèle relie l'angle de contact statique à un paramètre de rugosité r_W. La rugosité au sens de Wenzel r_W est définie comme le rapport de l'aire de la surface réelle sur l'aire projetée. Par construction r_W est toujours supérieur à 1, ou égal à 1 dans le cas particulier d'une surface parfaitement plane.

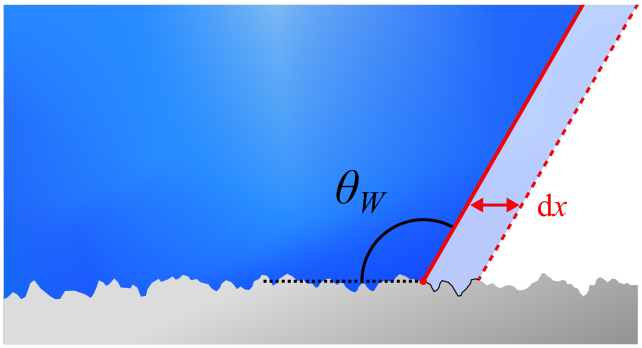

Figure 1.9 : Illustration d'un déplacement infinitésimal $\mathrm{d}x$ dans le cadre de la démonstration du modèle de Wenzel sur surface rugueuse.

Il est possible de démontrer le modèle de Wenzel en considèrent un déplacement infinitésimal $\mathrm{d}x$ de la ligne triple, dont le périmètre est noté L. Ainsi, lors de ce déplacement $\mathrm{d}x$, il est possible d'exprimer la variation d'énergie $\mathrm{d}E$ associée à l'accroissement de surface mouillée.

$$\mathrm{d}E = r_W \left(\gamma_{SL} - \gamma_{SV}\right) L \, \mathrm{d}x + \gamma_{LV} \cos\theta_W \, L \, \mathrm{d}x \tag{1.22}$$

D'après le théorème des travaux virtuels, la variation d'énergie est nulle à l'équilibre. Ce qui permet d'écrire le modèle de Wenzel tel que :

$$\cos\theta_W = r_W \frac{\gamma_{SV} - \gamma_{SL}}{\gamma_{LV}} \tag{1.23}$$

Enfin, le modèle de Wenzel peut être réécrit en incorporant l'expression de la loi de Young (1.18).

$$\cos\theta_W = r_W \cdot \cos\theta_Y \tag{1.24}$$

Par construction, d'après Wenzel, la rugosité amplifie le caractère intrinsèque du matériau en augmentant l'aire de l'interface liquide-solide. Ainsi pour une chimie hydrophile, l'angle apparent θ_W est inférieur à θ_Y. Et inversement, pour une chimie hydrophobe θ_W est supérieur à θ_Y. Dans le cas particulier d'un angle intrinsèque $\theta_Y = 90°$, le modèle de Wenzel ne prédit aucune modification du comportement de mouillabilité quelles que soient les modifications topographiques.
Cependant, il est important de rappeler une hypothèse limitante du modèle de Wenzel, qui considère que la goutte liquide imprègne parfaitement la surface solide. Par extension, le régime de mouillage associé est communément appelé l'état Wenzel.

1.3.2.2 Modèle de Cassie-Baxter

Un second modèle, proposé en 1944 par Cassie et Baxter, étend le modèle de Young à une surface chimiquement hétérogène [18]. Comme pour le modèle de Young, la surface est toujours supposée parfaitement plane. Ils proposent d'appliquer une loi des mélanges à la contribution chimique du solide sur l'angle de contact à l'équilibre. Ainsi l'angle de contact de Cassie-Baxter θ_{CB} dépend de θ_Y de chaque chimie, respectivement pondéré par la fraction surfacique correspondante.

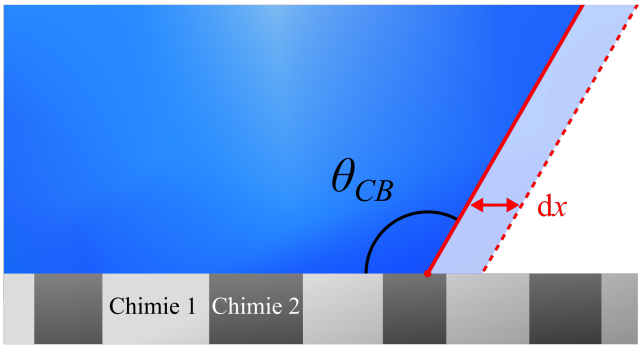

Figure 1.10 : Illustration d'un déplacement infinitésimal $\mathrm{d}x$ dans le cadre de la démonstration du modèle de Cassie-Baxter sur un substrat plan constitué de deux chimies différentes.

De manière analogue au modèle de Wenzel, il est possible de démontrer le modèle de Cassie-Baxter en étudiant la variation d'énergie $\mathrm{d}E$ lors d'un déplacement infinitésimal $\mathrm{d}x$ de l'interface. Dans le cas d'un substrat constitué de deux chimies, la variation d'énergie s'exprime sous la forme suivante :

$$\mathrm{d}E = \phi_1 \left(\gamma_{SL,1} - \gamma_{SV,1}\right) L\ \mathrm{d}x + \phi_2 \left(\gamma_{SL,2} - \gamma_{SV,2}\right) L\ \mathrm{d}x + \gamma_{LV} \cos\theta_{CB}\ L\ \mathrm{d}x \tag{1.25}$$

Avec ϕ_1 et ϕ_2, les fractions surfaciques associées a chaque chimie. Par définition, la somme des fractions surfaciques vaut 1.
En appliquant le théorème des travaux virtuels et en réécrivant l'expression en fonction des angles de Young des différentes chimies $\theta_{Y,1}$ et $\theta_{Y,2}$, il est possible d'exprimer θ_{CB}.

$$\cos\theta_{CB} = \phi_1 \cos\theta_{Y,1} + \phi_2 \cos\theta_{Y,2} \tag{1.26}$$

En tant que loi de mélange, le modèle de Cassie-Baxter est aisément généralisable pour n matériaux.

$$\cos\theta_{CB} = \sum^{n} \phi_n \cos\theta_{Y,n} \tag{1.27}$$

Dans son approche initiale, le modèle de Cassie-Baxter modélise le mouillage sur une surface plane hétérogène chimiquement. En revanche, en suivant la même philosophie, il est possible de modéliser une surface texturée topographiquement. En effet, il est possible d'appliquer le modèle en considérant l'aire comme une des chimies composant le substrat, à condition que la goutte s'ancre aux sommets des textures. Le régime de mouillage associé, où le liquide est en suspension aux sommets des textures et piégeant de l'aire sous la goutte, est communément désigné état Cassie-Baxter.
Dans cette configuration, l'angle de contact entre le liquide et l'air est considéré égale à $180°$, étant donné qu'une goutte de liquide libre dans l'air prend une forme sphérique. De plus, par définition, la somme des fractions surfaciques est égale à 1. La fraction surfacique de la goutte en contact avec l'air s'écrit $\phi_{air} = 1 - \phi_S$, avec ϕ_S la fraction solide. Le modèle de Cassie-Baxter appliqué à une surface texturée topographiquement est donc défini tel que :

$$\cos\theta_{CB} = -1 + \phi_S\left(\cos\theta_Y + 1\right) \tag{1.28}$$

Lorsqu'il est utilisé pour modéliser le comportement d'une goutte sur une surface texturée topographiquement, le modèle de Cassie-Baxter prédit toujours un angle de contact θ_{CB} supérieur à θ_Y.

1.3.2.3 Modèle mixte

En pratique, les états Wenzel et Cassie-Baxter étant des régimes de mouillage idéaux, il est courant d'observer des configurations d'ancrage intermédiaires [19, 20]. En couplant les approches par aire de contact de Wenzel et Cassie-Baxter, un modèle général applicable aux régimes mixtes peut être défini. L'angle de contact à l'équilibre θ_e peut donc être déterminé par l'équation suivante :

$$\cos\theta_e = r_\phi\left(\phi_S\cos\theta_Y\right) + \left(\phi_S - 1\right) \tag{1.29}$$

Avec ϕ_S la fraction du solide mouillé et r_ϕ la rugosité au sens de Wenzel pour la fraction solide mouillée, comme illustré dans la figure 1.11.

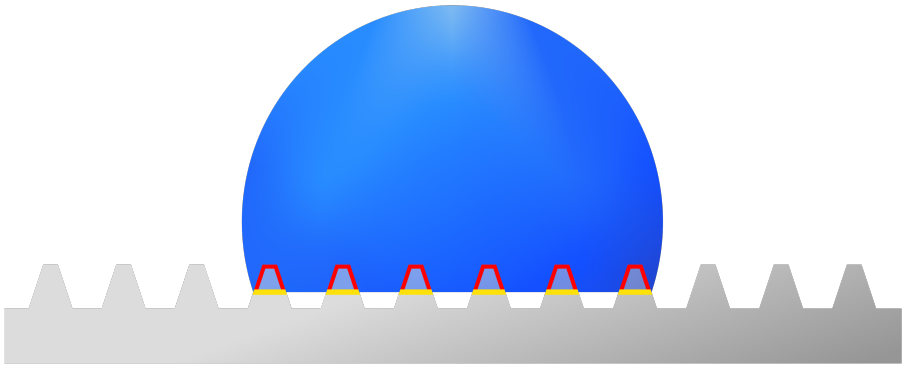

Figure 1.11 : Représentation schématique d'un régime de mouillage mixte.

Cette équation générale permet de retrouver à la fois le modèle de Wenzel et le modèle de Cassie-Baxter. En effet, si la goutte imprègne parfaitement la surface solide, ϕ_S vaut 1 et l'équation devient l'expression du modèle de Wenzel (1.24). À l'opposé, si la rugosité associée à la fraction solide $r_\phi = 1$, cela signifie que la goutte repose sur le sommet des textures. Dans

ce cas, l'équation est équivalente au modèle de Cassie-Baxter dans le cas d'une surface texturée topographiquement (1.28).

1.3.3 Approche par ligne triple

Une seconde approche, généralement qualifiée d'approche par ligne triple, considère que le comportement apparent d'une goutte en mouillage est uniquement le résultat des interactions locales au niveau de la ligne triple. Cette approche, s'opposant à l'approche par aire de contact, est initialement proposée pour expliquer les phénomènes d'hystérésis d'angle de contact [21]. Dès 1953, Bartell et Shepard proposent une expérience pour démontrer que les phénomènes de mouillabilité sont dépendants des phénomènes de ligne triple et non de l'aire de contact [22].

Dans un premier temps, l'expérience de Bartell et Shepard consiste à mesurer l'angle d'avancée pour trois surfaces. Le premier substrat est une surface de paraffine lisse avec $\theta_{a,1} = 98°$. Pour le second substrat, ils choisissent de modifier la rugosité de la surface de paraffine mécaniquement, l'angle d'avancée mesuré vaut alors $\theta_{a,2} = 145°$. Un troisième substrat est réalisé en formant un îlot rugueux au centre d'une surface lisse de paraffine. Pour cette surface, une goutte de dimension inférieure à l'îlot central est déposée. Puis, ils augmentent le volume de la goutte pour mesurer l'angle d'avancée. Jusqu'à atteindre la frontière de l'îlot, l'angle d'avancée vaut $\theta_{a,2}$. Une fois la ligne de base de la goutte supérieure à la largeur de l'îlot, l'angle d'avancée mesuré correspond à $\theta_{a,1}$, comme illustré dans la figure 1.12. Or d'après le modèle de Cassie-Baxter, l'angle mesuré devrait être fortement affecté par la chimie de l'îlot proportionnellement à la fraction surfacique associée. Ils en concluent que seules les interactions au niveau de la ligne triple déterminent les angles de contact apparents et la forme de la goutte.

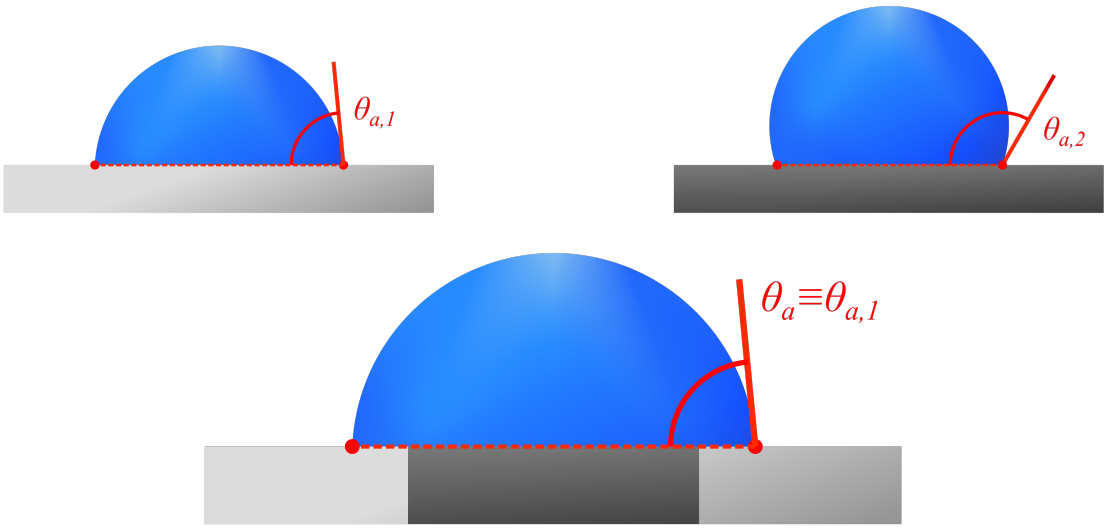

Figure 1.12 : Illustration des expériences démontrant l'approche par ligne triple.

Extrand en 2003 [23], puis Gao et MacCarthy en 2007 [24], renforcent cette approche en mettant en défaut les modèles par aire de contact suivant des expériences similaires, pour des texturations chimiques et topographiques.

1.3.4 Approche hybride

Bien que remis en question, les modèles par aire de contact restent pertinents dans de nombreuses configurations [25–27]. De plus, il est important de souligner que le modèle de Wenzel

a été énoncé dans le cadre de surfaces issues de rugosité non-déterministe, avec un grand nombre d'aspérités sous la goutte. Ainsi, il est nécessaire de se questionner sur le domaine de validité des modèles de Wenzel et Cassie-Baxter.

Selon Marmur, les modèles par aire de contact conservent leur validité si la périodicité des textures est d'un ordre de grandeur très inférieur à la goutte. Dans ces conditions, les effets de ligne triple sont négligeables. Au contraire, les modèles par aire de contact ne sont pas applicables dans des cas similaires aux expériences de Bartell et Shepard, où l'îlot est du même ordre de grandeur que la goutte.
Dans le but de concilier les deux approches, Bormashenko propose de modéliser le mouillage à partir du modèle mixte par aire de contact (1.29) en incluant un terme dépendant de la ligne triple [28]. Il établit donc une équation générale du mouillage pour déterminer l'angle de contact statique apparent :

$$\cos\theta_e = r_\phi\left(\phi_S\cos\theta_Y\right) + \left(\phi_S - 1\right) - \frac{\Gamma}{\gamma_{LV}}\left(\xi + \frac{1}{R_b}\right) \tag{1.30}$$

Dans cette équation, il définit différents termes associés à la ligne triple, Γ représente la tension de la ligne triple et R_b correspond au rayon de base de la goutte soit la moitié de la longueur de ligne de base. Enfin, ξ est le rapport du périmètre de ligne triple divisé par unités d'aire sous la goutte, permettant d'introduire à la fois les effets liés à la ligne triple externe et interne, illustrée dans la figure 1.13.

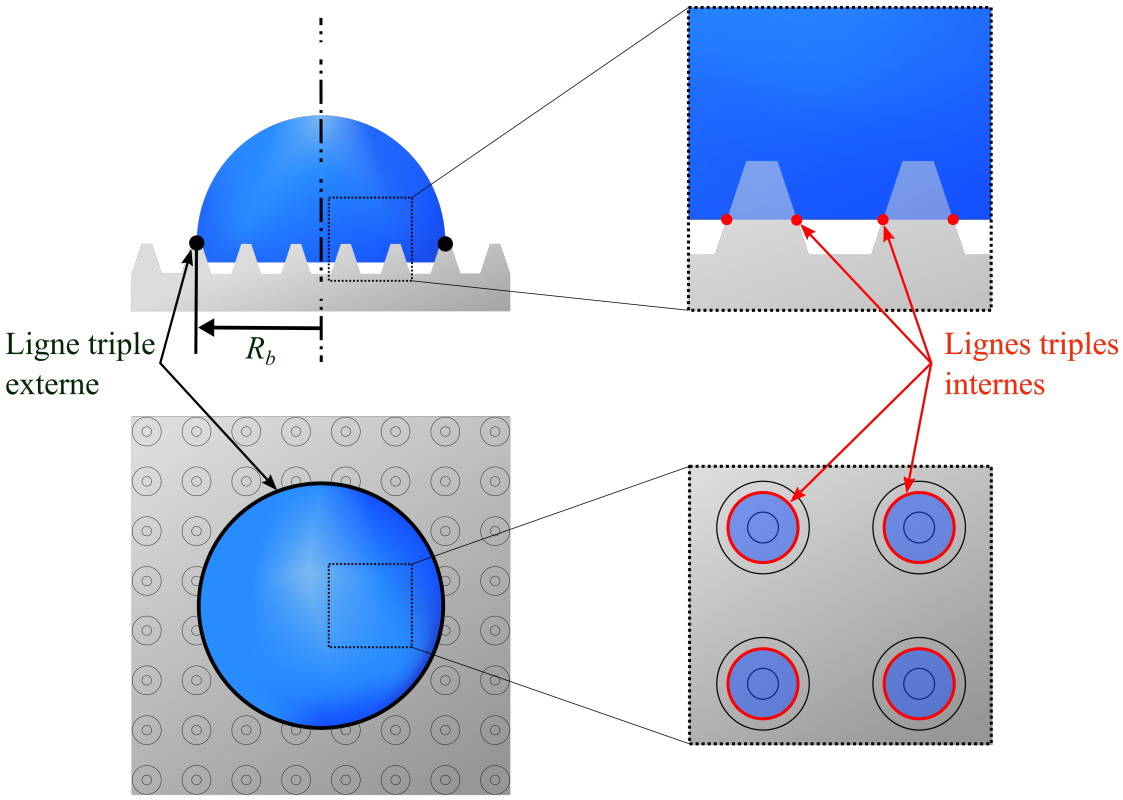

Figure 1.13 : Illustration de l'ancrage d'une goutte sur une surface texturée avec une représentation de la ligne triple totale, adaptée de [28].

Dans son modèle général, Bormashenko fait intervenir la notion de tension de ligne triple Γ. Telle que définie initialement par Gibbs, la tension de ligne triple représente l'excès d'énergie

libre des particules au sein de l'interface liquide-solide-vapeur [29]. Par nature, la tension de ligne est plus importante quand le rayon de base de la goutte est petit, autrement dit quand la courbure est grande.

1.3.5 Transition entre les régimes de mouillage

Lors d'un dépôt d'une goutte sur un substrat solide texturé, l'état Cassie-Baxter et l'état Wenzel sont en compétition pour déterminer le régime d'équilibre de la goutte. Ces deux états décrivant des comportements aux propriétés totalement opposées, il est crucial de pouvoir prédire l'état d'équilibre pour un couple goutte-substrat.

En 1953, Johnson et Dettre proposent d'étudier expérimentalement la transition de l'état Cassie-Baxter vers l'état Wenzel en diminuant progressivement la rugosité de leur surface [30]. Cette expérience dont les résultats sont retranscrits dans la courbe de la figure 1.14, montre le changement caractéristique des propriétés de mouillabilité en fonction du régime de mouillage. En effet, l'état Cassie-Baxter est caractérisé par des angles de contact élevés et une hystérèse faible. Au contraire, l'état Wenzel présente des angles de contact plus faibles et une hystérèse plus élevée.

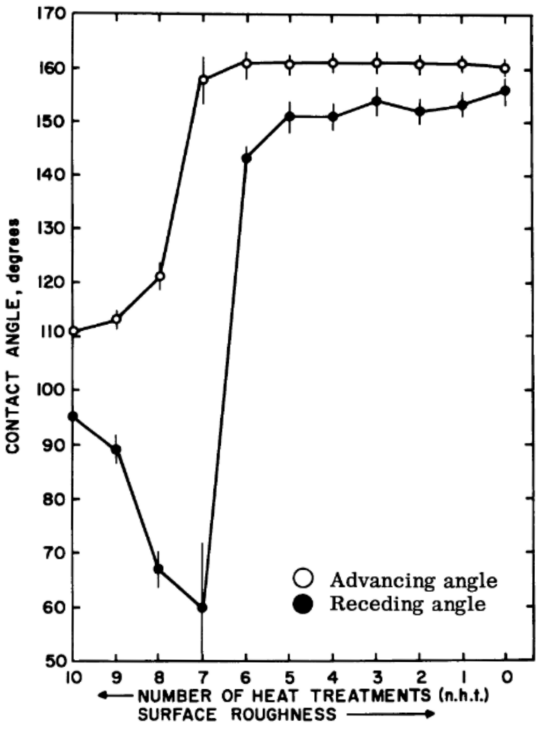

Figure 1.14 : Évolution de l'hystérèse d'angle de contact en fonction de la rugosité [30].

Cette transition a également été étudiée d'un point de vue théorique. D'après l'approche par aire de contact, il est possible de déterminer les domaines de stabilité de chacun des régimes de mouillage. En effet, par construction, le modèle mixte admet l'existence d'un seuil de transition. À partir de l'expression de modèle mixte (1.29), Marmur définit l'angle critique θ_c, en dessous duquel la goutte transite de l'état Cassie-Baxter à l'état Wenzel [20].

$$\cos\theta_c = \frac{\phi_S - 1}{r_\phi - \phi_S} \tag{1.31}$$

Comme cet angle de contact critique est défini par les modèles de Wenzel et de Cassie-Baxter, il est conditionné aux mêmes limites et ne tient pas en compte des effets de la triple ligne. Différents travaux proposent d'étudier la transition entre les régimes de mouillage de manière plus approfondie [31–34].

Suivant une approche mécanique locale au niveau de la ligne triple, Extrand propose d'étudier l'imprégnation du liquide dans les textures [35, 36]. Selon ces travaux, la transition vers l'état Wenzel se produit lorsque les forces de pesanteur deviennent prépondérantes sur l'équilibre de la ligne triple, devant les forces de tension superficielle. Pour présenter son modèle, Extrand se place dans le cas d'un réseau de plots, tel qu'illustré dans la figure 1.15. Dans cette configuration modèle, il définit plusieurs paramètres géométriques pour décrire la surface. Les plots sont définis par leur largeur au sommet X_p, leur espacement dans le réseau Y_p et leur hauteur Z_p. Il définit également les angles ϕ_p et ω_p respectivement au sommet et au pied des plots. Ces deux angles sont liés par l'égalité $\phi_p = 180° - \omega_p$.

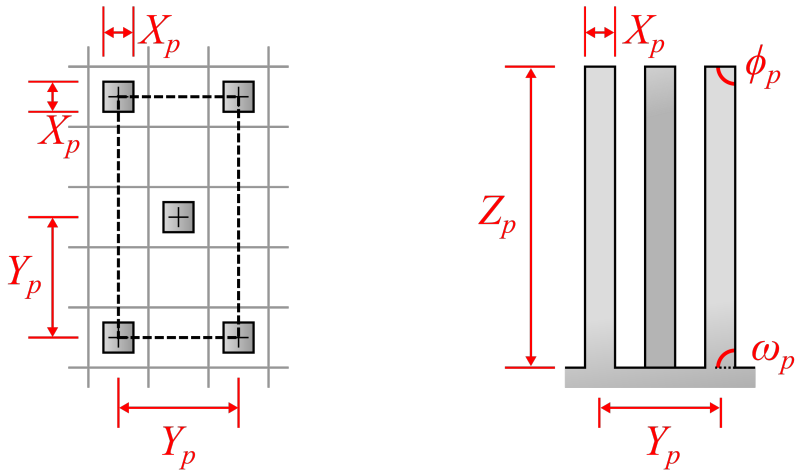

Figure 1.15 : Schéma de la configuration géométrique utilisée par Extrand pour exprimer son modèle, reproduit à partir de [35].

Pour cette géométrie, il est possible de définir la densité de plots δ_p, telle que :

$$\delta_p = \frac{1}{Y_p^2} \tag{1.32}$$

De plus, Extrand propose de définir un nouveau paramètre, qu'il nomme la densité de ligne de contact Λ. Cette dernière s'exprime en fonction de la densité de plot δ_p et du périmètre du sommet d'un plot, noté L_p.

$$\Lambda = L_p \, \delta_p \tag{1.33}$$

Pour la configuration géométrique représentée sur la figure 1.15, la densité de ligne triple vaut :

$$\Lambda = \frac{4 \, X_p}{Y_p^2} \tag{1.34}$$

En calculant l'équilibre des forces, Extrand identifie une densité de ligne triple critique Λ_c, qui détermine le seuil de transition entre l'état suspendu de Cassie-Baxter et l'état imprégné de

Wenzel. Dans ses travaux, il considère l'équilibre entre les forces de pesanteur F_g et les forces de surface F_s.

$$F_g = \rho\, g\, V \tag{1.35}$$

$$F_s = -\Lambda\, A_{wet}\, \gamma_{LV} \cos\theta_e \tag{1.36}$$

Avec A_{wet} la surface de contact mouillé, et θ_e l'angle de contact apparent. Dans cette configuration, Extrand propose d'exprimer θ_e en fonction de la géométrie des plots et de $\theta_{a,0}$ l'angle de contact à l'avancée pour un substrat de chimie identique, mais sans texturation :

$$\theta_e = \theta_{a,0} + \frac{\pi}{2} - \phi_p = \theta_{a,0} + \omega_p - \frac{\pi}{2} \tag{1.37}$$

Toujours dans le cadre de gouttes de volume suffisamment faible, les effets de la gravité sur la courbure de la goutte sont négligeables. Sous cette condition, il est possible de faire l'hypothèse d'une goutte sous la forme d'une calotte sphérique. L'aire de contact mouillée peut être exprimée en fonction du volume de goutte V :

$$A_{wet} = \pi^{\frac{1}{3}} \left(6\, V\right)^{\frac{2}{3}} \left[\left(\frac{1-\cos\theta_a}{\sin\theta_a}\right)\left(3 + \left(\frac{1-\cos\theta_a}{\sin\theta_a}\right)^2\right)\right]^{-\frac{2}{3}} \tag{1.38}$$

Où θ_a correspond à l'angle d'avancée apparent sur la surface texturée.
Par définition, les forces de pesanteur (1.35) et les forces de surface (1.36) sont égales lorsque $\Lambda = \Lambda_c$. Il est donc possible de déterminer la densité de ligne triple critique Λ_c, à partir de l'égalité des forces en incorporant (1.37) et (1.38) dans le terme des forces de surfaces (1.36).

$$\Lambda_c = \frac{-\rho\, g\, V^{\frac{1}{3}} \left[\left(\frac{1-\cos\theta_a}{\sin\theta_a}\right)\left(3 + \left(\frac{1-\cos\theta_a}{\sin\theta_a}\right)\right)^2\right]^{\frac{2}{3}}}{\left(36\,\pi\right)^{\frac{1}{3}} \gamma_{LV} \cos\left(\theta_{a,0} + \omega_p - \frac{\pi}{2}\right)} \tag{1.39}$$

D'après les travaux d'Extrand, la goutte s'équilibre dans l'état Cassie-Baxter si $\Lambda > \Lambda_c > 0$. Inversement, si $\Lambda_c > \Lambda > 0$, la goutte imprègne la surface texturée et atteint l'état Wenzel.
En revanche, dans le cas où $\Lambda_c < 0$, il n'existe pas de domaine de validité du régime Cassie-Baxter. Pour assurer la positivité de Λ_c il est nécessaire que le dénominateur de l'expression (1.39) soit négatif, et donc $\cos\theta_e < 0$. Ceci permet d'exprimer une condition nécessaire, mais insuffisante sur l'angle de contact à l'avancée sur surface plane $\theta_{a,0}$:

$$\theta_{a,0} > \phi_p \tag{1.40}$$

Extrand définit une seconde condition à la stabilité de l'état Cassie-Baxter. Cette seconde condition porte sur la géométrie du ménisque de l'interface liquide-vapeur entre deux textures. En effet, si l'interface liquide-vapeur touche le fond de la texture, alors l'état Cassie-Baxter ne peut pas exister. Il en résulte une condition sur la hauteur du ménisque H_m comme représentée dans la figure 1.16.

$$Z_p > H_m \tag{1.41}$$

$$\text{avec} \qquad H_m = b \cdot \tan\left(\frac{\theta_{a,0} + \omega_p - \pi}{2}\right)$$

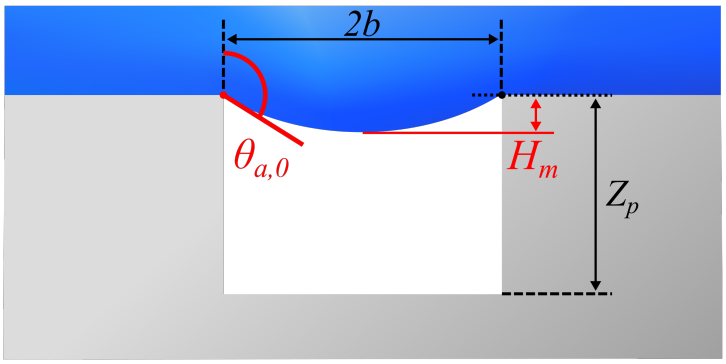

Figure 1.16 : Illustration de la seconde condition d'Extrand sur la hauteur critique du ménisque.

Où $2b$ représente l'espacement le plus grand entre deux textures voisines. Par exemple, dans le cas d'un réseau carré, cette distance correspond à la diagonale entre deux plots.
Les conditions définies par Extrand dans son modèle introduisent la possibilité de maîtriser les propriétés de mouillabilité des surfaces texturées, à travers le contrôle des pentes et des hauteurs des motifs texturés. De plus, il permet de mettre en évidence le rôle des surfaces réentrantes dans le maintien d'un état Cassie-Baxter métastable, comme illustré dans la figure 1.17. En effet, la présence de réentrance permet à des substrats avec une chimie hydrophile de maintenir une goutte suspendue.

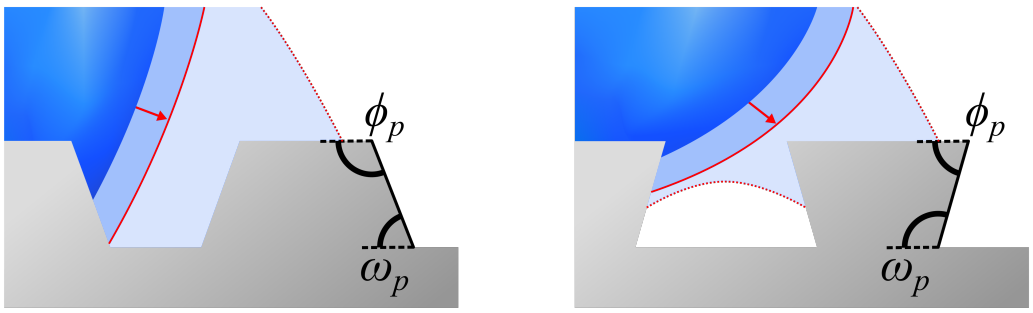

Figure 1.17 : Représentation de la dynamique d'étalement d'une goutte en fonction de la pente des motifs, illustrant l'apport des motifs réentrants sur l'état d'équilibre.

La stabilité de l'état Cassie-Baxter dans le cadre des surfaces réentrantes à également été étudiée par Bormashenko suivant une approche énergétique [37, 38]. Selon ces travaux, Bormashenko définit une condition similaire à la condition nécessaire, mais insuffisante d'Extrand (1.40). La condition de Bormashenko est établie en fonction de l'angle de contact intrinsèque θ_Y et de ϕ_0 l'angle à l'amorce de la cavité réentrante :

$$\theta_Y > \phi_0 \tag{1.42}$$

Dans le cas où la cavité a un angle constant, comme pour les différents motifs présentés dans les figures 1.16 et 1.17, alors $\phi_0 = \phi_p$.
En revanche, dans son approche, Bormashenko néglige les effets de la pesanteur sur l'ancrage,

contrairement à Extrand pour lequel la gravité joue un rôle crucial sur l'état d'équilibre. Malgré cette différence majeure, les deux approches s'accordent à conditionner la transition de l'état Cassie-Baxter vers Wenzel par un critère géométrique des textures. De plus, cette condition sur l'angle de réentrance, a également été observée expérimentalement [39].

1.3.6 Modélisation de l'hystérèse

Les principaux modèles de mouillage quasi-statique ayant été présentés, cette section se concentre sur la modélisation des propriétés dynamiques du mouillage, à travers la modélisation de l'hystérèse d'angle de contact. Comme expliqué précédemment, une goutte en équilibre sur une surface peut arborer une non-unicité d'angle d'équilibre qu'il est possible de borner par l'angle d'avancée θ_a et l'angle de reculée θ_r. L'hystérèse $\Delta\theta$ est définie comme la différence entre ces deux angles, dont l'origine est due aux hétérogénéités chimiques et topographiques de la surface.

Dans le but de maîtriser le comportement de mouillabilité des surfaces, il est important de pouvoir contrôler la valeur des angles de contact dynamiques. En effet, d'après Furmidge [40], la force d'adhésion d'une goutte sur une surface est reliée aux angles dynamiques, par la relation suivante :

$$F_{adh} = 2\ R_b\ \gamma_{LV}\ (\cos\theta_r - cos\theta_a) \tag{1.43}$$

Avec R_b, le rayon de base de goutte. Ainsi, pour générer une surface avec une faible adhésion liquide-solide, il est intéressant d'avoir des angles de contact élevés avec une hystérèse faible [40]. C'est à partir de cette considération que sont définies les conditions de la super-hydrophobie. Pour rappel, la super-hydrophobie est définie de manière arbitraire par $\theta_e > 150°$ et $\Delta\theta < 10°$, afin d'assurer la déperlance des gouttes.

En théorie, pour une surface parfaitement plane et chimiquement homogène l'hystérèse devrait être nulle. Ainsi, en 1984, Joanny et De Gennes attribuent l'hystérèse observée expérimentalement sur une surface plane à des défauts locaux de la surface, qu'il s'agisse d'aspérité rugueuse ou de contamination chimique [8]. Pour commencer, ils se placent dans le cas d'une surface plane avec un seul défaut local afin de déterminer la variation d'énergie associée à ce défaut. L'énergie totale dissipée W_d par le défaut est alors définie comme étant la somme de deux contributions :

1. L'énergie élastique, noté U_k, qui correspond à la déformation élastique de la ligne triple imposée par le défaut.
$$U_k = \frac{1}{2}\ k\ y^2 \tag{1.44}$$
Avec y la position de la ligne triple déformée et k une constante représentant la raideur de la ligne triple.

2. L'énergie d'adhésion associée à la surface du défaut couvert par le liquide, noté U_{adh}. Cette seconde composante énergétique dépend de la nature du défaut.

Joanny et De Gennes proposent de généraliser à une surface comportant plusieurs défauts aléatoires. Ils relient ainsi les angles de contact dynamique à l'énergie totale dissipée à condition de supposer une faible densité de défaut n.

$$\gamma_{LV}\ (\cos\theta_r - \cos\theta_a) = n\ W_d \tag{1.45}$$

Cette modélisation de l'hystérèse, permet de mettre en avant l'importance des phénomènes d'ancrage de ligne triple sur la dynamique de la goutte.

Les travaux de Joanny et De Gennes ont été initialement proposés pour étudier une surface plane avec une faible densité de défauts, avec une imprégnation totale de la goutte. Suivant la même approche, leur modèle de l'hystérèse a été étendu aux régimes suspendus [41, 42]. Pour une surface constituée d'un réseau de plots mouillant en régime Cassie-Baxter, Dubov propose de considérer cette surface équivalente à une surface d'air possédant des défauts locaux périodiques. Dubov développe son modèle en traitant le comportement à la reculée et à l'avancée indépendamment.
Premièrement, dans le cas d'un ancrage à la reculée de la ligne triple, l'énergie d'adhésion U_{adh} associée à un plot peut être exprimé en fonction de sa géométrie.

$$U_{adh} = -W_{SL}\, d\, (y - b) \tag{1.46}$$

Où W_{SL} représente le travail d'adhésion de Young-Dupré (1.21), d est définie comme étant la dimension du plot perpendiculaire au déplacement de la ligne triple. Enfin, b la position du plot et y la position de la ligne triple déformée sont définies par rapport à la position nominale de la ligne triple y_0, comme illustré dans la figure 1.18. Par construction, la déformée de la ligne triple est exprimée par $y - y_0$.

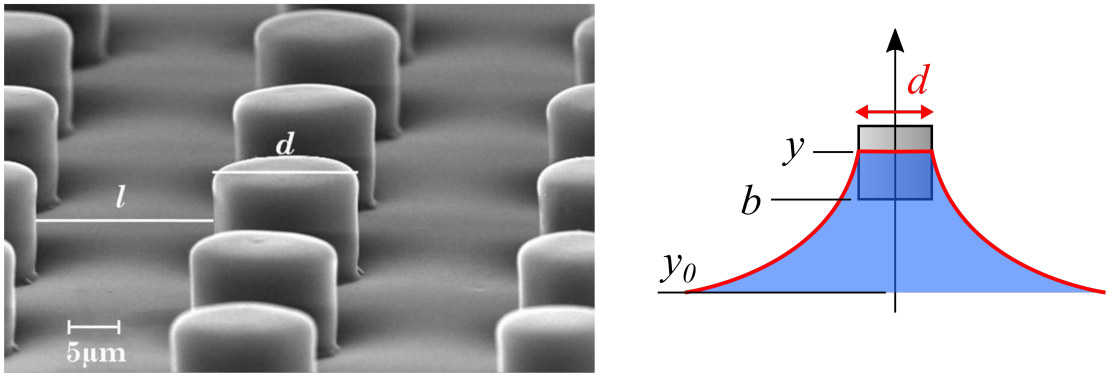

Figure 1.18 : Image MEB du réseau étudié par Dubov associé à la représentation de l'ancrage de la ligne triple sur un plot pour la reculée, issues de [41].

De manière analogue à l'expression proposée par Joanny et De Gennes (1.44), l'énergie élastique s'écrit en fonction de la raideur de la ligne triple k.

$$U_k = \frac{1}{2}\, k\, (y - y_0)^2 \tag{1.47}$$

L'énergie totale dissipée par un plot s'obtient en sommant (1.46) avec (1.47). D'après Dubov, il est possible d'exprimer l'état d'équilibre instable avant décrochage via la condition suivante :

$$k\, (y - y_0) = W_{SL}\, d \tag{1.48}$$

Ainsi, l'énergie élastique nécessaire à la rupture de l'ancrage sur le plot peut être exprimée en incorporant (1.48) dans (1.47).

$$U_k = \frac{1}{2} \frac{(W_{SL}\, d)^2}{k} \tag{1.49}$$

Pour provoquer le déplacement de la ligne triple, il est nécessaire de dépasser cette énergie élastique qui s'y oppose. En généralisant à la surface totale via la densité de plot n, le travail d'adhésion effectif à la reculée s'exprime tel que :

$$\gamma_{LV}\,(1+\cos\theta_r) = \frac{n}{2}\frac{(W_{SL}\,d)^2}{k} \tag{1.50}$$

Contrairement à l'ancrage lors de la reculée, durant l'avancée la déformation critique $y_c - y_0$ nécessaire pour décrocher la ligne triple est supposée être du même ordre de grandeur que l'espacement des plots l. En conséquence, il est possible d'exprimé $y_c - y_0$ en fonction de la géométrie du réseau de plots.

$$y_c - y_0 = \lambda\, l \tag{1.51}$$

Avec λ défini comme étant une constante géométrique d'ajustement, de l'ordre de l'unité. En pratique, Dubov fixe $\lambda = 1,5$ pour faire correspondre les valeurs prédites par son modèle à ses résultats expérimentaux. Cette valeur choisie arbitrairement peut-être discutée vis à vis de la distance $2\,b$ liée à la seconde condition d'Extrand (1.41), représentant le plus grand espacement entre deux plots dans le réseau. Pour un réseau carré, tel qu'étudié par Dubov, le plus grand espacement correspond à la diagonale, soit $2\,b = \sqrt{2}\,l \approx 1,4\,l$. Ceci pourrait apporter une piste d'explication de la valeur $\lambda = 1,5$.
Il est également possible d'exprimer la densité de plot n en fonction des paramètres géométriques du réseau tel que :

$$n = (d+l)^2 \tag{1.52}$$

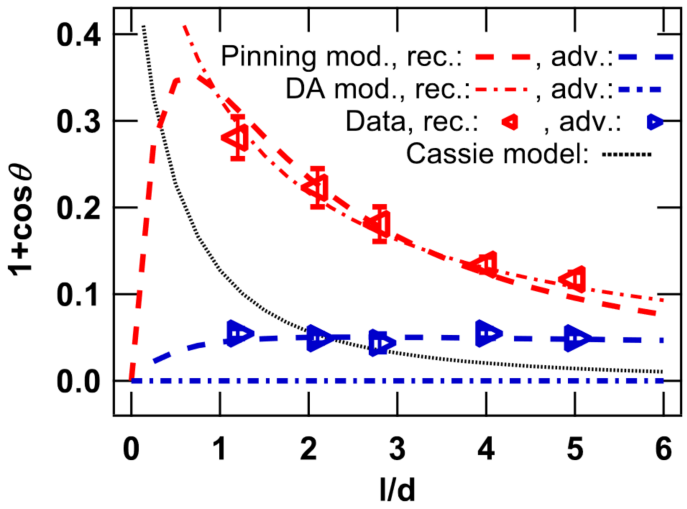

Figure 1.19 : Comparaison des valeurs expérimentales et des valeurs obtenues avec le modèle de Dubov en fonction de l'espacement des plots [41].

Dans ces travaux, Dubov applique son modèle pour prédire l'évolution de l'hystérèse en fonction de l'espacement l des plots pour une taille de plot d fixe. D'après l'expression de n, cela revient à faire varier la densité de plot. La figure 1.19 présente les résultats du modèle de Dubov en comparaison avec les valeurs expérimentales ainsi que d'autres modèles [18, 43]. Les résultats montrent que l'angle d'avancée conserve des valeurs très élevées quel que soit l'espacement des plots dans son système. En effet, d'après son modèle, la diminution de la densité de plot s'accompagne d'une augmentation de l'énergie élastique ce qui a pour nature d'annuler leur

contribution respective sur la valeur de l'angle d'avancée prédit. À l'inverse, l'angle de contact à la reculée augmente avec la diminution de la densité de plot. Il en résulte une diminution de l'hystérèse, et donc de l'adhésion de la goutte, avec la diminution de la densité de plot.
Ces résultats permettent d'établir des stratégies pour concevoir des surfaces avec une faible adhésion liquide-solide, à condition de pouvoir assurer la stabilité de l'état Cassie-Baxter.

1.4 Topographie des surfaces réelles

Comme exposé précédemment dans ce chapitre, la topographie de surface joue un rôle important sur les propriétés de mouillabilité des surfaces. En effet, pour prédire le comportement d'une goutte sur une surface texturée les modèles théoriques nécessitent d'en connaître précisément la morphologie. Dans le cas de surfaces modèles, composées d'une répétition de motifs, il est aisé de remonter aux paramètres morphologiques de la surface en fonction de la géométrie d'un motif et du réseau. En revanche, lorsqu'il s'agit d'étudier des surfaces réelles, il est crucial d'avoir accès à des paramètres généralisables afin d'analyser la topographie des surfaces étudiées.
La topographie 3D d'une surface peut être définie via un nuage de points dans un repère orthonormé. Chaque point d'échantillonnage, suivant un balayage en x et y de la surface, se voit attribuer une hauteur $Z(x, y)$. Cette définition de la topographie de surface est inhérente aux outils de caractérisation topographique, dont les plus courants sont : l'interférométrie optique, la profilométrie optique ou mécanique et la microscopie à force atomique.
Différents paramètres de rugosité peuvent être calculés à partir de la topographie de la surface. Cette partie est donc consacrée à la présentation des principaux paramètres de rugosité de surface, issues de la norme ISO 25178 [44].

Pour commencer, la hauteur arithmétique moyenne S_a est définie en moyennant les valeurs absolues des hauteurs de la surface étudiée, dont l'aire d'évaluation est notée A.

$$S_a = \frac{1}{A} \int_A |Z(x, y)| \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \tag{1.53}$$

Le paramètre S_a est couramment utilisé en science des matériaux. Pourtant, bien qu'il permette une comparaison quantitative de la rugosité d'une surface par rapport à une surface plane, ce paramètre n'apporte aucune information sur la morphologie de la surface. Par construction, plusieurs surfaces avec des valeurs de S_a similaires peuvent avoir des topographies totalement différentes.

Il existe d'autres paramètres de hauteur plus pertinents pour caractériser la morphologie d'une surface. En effet, à partir de la hauteur moyenne quadratique S_q, il est possible de construire le facteur d'asymétrie S_{sk} (*skewness*) et le facteur d'aplatissement S_{ku} (*kurtosis*). Pour un S_a équivalant, une surface avec une faible densité de grandes aspérités aura un S_q plus élevé qu'une surface avec une forte densité de petites aspérités.

$$S_q = \sqrt{\frac{1}{A} \iint_A Z^2(x, y) \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y} \tag{1.54}$$

$$S_{sk} = \frac{1}{S_q^3} \left(\frac{1}{A} \iint_A Z^3(x, y) \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \right) \tag{1.55}$$

$$S_{ku} = \frac{1}{S_q^4} \left(\frac{1}{A} \iint_A Z^4(x, y) \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \right) \tag{1.56}$$

Comme son nom l'indique le facteur d'asymétrie S_{sk}, renferme une information sur la symétrie de la distribution des hauteurs vis-à-vis du plan moyen, comme représenté dans la figure 1.20. Dans le cas d'une distribution parfaitement symétrique $S_{sk} = 0$. Si $S_{sk} > 0$, alors la portance mécanique de la surface mesurée est faible, avec une distribution décalée vers le fond des vallées. Au contraire, si $S_{sk} < 0$, la distribution est décalée vers le sommet des pics, ces surfaces ont une portance mécanique plus élevée.
De manière complémentaire, le facteur d'aplatissement S_{ku}, permet de se renseigner sur la morphologie de la distribution des hauteurs et donc indirectement sur la géométrie des pics et des vallées, comme illustré dans la figure 1.20. Une valeur seuil est définie pour $S_{ku} = 3$, correspondant au cas particulier d'une distribution de forme gaussienne. Comparativement, si $S_{ku} > 3$, alors la distribution autour du plan moyen est plus étroite que la forme gaussienne. Inversement, pour $S_{ku} < 3$, la distribution est plus large.

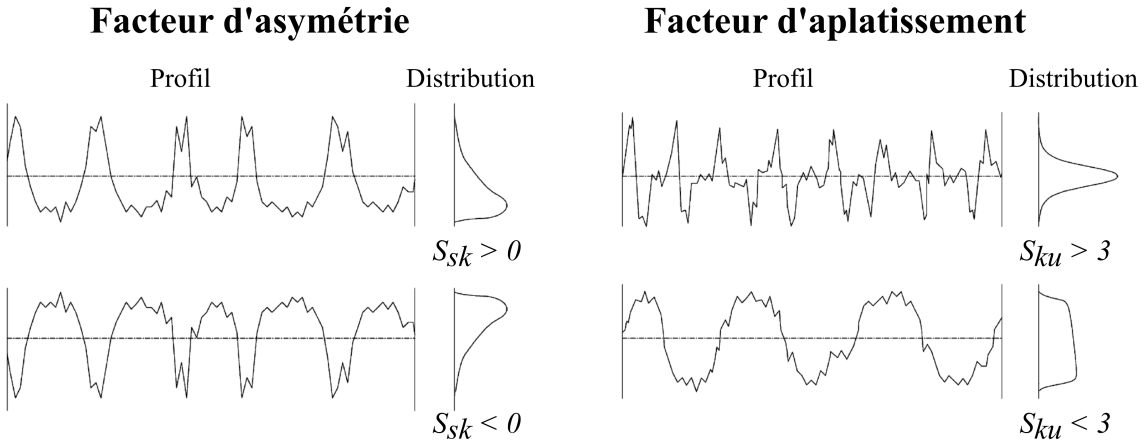

Figure 1.20 : Illustration en deux dimensions des paramètres S_{sk} et S_{ku}, repris de [45].

Ces deux paramètres détenant des informations indirectes sur la morphologie des rugosités, certaines études ont essayé d'établir un lien entre les valeurs de S_{sk} et S_{ku} des surfaces et leurs propriétés de mouillabilité [46, 47]. Par exemple, en étudiant la force d'adhésion de la glace sur des surfaces texturées, il a été montré que les surfaces avec des valeurs élevées de S_{sk} et S_{ku} présentent une faible adhésion de la glace [46].

Parmi les paramètres de rugosité liés à l'amplitude des rugosités, il est pertinent de présenter la courbe d'Abbott dont sont issus de nombreux paramètres fonctionnels. La courbe d'Abbott est construite en cumulant la distribution des hauteurs à partir du sommet de la surface, comme illustré dans la figure 1.21. Il s'agit d'un outil permettant de quantifier la répartition de la matière [48]. Cette courbe et les paramètres associés sont couramment utilisés dans l'industrie, notamment automobile, pour caractériser l'usure et le contact. Bien qu'inutilisée dans la littérature pour les études de la mouillabilité, la courbe d'Abbott détient des informations riches sur la portance de la surface, qui pourraient être utilisées pour caractériser l'imprégnation du liquide et la stabilité de l'ancrage en cas d'usure.

Comme montré dans plusieurs études, il est possible d'induire un comportement anisotrope du mouillage en fonction de l'anisotropie topographique de la surface [49, 50]. Ainsi, il est important de pouvoir caractériser l'anisotropie structurelle de la surface. Pour cela, il est possible de calculer le facteur de forme d'état S_{tr} qui renseigne sur l'anisotropie de la rugosité. Le S_{tr} est

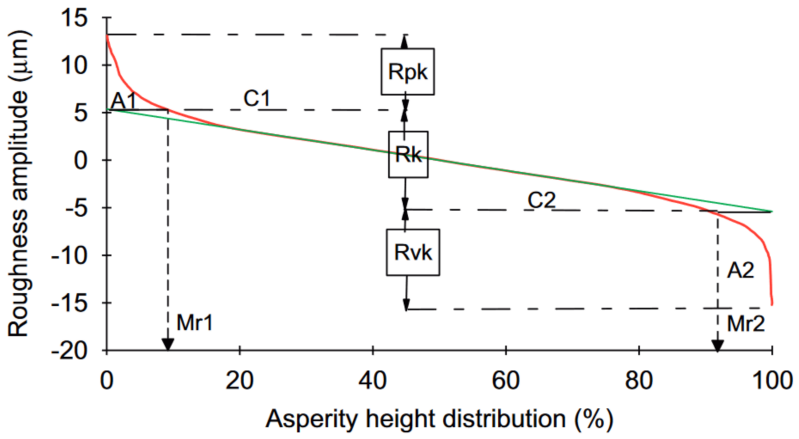

Figure 1.21 : Tracé de la courbe d'Abbott et représentation des paramètres de rugosités associés, issues de [48].

compris entre 0 et 1. Si la valeur est proche de 1, la surface est considérée isotrope. Au contraire, si la valeur est proche de 0, alors la surface présente une structure fortement anisotrope. Dans le cas d'une surface anisotrope, il est possible de calculer l'angle d'orientation avec le paramètre de directionnalité de la texture, noté S_{td}.

Enfin, le paramètre d'aire interfaciale développée S_{dr} permet de mesurer le taux d'accroissement de surface.

$$S_{dr} = \frac{1}{A} \iint_A \left(\sqrt{1 + \left(\frac{\partial Z(x,y)}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial Z(x,y)}{\partial y} \right)^2} - 1 \right) \mathrm{d}x \, \mathrm{d}y \tag{1.57}$$

Dans le cas idéal d'une surface parfaitement plane $S_{dr} = 0$. Une valeur de $S_{dr} = 0,75$ correspond à un accroissement de la surface due à la rugosité de 75%. De plus, le S_{dr} peut être relié au paramètre de rugosité r_W défini par Wenzel, par la relation suivante [51] :

$$r_W = S_{dr} + 1 \tag{1.58}$$

Chapitre 2

Méthode Lattice-Boltzmann

« Science is made up of so many things that appear obvious after they are explained. »

Frank Herbert, *Dune*

Sommaire

2.1 Comportement des fluides à l'échelle mésoscopique 42
2.1.1 Principe et échelle de description 42
2.1.2 Fonction de distribution 44
2.1.3 Equation de transport de Boltzmann 46
2.2 Méthode de discrétisation à l'échelle mésoscopique 46
2.2.1 Système de discrétisation 47
2.2.2 Discrétisation des équations 48
2.2.3 Opérateur de collision discrétisé 50
2.2.3.1 Cas de l'approximation de Bhatnagar-Gross-Krook 50
2.2.3.2 Extension aux modèles à taux de relaxation multiple 50
2.3 Application à l'étude de la mouillabilité 52
2.3.1 Conditions aux limites 52
2.3.2 Etude des systèmes Multi-Composants Multi-Phasiques 54
2.3.3 Modèle à pseudo-potentiel 55
2.3.3.1 Force d'interactions entre fluides 56
2.3.3.2 Force d'adhésion au solide 57
2.3.3.3 Schémas d'intégration des forces externes 58
2.3.3.4 Incorporation des équations d'états 59
2.3.3.5 Ajout d'interactions multi-distances 61
2.3.4 Synthèse de la méthode appliquée à la mouillabilité 62

Dans le cadre de cette thèse, une approche numérique de l'étude du mouillage est proposée, en appliquant la méthode Lattice-Boltzmann. Ce chapitre d'état de l'art est consacré à la présentation du modèle numérique. Dans une première partie, le principe physique et les origines de la méthode sont présentés. Ensuite, dans une deuxième partie, est définie la discrétisation des équations au cœur du modèle. Enfin, une troisième partie se concentre sur les particularités lors de l'application du modèle à l'étude du mouillage. Ce chapitre a pour objectif de donner les outils nécessaires à la compréhension de la méthode numérique utilisée dans les simulations produites durant cette thèse. Ainsi, les modèles utilisés sont présentés en considérant leurs limites, leurs extensions et certaines alternatives.

2.1 Comportement des fluides à l'échelle mésoscopique

2.1.1 Principe et échelle de description

Dans le but de décrire physiquement le comportement des fluides, il est important de saisir l'échelle des phénomènes étudiés et leurs échelles d'observation. En effet, pour définir le déplacement d'un fluide, différentes approches sont utilisées en fonction de l'échelle de description, comme représentées dans la figure 2.1.

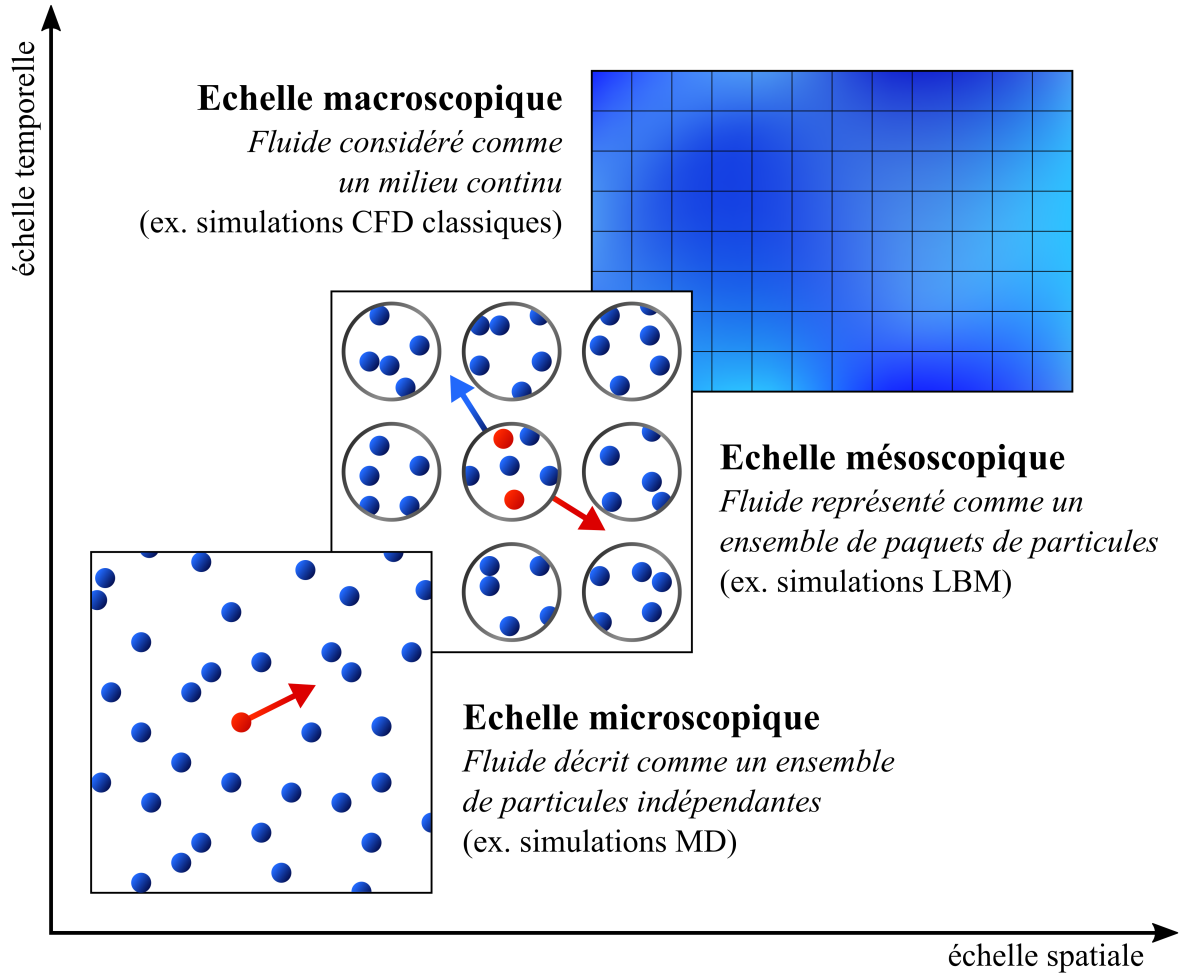

Figure 2.1 : Représentation des différentes échelles de description des fluides et les méthodes de simulation associées. Illustration adaptée de [52].

La première approche consiste à appréhender le problème sous sa forme continue, à l'échelle macroscopique. À cette échelle, les équations différentielles du problème sont construites en appliquant les lois de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour un volume élémentaire infinitésimal. Cependant, en raison de non-linéarité, de condition aux limites ou encore de géométrie complexe, ces équations différentielles peuvent se révéler très difficiles à résoudre. Pour dépasser ces adversités, des méthodes aux différences finies, éléments finis ou volumes finis sont appliquées pour convertir ces équations différentielles en un système d'équations algébriques. Moyennant l'utilisation de conditions initiales et de conditions aux limites spécifiques, le système d'équations obtenu peut alors être résolu de manière itérative. Une fois le domaine d'étude discrétisé, la résolution des équations permet de déterminer les grandeurs physiques du problème au sein d'un élément du domaine. Cette méthode de simulation macroscopique des fluides est communément désignée par le terme anglais *computational fluid dynamics* (CFD) [52]. Cette approche permet de simuler des écoulements sur de larges domaines spatiaux et temporels, tels que l'écoulement de l'air autour d'un bâtiment [53].

À l'opposé de la description continue d'un fluide, ce dernier peut être considéré comme un ensemble de particules à l'échelle microscopique. Ces particules, qu'il s'agisse d'atomes ou de molécules, se déplacent indépendamment et entrent en collision les unes avec les autres. À cette échelle, il est nécessaire de résoudre l'équation différentielle de la seconde Loi de Newton, traitant de la conservation de la quantité de mouvement, en fonction des forces d'interaction entre les particules. De cette façon, sont obtenues la position et la vitesse de chaque particule, composant le fluide, au cours du temps. Fondamentalement, il est nécessaire que le pas de temps du calcul soit inférieur au temps de collision des particules. En utilisant les principes de physique statistique, il est possible d'utiliser les propriétés des particules (masse, vitesse) pour remonter aux propriétés macroscopiques du fluide (viscosité, température, pression). Cette méthode de simulation, nommée *molecular dynamics* (MD), permet de traiter sans difficulté des changements de phase et des géométries complexes, à condition de définir les forces d'interactions appropriées. En revanche, le principal inconvénient est l'incapacité à simuler de larges domaines d'étude au vu du coût, en ressource de calcul, nécessaire au suivi de l'ensemble des particules [52].

À l'interface de ces deux approches, il existe des représentations à l'échelle mésoscopique, où le fluide est décrit comme un ensemble de paquet de particules. L'évolution de ces paquets de particules ou *distribution* de particules, a été formalisé à travers la théorie cinétique des gaz. C'est sur cette définition mésoscopique des fluides qu'est basée la méthode de Boltzmann sur réseau ou en anglais *lattice-Boltzmann method* (LBM). Cette méthode arbore des avantages issus des deux approches (macroscopique et microscopique) [52, 54]. En effet, la méthode est facilement applicable à des domaines avec des géométries complexes tout en conservant des conditions aux limites simples. Il est également possible d'étendre la méthode à l'étude de système multi-composants et multi-phases sans avoir à suivre l'interface, en définissant uniquement les interactions entre les particules. De plus, de par sa construction, la consommation de ressource en mémoire de calcul est inférieur à la MD bien que supérieur à la CFD. En revanche, la LBM est fortement parallélisable, ce qui signifie qu'une grande partie des calculs sont indépendants et peuvent être réalisés en parallèle réduisant considérablement le temps de calcul.

2.1.2 Fonction de distribution

Afin de bien comprendre les principes fondamentaux de la LBM, il est important de se familiariser avec la notion de *fonction de distribution* de particule définie par la théorie cinétique des gaz [52, 54]. La fonction de distribution de particule, notée $f(x, c, t)$, peut être conceptualisée comme étant une généralisation de la masse volumique $\rho(x, t)$, qui en plus de la position x et du temps t prend en compte la vitesse des particules c. Tandis que ρ représente la masse au sein d'un espace physique fini, la fonction de distribution f étend cette représentation à l'espace des vitesses. Ainsi, en 3 dimensions, la fonction de distribution $f(x, c, t)$ correspond à la densité de masse de particules ayant une vitesse spécifique $c = (c_x, c_y, c_z)$ à la position x et au temps t. Dans un espace de dimension d, l'unité de f s'exprime en $ML^{-2d}T^d$. En dimension 3, l'unité de f est donc le $kg \cdot m^{-6} \cdot s^3$.

$$[f] = kg \cdot \frac{1}{m^3} \cdot \frac{1}{(m \cdot s^{-1})^3} = \frac{kg \cdot s^3}{m^6} \tag{2.1}$$

Par construction, la fonction de distribution f peut être reliée aux variables macroscopiques du fluide telles que la masse volumique ou la vitesse. Ces grandeurs macroscopiques aussi désignées comme étant les moments hydrodynamiques de la fonction de distribution, sont obtenues par les intégrales de f, pondérées par des fonctions de la vitesse c, sur l'ensemble de l'espace des vitesses. Le premier moment hydrodynamique, la masse volumique macroscopique ρ, s'exprime en intégrant f dans l'espace des vitesses, de cette façon la contribution de chaque particule est considérée pour toute valeur possible de vitesse c à une position x et un temps t donnés.

$$\rho(x, t) = \int f(x, c, t) \, \mathrm{d}^3 c \tag{2.2}$$

Les autres moments peuvent être construits en suivant des mêmes considérations. Par exemple, la quantité de mouvement ρu, s'obtient en intégrant la contribution cf des particules pour l'ensemble des vitesses possibles.

$$\rho(x, t)u(x, t) = \int c \, f(x, c, t) \, \mathrm{d}^3 c \tag{2.3}$$

La quantité totale d'énergie E s'obtient également de manière similaire.

$$\rho(x, t)E(x, t) = \frac{1}{2} \int |c|^2 \, f(x, c, t) \, \mathrm{d}^3 c \tag{2.4}$$

L'énergie totale est composée d'une part de l'énergie cinétique, qui s'exprime sous la forme $(1/2)\rho \, |u|^2$, en raison des écoulements macroscopique du fluide. D'autre part, le reste de l'énergie totale correspond à l'énergie interne provenant des déplacements aléatoires, d'origine thermodynamique, des particules au sein du fluide. En introduisant, la vitesse relative v, il est possible d'exprimer directement l'énergie interne e.

$$\rho(x, t)e(x, t) = \frac{1}{2} \int |v|^2 \, f(x, c, t) \, \mathrm{d}^3 c \tag{2.5}$$

Où la vitesse relative v est définie telle que la déviation de la vitesse des particules par rapport à la vitesse locale moyenne.

$$v(x, t) = c(x, t) - u(x, t) \tag{2.6}$$

C'est en 1958 que Maxwell formalise l'utilisation de la fonction de distribution. En effet, pour gérer un très grand nombre de particules, le suivi indépendant des particules constituant

le fluide est trop complexe. L'idée est alors de moyenner le comportement de sous-ensembles de particules, pour être capable de traiter des systèmes macroscopiques. En connaissant les fonctions de distribution des particules dans le fluide, il n'est plus nécessaire de connaître la position et la vitesse de chaque particule à tout instant. Une bonne illustration, proposée dans [52], est de considérer une classe de 500 étudiants, prenant le rôle des particules. Si chacun des élèves pose une question simultanément, il n'en résulte que du bruit et le chaos, difficilement intelligible. En revanche, la question peut être posée par l'intermédiaire d'un représentant de la classe, qui peut alors être facilement compris et la réponse pourra satisfaire une majorité des élèves.

Au sein du gaz, les particules sont réparties parmi un large domaine de vitesse, avec un très grand nombre de vitesses et directions possibles. Les particules rapides transfèrent leur vitesse aux particules plus lentes lors de collisions. Ces collisions conservent la quantité de mouvement. En revanche, comme pour le cas de sphères dures illustré par la figure 2.2, la direction résultante de la collision des particules est très sensible à leurs positions relatives. Toutes ces collisions tendent à uniformiser la distribution angulaire des vitesses des particules autour de la vitesse moyenne locale u. Par conséquent, quand un gaz n'est soumis à aucune interaction extérieure suffisamment longtemps, il est considéré que la fonction de distribution $f(x, c, t)$ atteint une distribution à l'équilibre noté $f^{eq}(x, c, t)$.

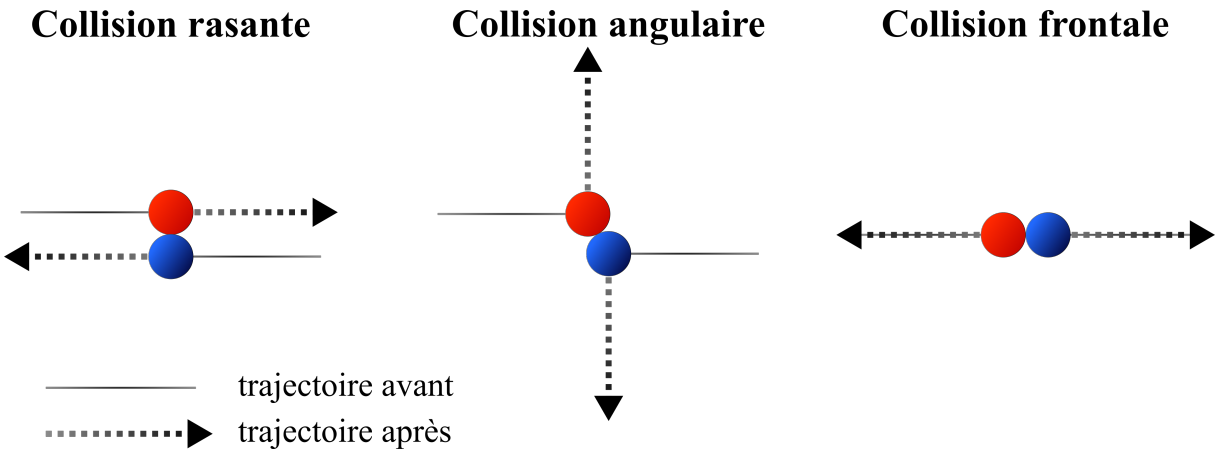

Figure 2.2 : Représentation des configurations de collision entre deux sphères dures, pour différentes positions relatives et l'influence sur la redirection des sphères, adaptée de [52].

Les contributions de Boltzmann, en matière de physique statistique, permettent de définir cette fonction de distribution à l'équilibre, également dénommée *Maxwell-Boltzmann distribution*. La fonction à l'équilibre f^{eq} peut être exprimée en fonction de la température T et de R la constante des gaz parfaits, avec d correspondant au nombre de dimensions spatiales [52], telle que :

$$f^{eq}(x, c, t) = \rho \left(\frac{1}{2\,\pi\,R\,T} \right)^{d/2} \exp\left(\frac{-\left|c-u\right|^2}{2\,R\,T} \right) \tag{2.7}$$

Par un développement de Taylor à l'ordre 2 et en faisant l'hypothèse d'un écoulement incompressible, l'expression de la fonction de distribution à l'équilibre peut être réécrite. Un écoulement est considéré comme étant incompressible lorsque le nombre de Mach est faible ($Ma \leq 0,3$) [55]. Ceci revient également à considérer que la vitesse macroscopique u est faible par rapport à la vitesse du son dans le milieu. Enfin, en négligeant les termes supérieurs

à u^2, f^{eq} s'écrit [56] :

$$f^{eq}(x,c,t) = \frac{\rho}{(2\,\pi R\,T)^{d/2}}\left(1 + \frac{c\cdot u}{R\,T} + \frac{(c\cdot u)^2}{2\,(R\,T)^2} - \frac{u^2}{2\,R\,T}\right)\exp\left(-\frac{c^2}{2\,R\,T}\right) \tag{2.8}$$

2.1.3 Equation de transport de Boltzmann

Une fois la notion de fonction de distribution $f(x,c,t)$ présentée, l'équation de transport de Boltzmann est introduite dans le but de décrire l'évolution de f au cours du temps. Étant donné que la fonction de distribution dépend de la position x, de la vitesse c et du temps t, la dérivée de f par rapport au temps peut s'écrire :

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)\frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}t} + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + \left(\frac{\partial f}{\partial c}\right)\frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}t} \tag{2.9}$$

Chacun des termes de la dérivée temporelle de f peut être réécrit. Par construction, la vitesse des particules $c = \mathrm{d}x/\mathrm{d}t$ et $\mathrm{d}t/\mathrm{d}t = 1$. L'accélération a peut être reliée à la force F et la masse d'une particule m_p. En effet, à partir de la seconde Loi de Newton, l'accélération est définie telle que $a = \mathrm{d}c/\mathrm{d}t = F/m_p$. Enfin, $\mathrm{d}f/\mathrm{d}t$ est communément noté $\Omega(f)$. Par conséquent, l'équation de transport de Boltzmann peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{F}{m_p}\frac{\partial f}{\partial c} = \Omega(f) \tag{2.10}$$

Il s'agit d'une équation d'advection de la fonction de distribution. Les deux premiers termes de gauche correspondent à la fonction de distribution transportée par la vitesse des particules. Le troisième terme de gauche représente l'effet des forces, s'exerçant sur les particules, sur la vitesse. Du côté droit de l'équation, le terme source $\Omega(f)$ aussi dénommé l'*opérateur de collision*, représente la redistribution de f due aux collisions.

Il existe différentes expressions de l'opérateur de collision pour modéliser les collisions, au sein du milieu, dans l'équation de Boltzmann. La version d'origine proposée par Boltzmann considère tous les résultats possibles des collisions de deux particules quelles que soient les forces d'interactions. L'opérateur de collision de Boltzmann étant très complexe, il lui est préféré des modèles simplifiés.
De plus, en appliquant le développement mathématique de Chapman-Enskog [57], il est possible de remonter à partir de l'équation de Boltzmann aux équations macroscopiques d'Euler et de Navier-Stokes.

2.2 Méthode de discrétisation à l'échelle mésoscopique

Hormis pour des écoulements très simples, il est bien connu que les équations de la mécanique des fluides sont souvent très difficiles à résoudre de manière analytique [52, 54]. Il en va de même pour les équations de Boltzmann, dont la variable fondamentale f est une fonction de la position, de la vitesse et du temps. Pour trouver une solution, il est possible de résoudre l'équation de transport de Boltzmann numériquement. Cette section se concentre sur la méthode de discrétisation des équations de Boltzmann, qui représente le cœur de la LBM.

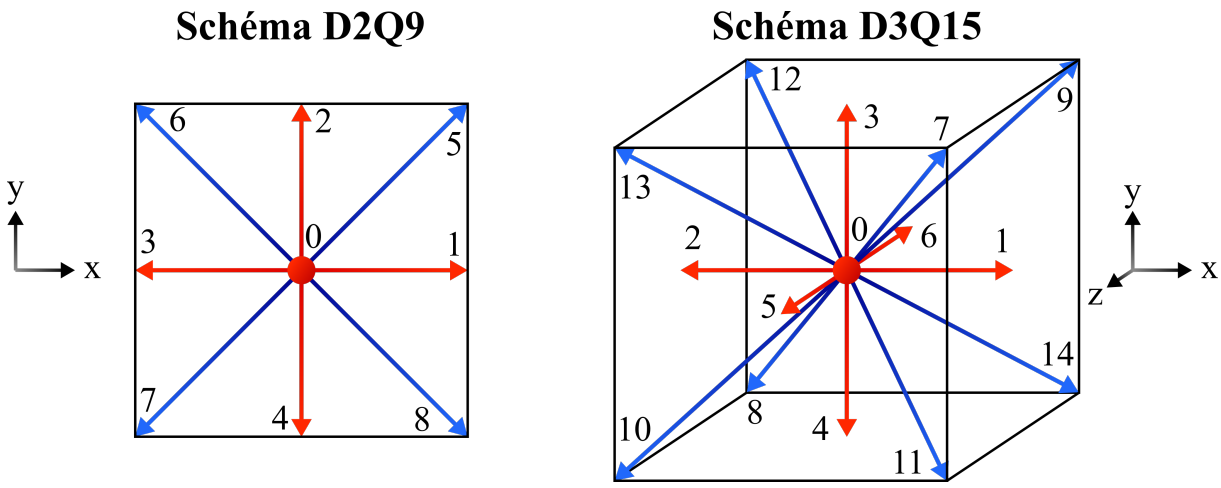

Figure 2.3 : Représentation des schémas de discrétisation DdQq, avec comme exemple les configurations D2Q9 et D3Q15.

2.2.1 Système de discrétisation

La fonction de distribution f étant dépendante de la position, de la vitesse et du temps, le système nécessite d'être discrétisé spatialement, temporellement et dans l'espace des vitesses [52, 58].
Premièrement, l'espace est discrétisé suivant un réseau uniforme, de nœuds cubiques, couramment désigné par le terme *lattice*. La position x prend donc des valeurs discrètes correspondant au centre des nœuds du réseau. Par construction, l'espacement entre deux valeurs de x est égal à la taille d'un nœud cubique de côté $\Delta x = \Delta y = \Delta z$. Pour la discrétisation temporelle, le temps t est uniquement défini à des instants précis séparés d'un pas de temps régulier Δt. Le pas de temps Δt et l'espacement dans le lattice Δx, représentent respectivement la résolution temporelle et spatiale, exprimables quel que soit le système d'unité choisi. En revanche, pour des raisons de simplification des calculs, il est souvent choisi de fixer numériquement $\Delta t = 1$ et $\Delta x = 1$. Il est possible de faire le lien entre les unités dans le lattice (LU) et les unités physiques du système international (SI). Pour cela, il est nécessaire de s'assurer que les nombres sans dimension, pertinents pour l'étude (Reynolds, Bond, *etc*), soient identiques dans les deux systèmes d'unités.

Pour l'espace des vitesses, il est impératif de restreindre l'ensemble des vitesses possible à un nombre de directions limitées. Il existe plusieurs schémas de vitesses normalisés [59], désignés suivant la dénomination DdQq, où d représente le nombre de dimensions et q le nombre de directions, comme illustré dans la figure 2.3. Pour chaque schéma de discrétisation, deux quantités sont définies ; les vitesses c_i et les poids associés w_i, avec i l'indice correspondant à la direction, allant de 0 à $q-1$. La vitesse d'amplitude nulle, ayant pour indice $i = 0$, représente les particules stationnaires.
Les poids w_i sont déterminés en fonction du schéma de vitesse afin d'assurer l'isotropie du réseau [52]. Dans cette optique, pour les problèmes d'advection-diffusion, les poids w_i doivent satisfaire au moins les quatre conditions suivantes :

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^{q-1} w_i & = & 1, \\ \sum_{i=0}^{q-1} w_i \, c_{i\alpha} & = & 0, \\ \sum_{i=0}^{q-1} w_i \, c_{i\alpha} \, c_{i\beta} & = & c_s^2 \, \delta_{\alpha\beta}, \\ \sum_{i=0}^{q-1} w_i \, c_{i\alpha} \, c_{i\beta} \, c_{i\gamma} & = & 0. \end{cases} \tag{2.11}$$

Où les indices α, β, γ prennent leur valeur dans l'ensemble $\{x,y,z\}$ en 3D et $\{x,y\}$ en 2D en

fonction de la direction i et avec la quantité $\delta_{\alpha\beta}$ représentant le symbole de Kronecker, défini comme suit :

$$\begin{cases} \delta_{\alpha\beta} = 1 & \text{si } \alpha = \beta \\ \delta_{\alpha\beta} = 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{2.12}$$

De plus, tous les poids w_i doivent être positifs.

Les propriétés des schémas de discrétisation des vitesses les plus couramment utilisés (D2Q9, D3Q15, D3Q19 et D3Q27) sont regroupées dans le tableau 2.1 [59, 60]. De plus, pour ces discrétisations, la vitesse du son dans le lattice c_s peut être déterminée par l'expression $c_s^2 = (1/3)\Delta x^2/\Delta t^2$. Sachant que Δt et Δx sont généralement fixés à 1, $c_s = 1/\sqrt{3}$.

Notation	Vitesse c_i	Indice i	Longueur $\mid c_i \mid$	Poids w_i
D2Q9	$(0;0)$	0	0	$4/9$
	$(\pm1;0),(0;\pm1)$	$[1;4]$	1	$1/9$
	$(\pm1;\pm1)$	$[5;9]$	$\sqrt{2}$	$1/36$
D3Q15	$(0;0;0)$	0	0	$2/9$
	$(\pm1;0;0),(0;\pm1;0),(0;0;\pm1)$	$[1;6]$	1	$1/9$
	$(\pm1;\pm1;\pm1)$	$[7;14]$	$\sqrt{3}$	$1/72$
D3Q19	$(0;0;0)$	0	0	$1/3$
	$(\pm1;0;0),(0;\pm1;0),(0;0;\pm1)$	$[1;6]$	1	$1/18$
	$(\pm1;\pm1;0),(\pm1;0;\pm1),(0;\pm1;\pm1)$	$[7;18]$	$\sqrt{2}$	$1/36$
D3Q27	$(0;0;0)$	0	0	$8/27$
	$(\pm1;0;0),(0;\pm1;0),(0;0;\pm1)$	$[1;6]$	1	$2/27$
	$(\pm1;\pm1;0),(\pm1;0;\pm1),(0;\pm1;\pm1)$	$[7;18]$	$\sqrt{2}$	$1/54$
	$(\pm1;\pm1;\pm1)$	$[19;26]$	$\sqrt{3}$	$1/216$

Tableau 2.1 : Propriétés des modèles DdQq les plus couramment utilisés [59, 60].

2.2.2 Discrétisation des équations

Une fois le système de discrétisation défini, il est possible d'introduire la version discrétisée de la fonction de distribution g_i. De façon analogue à f, la fonction de distribution de particules dans la direction i, notée $g_i(x,t)$, représente la densité de particules ayant une vitesse spécifique c_i à la position x et au temps t. Et à l'instar des moments de f, définis de manière continue par (2.2), (2.3) et (2.4), la masse volumique ρ, la vitesse macroscopique u et l'énergie E sont obtenues en sommant les contributions pour l'ensemble des directions de vitesse locales possibles.

$$\rho(x,t) = \sum_{i=0}^{q-1} g_i(x,t) \tag{2.13}$$

$$\rho(x,t)u(x,t) = \sum_{i=0}^{q-1} c_i\, g_i(x,t) \tag{2.14}$$

$$\rho(x,t)E(x,t) = \frac{1}{2}\sum_{i=0}^{q-1} |c_i|^2 \, g_i(x,t) \tag{2.15}$$

Sous l'hypothèse d'un faible nombre de Mach, la version discrète de la fonction de distribution à l'équilibre g_i^{eq}, s'écrit à partir de (2.8) telle que :

$$g_i^{eq}(x,t) = \rho \, w_i \left(1 + \frac{c_i \cdot u}{c_s^2} + \frac{(c_i \cdot u)^2}{2\, c_s^4} - \frac{u^2}{2\, c_s^2}\right) \tag{2.16}$$

L'équation sur laquelle est basée la LBM, est l'équation de lattice Boltzmann (LBE), qui s'exprime en discrétisant l'équation de Boltzmann (2.10) suivant le système de discrétisation choisi. L'écriture habituelle de la LBE est exprimée sans tenir compte des forces externes exercées sur les particules, car celles-ci peuvent être intégrées de différentes manières ultérieurement.

$$g_i(x + c_i\Delta t, t + \Delta t) = g_i(x,t) + \Omega_i(x,t) \tag{2.17}$$

La LBE peut être décomposée en deux étapes distinctes et successives, illustrées dans la figure 2.4.

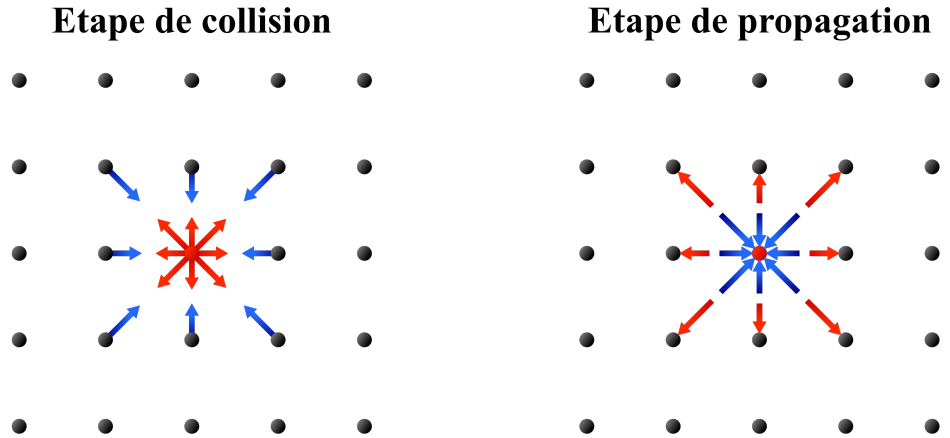

Figure 2.4 : Représentation des étapes de collision et de propagation pour le schéma D2Q9.

1. La première étape, nommée collision, est une étape de calcul de la nouvelle fonction de distribution locale après collision, noté g_i^*. À partir des distributions, suivant toutes les directions, les valeurs de ρ et de u locales sont calculées, pour déterminer g_i^{eq} dont dépend l'opérateur de collision. La nouvelle distribution après collision g_i^* est exprimée par le terme de droite de la LBE.

$$g_i^*(x,t) = g_i(x,t) + \Omega_i(x,t) \tag{2.18}$$

2. La seconde étape, ou propagation, correspond au transport des nouvelles distributions g_i^* aux nœuds voisins. Cette étape est exprimée par le terme de gauche de la LBE.

$$g_i(x + c_i\Delta t, t + \Delta t) = g_i^*(x,t) \tag{2.19}$$

En substance, la LBM consiste à effectuer en parallèle ces deux étapes de collision et de propagation dans l'ensemble du lattice. Lorsque ces opérations sont terminées, un pas de temps a été simulé. Il suffit de répéter le processus pour traiter les pas de temps suivants.

Enfin, dans le cadre du modèle LBM original présenté dans cette section, il est possible d'exprimer l'équation d'état du système à l'équilibre thermodynamique en fonction de la pression p, de la vitesse du son dans le réseau c_s et de la masse volumique ρ [52, 57]. En effet, l'équation d'état du système, désigné en anglais par le terme *equation of state* (EOS), s'écrit comme suit :

$$p = \rho\, c_s^2 \tag{2.20}$$

2.2.3 Opérateur de collision discrétisé

2.2.3.1 Cas de l'approximation de Bhatnagar-Gross-Krook

Il existe différents opérateurs de collision Ω pour remplacer l'opérateur d'origine proposé par Boltzmann. Ces opérateurs cherchent à simplifier la modélisation des collisions dans le fluide. Un modèle couramment utilisé est l'opérateur BGK, nommé d'après ses trois contributeurs Bhatnagar, Gross et Krook [61]. L'approximation fondatrice de ce modèle, est de considérer que chaque collision change la fonction de distribution d'une quantité proportionnelle à l'écart entre la distribution présente et la distribution à l'équilibre. L'opérateur BGK discrétisé s'écrit sous la forme suivante :

$$\Omega_i^{BGK}(x,t) = \frac{\Delta t}{\tau}\left(g_i^{eq} - g_i\right) \tag{2.21}$$

Le coefficient τ est une constante temporelle communément appelé *temps de relaxation* et par construction $\tau^{-1} = \omega$ correspond à la fréquence de collision. Le temps de relaxation τ peut être directement relié à la viscosité cinématique ν du milieu [52, 54].

$$\nu = c_s^2\left(\tau - \frac{\Delta t}{2}\right) \tag{2.22}$$

En appliquant l'opérateur BGK, la LBE (2.17) peut être réécrite.

$$g_i(x + c_i\Delta t, t + \Delta t) - g_i(x,t) = \frac{\Delta t}{\tau}\left(g_i^{eq} - g_i\right) \tag{2.23}$$

2.2.3.2 Extension aux modèles à taux de relaxation multiple

Bien que l'opérateur BGK soit efficace, sa simplicité impose certaines limites. En effet, pour des valeurs trop faibles ou trop grandes de viscosité, il a été montré que l'opérateur BGK perd en précisions et en stabilité [62, 63]. Or, il est parfois nécessaire de réduire la viscosité au sein de la simulation. Par exemple, dans le cas de simulation avec une valeur élevée du nombre de Reynolds, s'il est impossible d'augmenter la résolution du lattice, il devient impératif de réduire la viscosité ou d'augmenter la vitesse du fluide u.

Dans l'approximation BGK, il est considéré que la collision s'exprime suivant un unique temps de relaxation τ, cette approche est un modèle dit SRT, en référence à l'anglais *single relaxation time*. Une autre approche pour modéliser la collision consiste à définir différents taux de relaxation pour chaque moment de la fonction de distribution [64, 65]. De la même manière, les modèles de collision résultant de cette approche sont appelés modèles MRT pour *multiple relaxation time*.

Pour contrôler indépendamment le temps de relaxation des moments, la première étape consiste à passer la fonction de distribution g_i dans l'espace des moments. Pour un schéma de vitesse DdQq, il est possible d'introduire les moments m_k, à l'aide d'une matrice de passage M de taille $q \times q$, avec l'indice k allant de 0 à $q-1$.

$$\mathrm{m}_k = \sum_{i=0}^{q-1} \mathrm{M}_{k,i}\, g_i \tag{2.24}$$

Cette expression peut être réécrite sous la forme matricielle suivante :

$$\mathrm{m} = \mathrm{M}\, g \tag{2.25}$$

$$\text{avec} \qquad \mathrm{m} = \begin{pmatrix} \mathrm{m}_0 \\ \vdots \\ \mathrm{m}_{q-1} \end{pmatrix}, \quad \mathrm{M} = \begin{pmatrix} \mathrm{M}_{0,0} & \cdots & \mathrm{M}_{0,q-1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{M}_{q-1,0} & \cdots & \mathrm{M}_{q-1,q-1} \end{pmatrix}, \quad g = \begin{pmatrix} g_0 \\ \vdots \\ g_{q-1} \end{pmatrix}$$

Les éléments $\mathrm{M_{k,i}}$ de la matrice de passage M peuvent être choisis de manière à ce que les moments m_k correspondent aux moments hydrodynamiques. Pour rappel, l'opérateur BGK est un cas particulier du modèle MRT où tous les taux de relaxation sont identique et valent ω. De par cette relation, la LBE peut être exprimée pour un opérateur MRT à partir de (2.23). Premièrement, il est nécessaire de faire l'hypothèse que M est inversible. Si M est inversible, il est possible de multiplier l'étape de collision (2.18) par la matrice identitaire $\mathrm{I} = \mathrm{M}^{-1}\,\mathrm{M}$.

$$\begin{aligned} g_i(x + c_i\Delta t, t + \Delta t) - g_i(x,t) &= \mathrm{M}^{-1}\,\mathrm{M}\,\omega\,(g_i^{eq}(x,t) - g_i(x,t))\,\Delta t \\ &= \mathrm{M}^{-1}\,\omega\,(\mathrm{M}\,g^{eq}(x,t) - \mathrm{M}\,g(x,t))\,\Delta t \\ &= \mathrm{M}^{-1}\,\omega\,\mathrm{I}\,(m^{eq}(x,t) - m(x,t))\,\Delta t \end{aligned} \tag{2.26}$$

Il est possible d'introduire la matrice diagonale $\mathrm{S} = \omega\,\mathrm{I}$. L'expression de LBE pour l'opérateur BGK sous forme matricielle devient alors :

$$g_i(x + c_i\Delta t, t + \Delta t) - g_i(x,t) = \mathrm{M}^{-1}\,\mathrm{S}\,(\mathrm{m}(x,t) - \mathrm{m}^{eq}(x,t))\,\Delta t \tag{2.27}$$

Enfin, S peut être généralisé pour les modèles MRT, telle que chaque élément de la diagonale correspond au taux de relaxation ω_k associé au moment m_k.

$$\mathrm{S} = \begin{pmatrix} \omega_0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \omega_{q-1} \end{pmatrix} \tag{2.28}$$

En pratique, les modèles MRT ont été introduits pour maximiser le nombre de paramètres d'ajustement afin de garantir à la fois la stabilité et la précision, notamment pour des valeurs élevées du nombre de Reynolds. Mais le choix des différents taux de relaxation optimaux est complexe et dépend du problème considéré. De plus, permettre aux moments de se relaxer avec des taux de relaxation différents rompt l'invariance galiléenne.

D'autres modèles (moments centrés, cumulants) ont été proposés pour étendre cette approche tout en résolvant les problèmes d'invariance et de stabilité pour un nombre de Reynolds élevé. Avec ces considérations, le modèle cumulant est l'un des modèles les plus utilisés [66, 67]. Il consiste à employer les cumulants pour définir l'opérateur de collision, en lieux et place des moments (pour les modèles MRT classiques) ou de la fonction de distribution (pour les modèles SRT). Les cumulants sont obtenus par la transformée de Laplace de la fonction de distribution discrète g_i depuis l'espace temps-vitesse à l'espace fréquence-vitesse [66], tel que :

$$C_{\xi\upsilon\zeta} = c^{-\xi-\upsilon-\zeta} \frac{\partial\xi\ \partial\upsilon\ \partial\zeta}{\partial\Xi^{\xi}\ \partial\Upsilon^{\upsilon}\ \partial Z^{\zeta}} \ln\left(\mathscr{L}\left[g_i\left(x,t\right)\right]\right) \tag{2.29}$$

Ξ, Υ et Z étants les coordonnées de l'espace fréquence-vitesse. Et la vitesse discrétisée $c = \Delta x/\Delta t$. Par construction, les cumulants sont à la fois statistiquement indépendants et respectent l'invariance galiléenne. Chaque cumulant retourne à l'équilibre suivant un taux de relaxation individuel noté $\omega_{\xi\upsilon\zeta}$. Dans l'espace fréquence-vitesse, l'étape de collision (2.18) s'écrit telle que :

$$C^{*}_{\xi\upsilon\zeta} = \omega_{\xi\upsilon\zeta}\, C^{eq}_{\xi\upsilon\zeta} + (1-\omega_{\xi\upsilon\zeta}) C_{\xi\upsilon\zeta} \tag{2.30}$$

Suivant les mêmes conventions de notation utilisées pour les fonctions de distribution, $C^{*}_{\xi\upsilon\zeta}$ et $C^{eq}_{\xi\upsilon\zeta}$ correspondent respectivement aux cumulants avant collision et à l'équilibre. Après l'opération de collision, la nouvelle distribution de particule g_i est obtenue par transformée inverse à partir de $C_{\xi\upsilon\zeta}$.

2.3 Application à l'étude de la mouillabilité

2.3.1 Conditions aux limites

Pour toute méthode numérique, il est impératif de définir le comportement au sein des éléments aux bords du maillage. Les règles régissant le comportement spécifique de ces éléments sont appelées conditions aux limites ou conditions aux bords.

Lors de la simulation d'un fluide, différents comportements aux bords peuvent être requis. Il est possible de vouloir imposer un débit, à l'entrée ou à la sortie d'un écoulement, de simuler une périodicité de l'écoulement ou simplement de définir l'interaction avec des solides. Ici, sont présentées les deux conditions aux bords employées pour l'application de la LBM à l'étude de la mouillabilité :

1. Les premières sont les conditions périodiques, très courantes en mécanique des fluides. Initialement, ces conditions sont appliquées lorsque la solution de l'écoulement est périodique, permettant ainsi de limiter la taille du domaine modélisé. Avec cette condition, le fluide qui quitte le domaine d'un côté y revient instantanément du côté opposé. Par construction, ces conditions respectent parfaitement la conservation de la masse et de la quantité de mouvement à tout instant. Dans le cadre de la LBM, elles s'appliquent directement aux fonctions de distribution discrétisées g_i sortantes [68], comme illustrées dans la figure 2.5.
   Les conditions periodiques peuvent être étendues à d'autres usages. Par exemple, dans le cadre de la simulation de goutte sessile, elles permettent de ne pas borner le domaine gazeux autour de la goutte liquide.

2. Les secondes sont les conditions de rebond, aussi désignées *bounce-back*. Ces conditions permettent de modéliser des conditions de non-glissement au contact du solide. À

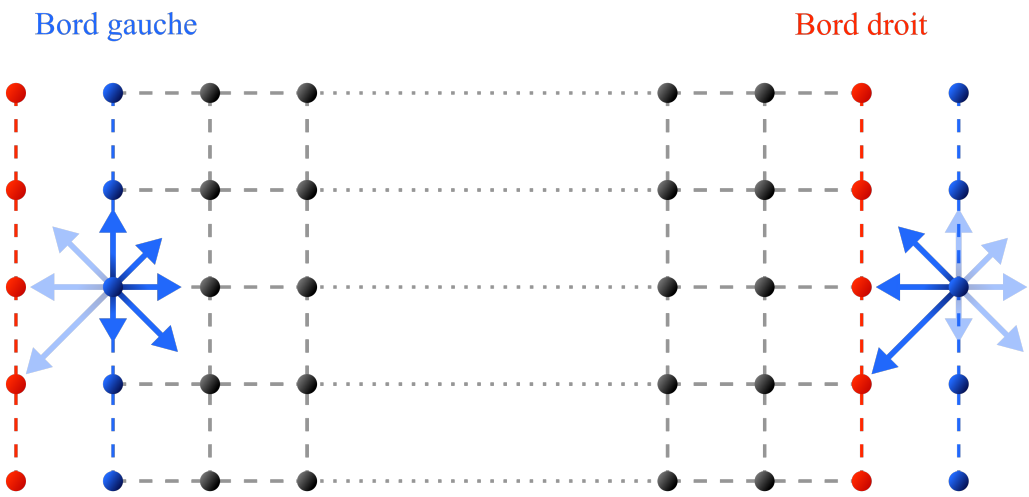

Figure 2.5 : Représentation des conditions périodiques, au niveau d'un nœud du bord gauche.

l'échelle d'une particule, le principe de fonctionnement des conditions de rebond est de considérer que toute particule qui heurte une paroi solide est renvoyée vers sa position d'origine. Comme toutes les particules frappant la paroi sont renvoyées, aucun écoulement n'est autorisé à travers la paroi solide. De plus, les particules retrouvent bien leur position d'origine, elles ne sont pas déviées vers une autre position. Ainsi, aucun mouvement relatif n'est généré à l'interface.
Les conditions de rebond définissent la paroi solide à mi-chemin entre les nœuds solides et les premiers nœuds fluides. En revanche, il existe deux approches différentes pour mettre en place ces conditions. Dans la première méthode, appelée *full-way bounce-back*, les fonctions de distributions de particules se propagent, au-delà de la paroi solide, jusqu'au nœud solide où les vitesses sont inversées pour la prochaine étape de collision [68]. Cette première approche est illustrée dans la figure 2.6. À l'inverse, une seconde méthode,

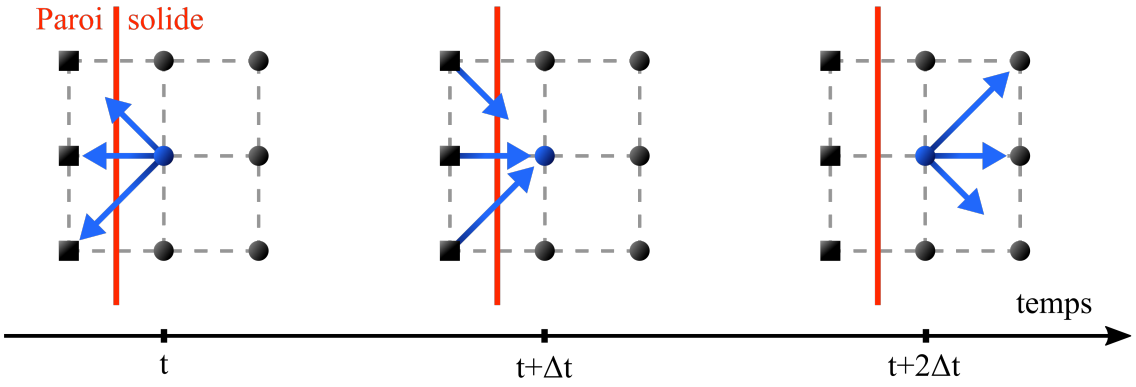

Figure 2.6 : Représentation des différentes étapes des conditions de rebond *full-way bounce-back*.

nommée *half-way bounce-back*, consiste à inverser les vitesses des fonctions de distribution, qui seraient amenées à rencontrer la paroi solide, avant l'étape de propagation [69]. Les étapes de la méthode *half-way bounce-back* sont illustrées dans la figure 2.7. La méthode *half-way* est résolue en un seul pas de temps, au lieu de deux pour l'approche *full-way*. Pour cette raison, la méthode *half-way bounce-back* est plus couramment utilisée, car moins restrictive pour les écoulements ayant une forte dépendance temporelle.
Dans le cas d'un solide immobile et l'application de condition *half-way bounce-back*,

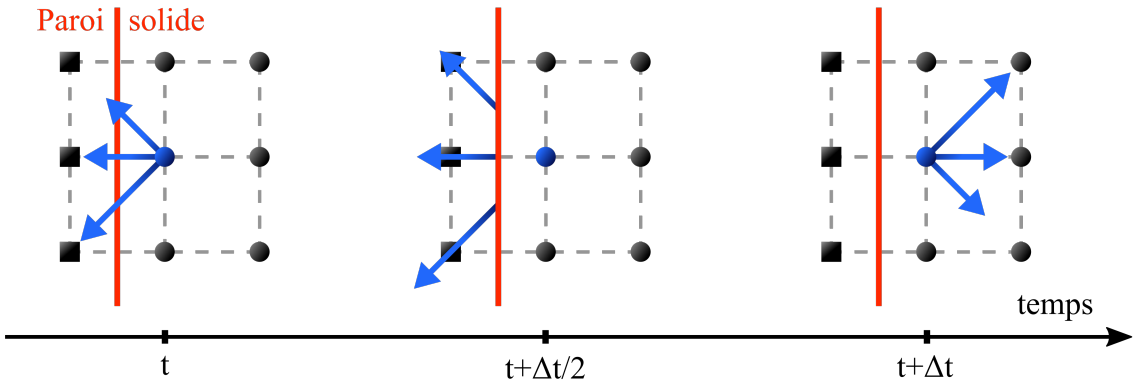

Figure 2.7 : Représentation des différentes étapes des conditions de rebond *half-way bounce-back*.

l'étape de propagation (2.19) peut être réécrite, pour les fonctions rencontrant la paroi solide, telle que :

$$\check{g}_i(x, t + \Delta t) = g_i^*(x, t) \tag{2.31}$$

Où $\check{g}_i$ représente la fonction de distribution renvoyée avec une vitesse $\check{c}_i = -c_i$.
La condition *half-way bounce-back* peut également être étendue à des parois en mouvement, à l'aide d'un terme correctif. En effet, les particules renvoyées doivent gagner ou perdre une quantité de mouvement spécifique lorsqu'elles frappent la paroi solide, de sorte que le résultat respecte l'invariance galiléenne. Il est donc possible de réécrire l'étape de propagation de la condition *half-way bounce-back* en fonction de la vitesse de la paroi u_{solide}.

$$\check{g}_i(x, t + \Delta t) = g_i^*(x, t) - 2\, w_i\, \rho \frac{c_i \cdot u_{solide}}{c_s^2} \tag{2.32}$$

Le principal inconvénient des conditions de rebond est qu'elles obligent à discrétiser la surface solide sous forme cubique. Il existe d'autres méthodes pour interpoler précisément la position de la paroi solide dans le réseau, au prix de la conservation de la masse dans le domaine et de la simplicité de l'incorporation [70].

2.3.2 Etude des systèmes Multi-Composants Multi-Phasiques

Pour appliquer la LBM au mouillage, il est également nécessaire de pouvoir simuler les interfaces entre les différents fluides et leurs interactions avec les solides. Dans ce but, il est important de s'intéresser aux systèmes multi-composants et multi-phasiques (MCMP). Comme leur nom l'indique, ces écoulements sont des systèmes impliquant plusieurs fluides, aux propriétés physiques différentes, qui interagissent ensemble. Il est possible de définir plusieurs sous catégories d'écoulement MCMP :

1. Les écoulements mono-composant multi-phasiques dans lesquels coexistent les phases liquides et gazeuses d'une unique substance. En fonction des conditions, le liquide peut s'évaporer générant plus de gaz. Inversement, le gaz peut se condenser formant plus de liquide.

2. Les écoulements multi-composants sont constitués de plusieurs substances qui ne peuvent pas réagir entre elles. Cependant, il est nécessaire de considérer les inter-diffusions des différentes substances dans le milieu. Les écoulements multi-composants comprennent à la fois des systèmes miscibles ou non-miscibles.

Le point central dans l'étude des systèmes MCMP est l'étude du comportement des interfaces entre les différents constituants (composants et phases) de l'écoulement. En effet, les interfaces sont étudiées à travers leurs déplacements, leurs formations ou encore leur coalescence. Quant aux différents constituants, ils se distinguent par leurs propriétés physiques, telles que la masse volumique, la viscosité ou la tension de surface.

Il existe plusieurs modèles LBM adaptés à la simulation d'écoulement MCMP. Mais seulement deux approches en particulier sont plus couramment utilisées. La première approche consiste à intégrer les différents types d'interactions entre les constituants sous la forme de forces extérieures dans les équations de Boltzmann. Ce modèle est nommé méthode de Shan-Chen en référence au duo de chercheurs à l'origine du modèle [71]. Il permet de paramétrer la séparation entre les constituants via un pseudo-potentiel d'interaction. Au contraire, la deuxième approche, proposée par Swift, est basée sur la modélisation de l'énergie libre du système [72]. Les effets de séparation des constituants sont directement intégrés dans l'étape de collision en respectent la minimisation de l'énergie du système thermodynamique à l'équilibre.

Dans le cas du mouillage partiel d'une goutte de liquide sur un substrat solide, le mouillage est un système MCMP composé de deux fluides (par exemple de l'eau et de l'air). Il a été démontré qu'en l'absence de réaction entre les constituants et à condition que les effets d'inertie soient négligeables, un modèle mono-composant bi-phasiques ou un modèle bi-composants donne les mêmes résultats [73]. L'hypothèse sur les effets d'inertie est vérifiée en mouillage, où le nombre de Reynolds est très faible. Il est donc possible de modéliser le mouillage partiel comme un système bi-composants. Cela implique également de faire l'hypothèse qu'aux températures étudiées le temps d'évaporation est d'un ordre de grandeur suppérieur au temps d'étalement de la goutte.

Bien que le modèle à énergie libre propose une méthode parallèle aux approches énergétiques de l'étude de la mouillabilité, il a été choisi d'utiliser la méthode à pseudo-potentiel de Shan-Chen. En effet, cette méthode permet de paramétrer pour chaque interaction fluide-fluide-solide le potentiel d'interaction associé. De plus, contrairement à la méthode à énergie libre, elle permet de conserver la nature parallélisable de la LBM et donc de réduire considérablement le temps de calcul.

2.3.3 Modèle à pseudo-potentiel

Cette section est consacrée au fonctionnement du modèle de Shan-Chen dans le cas d'un système bi-composants [71, 74]. Mais les concepts présentés sont applicables aux autres écoulements MCMP.

L'idée fondamentale du modèle à pseudo-potentiel est de considérer les interactions entre les différents composants comme un ensemble de forces externes. Ces interactions sont définies localement, les particules à la position x interagissent uniquement avec les particules voisines aux positions $\tilde{x}$. Pour un système fluide-fluide-solide, les deux composants fluides sont respectivement noté σ et $\bar{\sigma}$. Ainsi, la force totale F qui exercent l'advection des quantités de particules locales du fluides σ peut être exprimée telle que la somme des forces de volumes $F_{corps,\sigma}$ (gravitationnelles, électromagnétiques, *etc*), des forces d'interaction entre les fluides (intra-fluides $F_{\sigma,\sigma}$ et inter-fluides $F_{\bar{\sigma},\sigma}$) et des forces d'adhésion avec les solides $F_{adh,\sigma}$.

$$F_{ext,\sigma} = F_{corps,\sigma} + F_{\sigma,\sigma} + F_{\bar{\sigma},\sigma} + F_{adh,\sigma} \tag{2.33}$$

Dans les modèles MCMP, chacun des composants fluides doit être défini à travers sa propre

fonction de distribution. Et leurs fonctions de distribution évoluent en parallèle sur le même lattice en interagissant entre elle localement, au niveau des nœuds du réseau. Il est donc possible d'exprimer les équations de la LBM appliquées à chacun des composants. Par exemple, l'équation de lattice Boltzmann avec l'opérateur BGK (2.23) décrivant le comportement du fluide σ s'exprime :

$$g_{i,\sigma}(x + c_i\Delta t, t + \Delta t) - g_{i,\sigma}(x,t) = \frac{\Delta t}{\tau_\sigma}\left(g^{eq}_{i,\sigma} - g_{i,\sigma}\right) + F'_{i,\sigma} \tag{2.34}$$

Où $F'_{i,\sigma}$ représente la contribution, selon la direction i, de la force externe totale $F_{ext,\sigma}$ sur l'écoulement. Il existe plusieurs façons d'intégrer cette contribution. Les plus largement employées seront présentées dans la suite de cette section. Mais dans un premier temps, il est nécessaire de définir les différents termes introduits dans l'expression de $F_{ext,\sigma}$ (2.33).

Dans la plupart des écoulements MCMP, des forces extérieures s'exercent sur l'ensemble du milieu. Ces forces de volumes sont incorporées au sein du terme $F_{corps,\sigma}$. Dans le cas de la gravité, qui joue souvent un rôle important dans le comportement des écoulements MCMP, il existe plusieurs façons équivalentes d'introduire les forces gravitationnelles [74, 75]. Une manière efficace d'introduire la gravité est de l'appliquer simplement au sein de chaque nœud du lattice en fonction de la masse volumique locale et de l'accélération de la pesanteur g exprimée dans les unités du lattice (LU).

$$F_{g,\sigma} = \rho_\sigma\, g \tag{2.35}$$

2.3.3.1 Force d'interactions entre fluides

Le modèle de Shan-Chen part du principe que les forces d'interaction s'exercent entre chaque paire de particules du fluide [71, 76]. De plus, les interactions d'une particule avec ses voisines sont supposées additives. Par conséquent, plus la densité de particules est élevée, plus les forces d'interaction sont importantes. Pour transcrire cette hypothèse dans le calcul, les forces d'interaction entre les particules situées en x et leurs voisines positionnées en $\tilde{x}$ sont définies proportionnellement à $\psi(x)\cdot\psi(\tilde{x})$. Où la fonction de masse effective ψ, aussi nommée pseudo-potentiel, représente la densité de particules du fluide. Une forme courante du pseudo-potentiel est simplement de définir $\psi(x) = \rho(x)$. Une autre forme largement utilisée consiste à exprimer la masse effective en fonction d'une masse volumique de référence ρ_0, généralement choisie égale à 1, telle que [52] :

$$\psi(x) = \rho_0\left(1 - \exp\left(-\frac{\rho}{\rho_0}\right)\right) \tag{2.36}$$

Cette seconde expression permet de borner les valeurs de ψ entre 0 et ρ_0, limitant ainsi les risques d'instabilité lié aux grandes valeurs de ρ.

Les forces d'interaction entre deux populations de particules dépendent également de la distance qui les sépare. Le modèle de Shan-Chen introduit donc la fonction de Green $\mathrm{G}(x,\tilde{x})$, qui contient les informations relatives aux distances entre les positions x et $\tilde{x}$. En revanche, dans la version originale, seules les interactions avec les nœuds voisins sont considérées.

$$\mathrm{G}(x,\tilde{x}) = \begin{cases} w_i\, G & \text{si } \tilde{x} = x + c_i\Delta t \quad \text{pour } i \neq 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{2.37}$$

Les vitesses c_i et les poids w_i sont directement associés au schéma de discrétisation des vitesses

choisi. Et le coefficient G est le paramètre contrôlant l'intensité de l'interaction. Une valeur positive de G correspond à une force répulsive, tandis qu'une valeur négative représente une force attractive.
Les forces d'interaction entre les particules fluides peuvent donc être exprimées en fonction de ψ et G. Dans le cas d'un écoulement composé des deux fluides σ et $\bar{\sigma}$, les forces d'interactions intra-fluides et inter-fluides appliquées aux particules du fluide σ situées en x peuvent être écrites, respectivement, sous les formes suivantes.

$$F_{\sigma,\sigma}(x) = -\psi_\sigma(x)\, G_{\sigma\sigma} \sum_{i=1}^{q-1} w_i\, \psi_\sigma(\tilde{x})\, c_i\, \Delta t \tag{2.38}$$

$$F_{\bar{\sigma},\sigma}(x) = -\psi_\sigma(x)\, G_{\sigma\bar{\sigma}} \sum_{i=1}^{q-1} w_i\, \psi_{\bar{\sigma}}(\tilde{x})\, c_i\, \Delta t \tag{2.39}$$

L'influence des particules du fluide σ sur les particules du fluide $\bar{\sigma}$ étant réciproque, il est possible d'écrire que $G_{\sigma\bar{\sigma}} = G_{\bar{\sigma}\sigma}$. Le choix de $G_{\sigma\bar{\sigma}}$ influe sur l'épaisseur de l'interface simulée [77]. En effet, plus la valeur de $|G_{\sigma\bar{\sigma}}|$ est grande, plus l'interface est nette. Au contraire, plus elle est petite, plus l'interface sera diffuse. De plus, pour simuler un système multi-composants sans changement de phase, les interactions intra-fluides sont généralement négligées ($G_{\sigma\sigma} = 0$).

L'introduction de ces forces d'interaction dans la LBM, modifie l'expression de l'EOS (2.20), qui relie la pression p à la vitesse du son dans le réseau c_s et à la masse volumique ρ. Ainsi, pour un système bi-composant sans changement de phase, où $G_{\sigma\sigma}$ est négligé, la pression p est exprimable sous la forme suivante [74] :

$$p = c_s^2\,(\rho_\sigma + \rho_{\bar{\sigma}}) + \frac{c_s^2\,\Delta t^2}{2} G_{\sigma\bar{\sigma}}\, \psi_\sigma\, \psi_{\bar{\sigma}} \tag{2.40}$$

2.3.3.2 Force d'adhésion au solide

Il est possible de définir les forces d'adhésion avec les solides de façon analogue aux forces d'interaction entre les fluides. En effet, le modèle de Martys-Chen [78] propose de définir les forces d'interaction entre les particules du fluide σ et un nœud solide voisin en fonction d'un coefficient $G_{adh,\sigma}$.

$$F_{adh,\sigma}(x) = -\psi_\sigma(x)\, G_{adh,\sigma} \sum_{i=1}^{q-1} w_i\, s(\tilde{x})\, c_i\, \Delta t \tag{2.41}$$

Où, de manière similaire à $G_{\sigma\bar{\sigma}}$, le coefficient $G_{adh,\sigma}$ contrôle l'intensité des forces d'adhésion. Et $s(\tilde{x})$ est un paramètre géométrique dépendant de la topographie du solide.

$$s(\tilde{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \tilde{x} \text{ correspond à un nœud solide} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{2.42}$$

Par construction, les forces d'adhésion sont nulles lorsqu'aucun nœud solide ne se trouve au voisinage de x. Cette force d'interaction s'applique donc uniquement aux interfaces fluides-solides.

Pour déterminer les valeurs de $G_{adh,\sigma}$ et $G_{adh,\bar{\sigma}}$, il est impératif de faire le lien entre ces coefficients du potentiel d'interaction et la physique de l'interface. Sukop *et al.* [79] proposent

de relier la force d'adhésion (2.41) avec l'angle de contact de Young (1.18). Ainsi, ils expriment $G_{adh,\sigma}$ en fonction du paramètre d'interaction inter-fluides $G_{\sigma\bar{\sigma}}$ et de l'angle de contact à l'équilibre θ_Y.

$$G_{adh,\sigma} = \frac{G_{\sigma\bar{\sigma}}}{2} \cos\theta_Y \tag{2.43}$$

Il a également été montré pour un système bi-composant que les interactions fluide-solide doivent être du même ordre de grandeur ($G_{adh,\sigma} \approx -G_{adh,\bar{\sigma}}$) [80, 81]. Pour l'étude du mouillage, l'expression (2.43) est extrêmement pratique, car elle permet de définir les paramètres d'adhésion avec pour seul prérequis la connaissance de l'angle de contact à l'équilibre sur une surface plane.
De plus, cette modélisation des forces d'adhésion peut être étendue pour un solide avec une chimie de surface hétérogène [82]. En effet, il est possible d'exprimer les forces d'adhésion (2.41) en fonction de la chimie locale du solide de telle sorte que $G_{adh,\sigma}$ soit une fonction de la position du nœud voisin $\tilde{x}$.

$$F_{adh,\sigma}(x) = -\psi_\sigma(x) \sum_{i=1}^{q-1} w_i \, G_{adh,\sigma}(\tilde{x}) \, s(\tilde{x}) \, c_i \, \Delta t \tag{2.44}$$

En étendant l'expression (2.43) aux propriétés chimiques locales du solide, $G_{adh,\sigma}(\tilde{x})$ devient alors dépendant de $\theta_Y(\tilde{x})$ l'angle de contact de la chimie au point $\tilde{x}$.

$$G_{adh,\sigma}(\tilde{x}) = \frac{G_{\sigma\bar{\sigma}}}{2} \cos(\theta_Y(\tilde{x})) \tag{2.45}$$

Ce modèle permet de simuler un solide avec un très grand nombre de chimies de surface quelles que soient la géométrie et la distribution des hétérogénéités chimiques. En contrepartie, ce modèle nécessite de pouvoir déterminer, à priori, l'angle de contact pour une surface plane et homogène de chacune des chimies de surface présentes sur le solide.

2.3.3.3 Schémas d'intégration des forces externes

Une fois que toutes les forces externes exercées sur les particules du fluide σ sont définies, il est nécessaire d'examiner les différentes méthodes pour les incorporer dans la LBM. La méthode de mise en œuvre de la force externe totale (2.33) joue un rôle important dans la stabilité numérique et la précision du modèle à pseudo-potentiel. Les trois schémas de force les plus largement utilisés sont introduits ici.

1. La première méthode est celle proposée à l'origine par Shan et Chen [71, 78, 83], également nommé en anglais *velocity shift method* (VSM). Dans leurs travaux originaux, les forces externes sont incorporées dans le modèle en altérant la vitesse dans l'expression de la fonction de distribution à l'équilibre $g^{eq}_{i,\sigma}(\rho_\sigma, u_\sigma)$ (2.16). En effet, la vitesse u_σ est remplacée par la vitesse à l'équilibre u^{eq}_σ, dans laquelle les effets des forces externes sur la vitesse des particules du fluide σ sont considérés.

   $$u^{eq}_\sigma = u' + \frac{\tau_\sigma \, F_{ext,\sigma}}{\rho_\sigma} \tag{2.46}$$

   La vitesse commune u' est obtenue en moyennant le second moment hydrodynamique (2.14) pour l'ensemble des composants σ tel que :

   $$u' = \frac{\sum_\sigma \frac{\rho_\sigma \, u_\sigma}{\tau_\sigma}}{\sum_\sigma \frac{\rho_\sigma}{\tau_\sigma}} \tag{2.47}$$

Dans le cas d'un écoulement bi-composants où la viscosité cinématique est la même dans les deux fluides ($\tau_\sigma = \tau_{\bar{\sigma}}$), l'expression de u' devient particulièrement simple.

$$u' = \frac{\rho_\sigma \, u_\sigma + \rho_{\bar{\sigma}} \, u_{\bar{\sigma}}}{\rho_\sigma + \rho_{\bar{\sigma}}} \tag{2.48}$$

2. Un autre schéma, nommé méthode des différences exactes, a été proposé par Kupershtokh *et al.*, aussi désigné en anglais par *exact difference method* (EDM) [84, 85]. La méthode des différences exactes est basée sur la LBE (2.17) appliquée au fluide σ, où les forces externes sont exprimées directement dans le terme de droite (étape de collision).

$$g_{i,\sigma}(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = g_{i,\sigma}(x, t) + \Omega_{i,\sigma}(x, t) + F'_{i,\sigma} \tag{2.49}$$

Avec $F'_{i,\sigma}$ représentant la différence entre les fonctions de distribution à l'équilibre avant et après l'application des forces externes, telle que :

$$F'_{i,\sigma} = g^{eq}_{i,\sigma}(\rho_\sigma, u_\sigma + \frac{F_{ext,\sigma} \, \Delta t}{\rho_\sigma}) - g^{eq}_{i,\sigma}(\rho_\sigma, u_\sigma) \tag{2.50}$$

3. La troisième approche couramment utilisée a été proposé par Guo *et al.* [86]. Ce schéma de force intègre également directement les forces externes dans le terme de droite de la LBE, comme pour la méthode des différences exactes (2.49). En revanche, $F'_{i,\sigma}$ est donnée par une expression discrète de la contribution de la force sur l'écoulement.

$$F'_{i,\sigma} = w_i \, F_{ext,\sigma} \, \Delta t \left(1 - \frac{1}{2 \, \tau_\sigma}\right) \left(\frac{c_i - u^{eq}_\sigma}{c_s^2} + \frac{c_i \cdot u^{eq}_\sigma}{c_s^4}\right) \tag{2.51}$$

Dans cette expression, la vitesse à l'équilibre u^{eq}_σ est définie différemment de celle dans le schéma de force de Shan-Chen (2.52). Ici, la vitesse à l'équilibre s'exprime sous la forme suivante :

$$u^{eq}_\sigma = u_\sigma + \frac{F_{ext,\sigma} \, \Delta t}{2 \, \rho_\sigma} \tag{2.52}$$

2.3.3.4 Incorporation des équations d'états

Dans la version originale, le modèle à pseudo-potentiel de Shan-Chen présente certaines limitations. Les approximations numériques faites aux niveaux des interfaces fluides génèrent des déséquilibres de tension de surface et de différence de pression. En effet, la tension de surface devrait toujours être tangente à l'interface. Or, si la discrétisation numérique n'est pas parfaitement isotrope, il en résulte des composantes normales qui génèrent des courants parasites [52, 74], comme illustré dans la figure 2.8. Ces erreurs numériques sont donc renforcées lorsque le maillage du lattice n'est pas suffisamment raffiné. Bien qu'existant dans d'autres méthodes numériques, la présence de courants parasites est l'un des principaux problèmes récurrents de la LBM [74, 87]. Dans la plupart des cas, l'intensité des courants parasite est négligeable devant l'écoulement caractéristique à simuler. Cependant, ces instabilités augmentent fortement avec le ratio de masse volumique $\rho_\sigma / \rho_{\bar{\sigma}}$. Ce point représente une forte restriction à l'utilisation de la méthode originale Shan-Chen, où pour des raisons de stabilités, le ratio de masse volumique est limité à l'ordre de $10/1$. Pour contextualiser, cette valeur est très faible comparée aux ordres de grandeur en mouillabilité ($\approx 1000/1$).

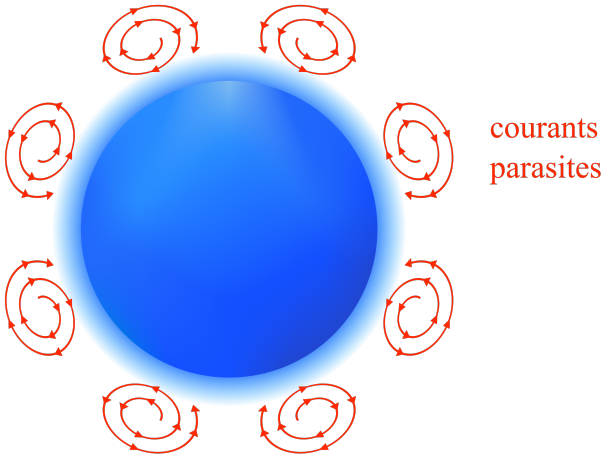

Figure 2.8 : Représentation des courrants parasites à l'interface d'une goutte libre.

Yuan et Schaefer ont proposé une méthode visant à accroître la stabilité du modèle pour des rapports de masse volumique plus élevés [77, 88]. Leur approche consiste à incorporer des EOS plus réalistes dans la LBM. La première étape de la méthode consiste à exprimer (2.40) en isolant la masse effective. Dans leurs travaux, ils s'intéressent au cas d'un système multi-phasiques, d'où leur réécriture de ψ telle que :

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{c_s^2\ \Delta t^2\ |G|}\ (p - c_s^2\ \rho)} \tag{2.53}$$

Il est ensuite possible d'incorporer différentes EOS dans l'expression de ψ, à condition d'écrire la pression p en fonction la masse volumique ρ. Parmi les EOS testées par Yuan et Schaefer, deux équations d'états se distinguent par leur capacité à simuler des ratios de masse volumique supérieurs à $1000/1$ tout en limitant l'intensité des courants parasites. Ces deux EOS sont l'équation de Peng-Robinson (P-R) et l'équation de Carnahan-Starling (C-S) [88].

1. Pour l'équation P-R, la pression p peut s'écrire sous la forme :

$$p_{\mathrm{P-R}} = \frac{\rho\ R\ T}{1 - b\ \rho} - \frac{a\ \rho^2}{1 + 2\ b\ \rho - b^2\ \rho^2} \tag{2.54}$$

Les termes a et b correspondent respectivement à des paramètres d'attraction et de répulsion. Pour un corps pur, ces paramètres sont déterminés en fonction des coordonnées du point critique (pression critique p_C et température critique T_C).

$$a = \alpha(T)\frac{0,45724\ R^2\ T_C^2}{p_C} \qquad \text{et} \qquad b = \frac{0,0778\ R\ T_C}{p_C} \tag{2.55}$$

Où $\alpha(T)$ est défini en fonction de la température T et du facteur acentrique ω_α.

$$\alpha(T) = \left[1 + \left(0,37464\ + 1,54226\ \omega_\alpha - 0,26992\ \omega_\alpha^2\right)\left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_C}}\right)\right]^2 \tag{2.56}$$

Le facteur acentrique traduit du caractère de symétrie sphérique d'une molécule. Par construction, moins la molécule est symétrique, plus ω_α est grand. Par exemple, le facteur acentrique vaut $0,344$ pour l'eau (H_2O) et $0,011$ pour le méthane (CH_4) [88].

2. Pour l'équation de C-S, la pression p s'exprime tel que :

$$p_{\text{C-S}} = \rho\, R\, T \frac{1 + \frac{b\,\rho}{4} + \left(\frac{b\,\rho}{4}\right)^2 - \left(\frac{b\,\rho}{4}\right)^3}{\left(1 - \frac{b\,\rho}{4}\right)^3} - a\,\rho^2 \tag{2.57}$$

$$\text{avec} \quad a = \frac{0,4963\, R^2\, T_C^2}{p_C} \quad \text{et} \quad b = \frac{0,18727\, R\, T_C}{p_C} \tag{2.58}$$

2.3.3.5 Ajout d'interactions multi-distances

Un autre moyen complémentaire pour augmenter la précision du modèle tout en réduisant l'intensité des courants parasites a été proposé par Sbragaglia *et al.* [89]. Les courants parasites étant la conséquence d'une mauvaise isotropie du schéma de force due à la discrétisation, leur approche consiste à améliorer l'isotropie en augmentant le nombre de voisins considérés en interaction. L'augmentation du nombre de voisins implique donc de prendre en compte des voisins situés à des nœuds plus éloignés. Cette approche est appelée méthode des interactions multi-distances, ou *multirange* en anglais.

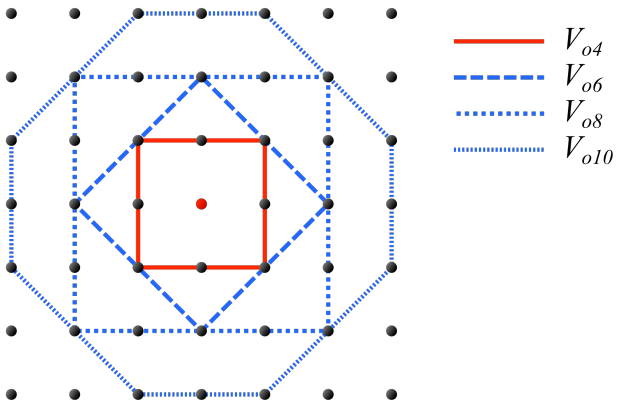

Figure 2.9 : Représentation des ordres de voisinage de V_{o4} à V_{o10}. Illustration adaptée de [89].

Il est possible de définir plusieurs ordres de voisinage V_o, qui correspondent à la distance des voisins considérés dans le calcul des forces d'interaction. L'ordre de voisinage le plus petit, noté V_{o4}, correspond aux voisins directs du schéma de discrétisation DdQq du lattice. Les quatre premiers ordres de voisinage sont illustrés en deux dimensions dans la figure 2.9.

L'incorporation des interactions multi-distance permet de réécrire les forces d'interactions de Shan-Chen (2.39), à condition de redéfinir les poids w_i en fonctions de l'ordre de voisinage. Pour les ordres de voisinage au-delà de V_{o4}, les poids associés sont notés w_l et sont définis en fonction de $|c_l|^2$. Où l'indice l représente le voisin interagissant avec les particules situées en x, allant de 1 à n, avec n le nombre total de voisins compris dans l'ordre de voisinage. Les poids w_l pour les ordres de voisinage jusqu'à V_{o10} sont regroupés dans le tableau 2.2. Par exemple, avec cette nouvelle formulation les forces d'interaction inter-fluides peuvent s'exprimer en fonction de V_o tel que :

$$F_{\bar{\sigma},\sigma}(x) = -\psi_\sigma(x)\, G_{\sigma\bar{\sigma}} \sum_{l=1}^{n} w_l\, \psi_\sigma(\tilde{x})\, c_l\, \Delta t \tag{2.59}$$

Dimensions	2D			3D		
Ordre de voisinage	V_{o6}	V_{o8}	V_{o10}	V_{o6}	V_{o8}	V_{o10}
$w(1)$	$4/15$	$4/21$	$262/1785$	$2/15$	$4/45$	$352/5355$
$w(2)$	$1/10$	$4/45$	$93/1190$	$1/15$	$1/21$	$38/1071$
$w(3)$	-	-	-	$1/60$	$2/105$	$271/14280$
$w(4)$	$1/120$	$1/60$	$7/340$	$1/120$	$5/504$	$39/14280$
$w(5)$		$2/315$	$6/595$		$1/315$	$53/10710$
$w(6)$		-	-		$1/630$	$5/2142$
$w(8)$		$1/5040$	$9/9520$		$1/5040$	$41/85680$
$w(9)$			$2/5355$			-
$w_{221}(9)$			-			$1/4284$
$w_{300}(9)$			-			$1/5355$
$w(10)$			$1/7140$			$1/10710$
$w(11)$						$1/42840$

Tableau 2.2 : Ensemble des poids w_l pour les différents ordres de voisinage jusqu'à V_{o10} en fonction du nombre de dimensions [89]. En 3D, les poids pour $|c_l|^2 = 9$ dépendent de la direction en coordonnées cartésiennes. La notation $w_{xyz}\left(|c_l|^2\right)$ est utilisée pour toutes les permutations possibles ($\pm x$,$\pm y$, $\pm z$).

En revanche, l'augmentation de l'isotropie s'accompagne d'un inconvénient majeur. En effet, le nombre de voisins interagissant ensemble étant beaucoup plus élevé, la consommation en ressource de calcul (mémoire et temps) du modèle est fortement augmentée. De plus, comme le concluent Sbragaglia *et al.* [89], le but de cette méthode est de réduire les contributions anisotropes à l'origine des courants parasites en augmentant l'isotropie du modèle à pseudopotentiel. Toutefois, si les ressources de calcul le permettent, il est plus efficace d'affiner la discrétisation pour lisser les gradients de masse volumique locaux. L'augmentation de la résolution du lattice d'un facteur deux réduit les courants parasites d'un facteur pouvant aller jusqu'à dix [89].

2.3.4 Synthèse de la méthode appliquée à la mouillabilité

Pour récapituler, la méthode LBM s'articule autour d'un nombre restreint d'étapes, ce qui permet de la mettre en œuvre facilement. En effet, l'algorithme de base se limite au calcul des grandeurs physiques (masse volumique et vitesse), suivi de la collision et la propagation des fonctions de distribution.

Dans le cadre de l'application de la LBM à l'étude de la mouillabilité, il a été choisi d'appliquer un modèle à pseudo-potentiel pour simuler l'écoulement MCMP. Le choix de ce modèle apporte des étapes spécifiques supplémentaires à l'algorithme. Pour rappel, dans le cadre d'un écoulement MCMP, chaque composant de l'écoulement est régi, à travers l'évolution des fonctions de distribution qui lui sont associées, en parallèle des autres composants. Il est possible de synthétiser les étapes de l'algorithme du modèle de Shan-Chen pour chaque composant σ, comme illustré dans la figure 2.10.

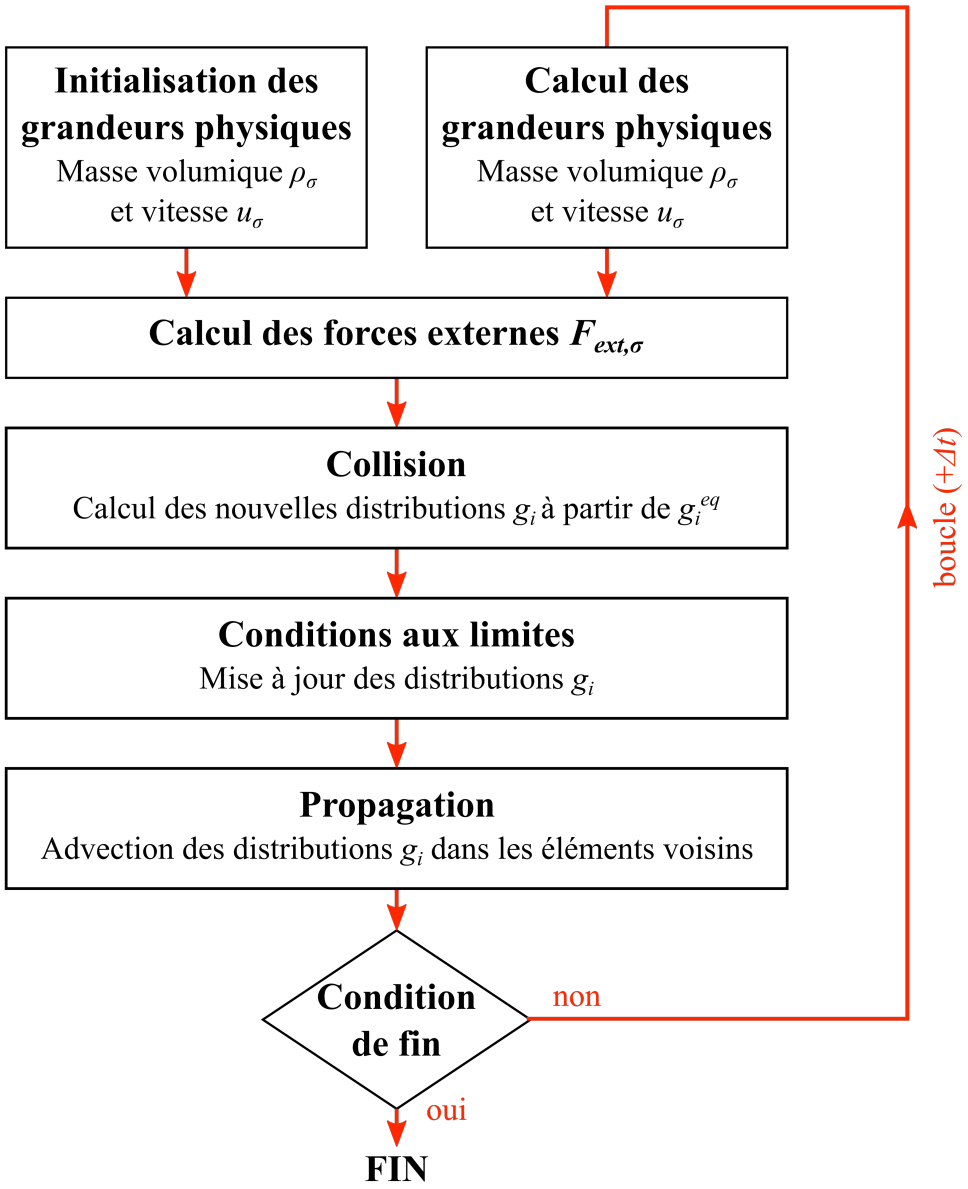

Figure 2.10 : Algorithme LBM du modèle à pseudo-potentiel de Shan-Chen intégrant le calcul des forces d'interaction et les conditions aux limites.

À l'initialisation, la masse volumique et la vitesse de chaque composant sont définies en tout nœud fluide du lattice. Ensuite, les forces externes totales sont calculées localement en fonction des voisins qui interagissent ensemble, regroupant les forces gravitationnelles, les forces d'interaction fluides et les forces d'adhésion aux solides. À partir des fonctions de distribution à l'équilibre g_i^{eq}, l'étape de collision permet de déterminer les nouvelles fonctions de distribution de particules g_i. Avant de propager les fonctions de distribution dans les éléments voisins, les fonctions de distribution sont modifiées en considérant les éventuelles conditions aux limites rencontrées.

Après la propagation, un pas de temps a été effectué, il suffit alors de déterminer si la simulation a atteint la condition de fin. Il est possible de définir différentes conditions de fin, soit via un nombre d'itération total soit, par exemple en fonction d'une vitesse d'écoulement seuil. Si la condition de fin n'est pas respectée, l'algorithme boucle à partir de la première étape de calcul des grandeurs physiques, jusqu'à valider les conditions de fin.

Chapitre 3

Bio-inspiration et biomimétisme

« We've bred out the shortcomings of the species' natural form and replaced them with assets of our own design. »

Momir Vig, *Magic: The Gathering*

Sommaire

3.1 Principe de la démarche 66
3.2 Mouillabilité des surfaces naturelles 67
3.2.1 Propriétés de mouillabilité observables dans la nature 67
3.2.2 Structures des surfaces naturelles hydrophobes 68
3.2.3 Limites fonctionnelles 70
3.3 Méthode d'optimisation évolutionnaire 72
3.3.1 Origine, concepts et applications 72
3.3.2 Algorithme génétique 73
3.3.2.1 Terminologie et implémentation de l'algorithme 73
3.3.2.2 Opérateur de sélection 76
3.3.2.3 Opérateur de croisement 77
3.3.2.4 Opérateur de mutation 78
3.3.2.5 Equilibre entre convergence et diversité 79

Ce troisième chapitre bibliographique clôture la partie sur l'état de l'art, en abordant la notion de biomimétisme. En début de chapitre, le principe et la philosophie du biomimétisme sont introduits à travers différents exemples. Par le prisme de la mouillabilité, une seconde partie se concentre sur les sources d'inspiration parmi les surfaces naturelles, tout en prenant en considération le lien entre topographie de surface et fonctionnalité. Pour finir, une dernière partie est consacrée aux méthodes numériques d'optimisations évolutionnaires et leurs applications en ingénierie des surfaces.

3.1 Principe de la démarche

Depuis des milliards d'années, la nature a développé des solutions élégantes et efficaces pour s'adapter à son environnement, survivre et prospérer. Les organismes vivants ont évolué en fonction des contraintes et des opportunités offertes par leur écosystème. En étudiant ces adaptations, il est possible de trouver des solutions innovantes aux défis s'imposant aux sociétés humaines [90, 91].

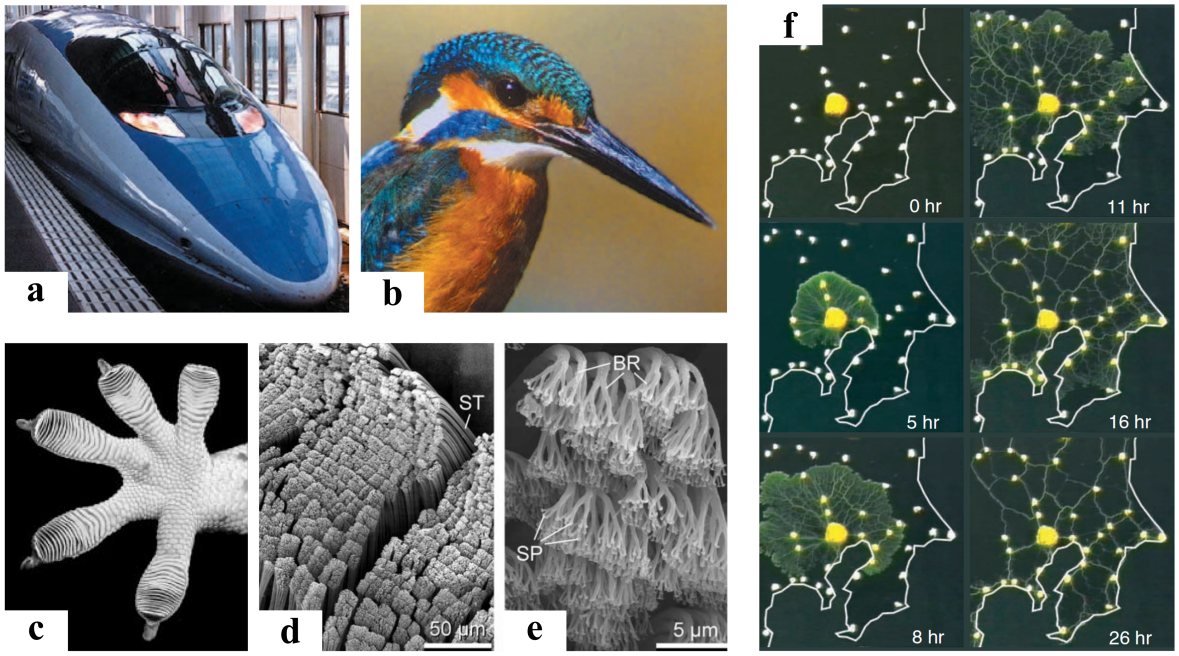

Figure 3.1 : (a,b) Illustration de la bio-inspiration du *Shinkansen* à partir du bec des martins-pêcheurs [92] ; (c,d,e) Images MEB de la surface des pattes de Gecko à différentes échelles [93, 94] ; (f) Formation du réseau de transport japonnais par *Physarum polycephalum* [95].

La bio-inspiration, consistant à observer les systèmes naturels pour concevoir et répondre à des problèmes techniques, n'est pas un concept nouveau. En effet, l'Homme a depuis toujours cherché à maîtriser son environnement en s'inspirant du vivant. Le biomimétisme approfondit cette démarche, avec pour philosophie la compréhension des stratégies mises en œuvre par la nature au-delà de l'aspect fonctionnelle, en s'intéressant également aux coûts en matière et en énergie pour la mise en œuvre et la pérennité de la solution [90]. Ainsi, l'objectif du biomimétisme est de contribuer à la recherche et aux développements de produits et de processus plus efficaces, plus résilients et moins dissonants avec l'environnement. Cette démarche propose une ap-

proche, en cohérence avec les défis environnementaux à relever, dont les ressources s'étendent à l'ensemble de la biodiversité terrestre.

En substance, la démarche biomimétique peut être résumée à trois étapes : l'observation du vivant, la compréhension des phénomènes à l'échelle du vivant pour enfin aboutir à la transposition au domaine technologique dans la société.

Les champs d'application de la bio-inspiration et du biomimétisme sont innombrables, dans diverses sphères de la société que ce soit en architecture, en santé, ou en ingénierie. Il est possible d'évoquer les réseaux de neurones en intelligence artificielle, directement inspirés du fonctionnement d'un cerveau. Il existe de nombreux autres exemples, notamment, dans le domaine du transport. Que ce soit dans le choix de la forme comme l'illustre le *Shinkansen*, le train à grande vitesse japonais, dont la géométrie aérodynamique a été inspirée du bec des martins-pêcheurs dans le but de limiter les effets sonores liés aux passages dans les tunnels [96]. Ou encore, dans le choix du réseau de transport [95, 97], comme le montrent les études sur les capacités d'optimisation de *Physarum polycephalum*, un organisme unicellulaire.

Dans le cadre des sciences des matériaux, il est possible de citer le cas du gecko, qui est étudié pour son excellente adhésion aux parois, d'origine purement mécanique et donc sans contamination de la surface [93, 94]. Ce paradigme qu'apporte le biomimétisme est tout aussi présent dans l'étude de la mouillabilité des surfaces, avec pour objectif de fonctionnaliser les surfaces suivant les propriétés recherchées sans avoir recours à l'utilisation de substances chimiques nocives pour l'Homme et l'environnement.

3.2 Mouillabilité des surfaces naturelles

3.2.1 Propriétés de mouillabilité observables dans la nature

Dans le cadre de la mouillabilité, la faune et la flore regorgent de surfaces aux caractéristiques fascinantes [98–100]. Il est possible d'observer dans la nature différents comportements spécifiques, faisant écho à des fonctions recherchées dans des applications industrielles. Historiquement, dans l'industrie, ces propriétés sont généralement atteintes par l'application de revêtements chimiques, dont l'utilisation n'est souvent pas sans conséquence sur l'environnement et les populations. Au contraire, les solutions issues de la nature se reposent à la fois sur des aspects topographiques et chimiques.

Pour de nombreuses espèces vivantes, la propriété de déperlance portée par la super-hydrophobie est essentielle pour répondre à leurs besoins. Cette propriété est largement représentée parmi les végétaux. L'exemple le plus courant étant celui de la feuille de lotus sacré *Nelumba Nucifera*, qui a développé une surface extrêmement déperlante assurant une capacité autonettoyante [98]. Cette capacité permet d'optimiser le processus de photosynthèse des feuilles. Les plantes aquatiques de surface, telles que les nénuphars, présentent des capacités similaires, leur permettant d'évacuer l'eau du dessus des feuilles pour garantir leur flottabilité [99].

Faisant face à d'autres problématiques, il est possible d'observer des surfaces super-hydrophobes dans le monde animal, notamment chez les oiseaux aquatiques [102]. En effet, pour ces volatiles exposés en permanence à l'eau, il est crucial de pouvoir sécher leurs plumages facilement pour ne pas pénaliser leurs capacités de vol. Certains insectes, comme *Gerris Remigis* plus communément connu sous l'appellation araignée d'eau, se servent de la super-hydrophobie de leurs pattes pour se déplacer efficacement à la surface de l'eau [103].

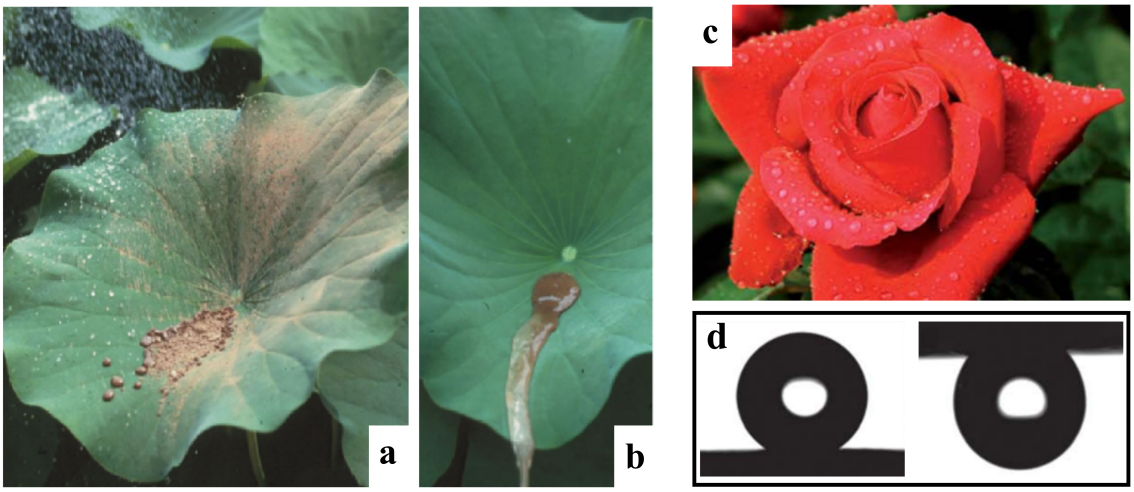

Figure 3.2 : (a,b) Photographies d'une feuille de lotus illustrant la fonction autonettoyante [99] ; (c,d) Illustration de la forte adhésion des gouttes d'eau sur les pétales de rose [101].

La nature exhibe également des comportements de goutte très hydrophobe, mais avec une très forte adhésion liquide-solide, tel qu'observé lors du dépôt d'une goutte sur un pétale de rose [104]. Ce comportement très atypique à des applications en microfluidique pour le transport de petits volumes de liquide [101].

Certains organismes vivants ont développé des mécanismes pour maîtriser leur propriété de mouillabilité en fonctions de la situation. Le papillon *Morpho Aega* en est un excellent exemple [105, 106]. En effet, les papillons de cette espèce sont capables de contrôler l'adhésion des gouttes sur leurs ailes, pouvant passer d'un comportement déperlant similaire au lotus à un système très adhésif comme les pétales de rose. Le contrôle de l'adhésion de la goutte permet au papillon de toujours évacuer la goutte vers l'extérieur des ailes pour garder le corps sec. Dans le même temps, le papillon garantit son intégrité et sa capacité à voler en nettoyant ces ailes dont la propreté est essentielle à d'autres propriétés soutenues par la texturation de leurs ailes, telles que la colorisation structurelle.

Enfin, dans le cadre de la mouillabilité, il existe d'autres comportements intéressants, notamment celui des surfaces infusées. La plante carnivore *Nepenthes Alata* présente ce type de surface infusée glissante sur les parois de leurs pièges à insectes [99, 107]. Cette méthode de capture repose sur la création d'un film liquide entre la surface infusée et les pattes pour réduire l'adhésion des insectes. Ainsi, la plante s'assure que les insectes tombent et restent coincés dans le piège, où ils finissent par être digérés. De manière similaire, dans le règne animal, les requins associent des écailles présentant une texturation fortement anisotrope à la sécrétion de mucus pour réduire leur coefficient de traînée. Ceci leur permettant d'atteindre de grandes vitesses de nage tout en limitant l'énergie à fournir [108]. Ces surfaces sont fortement étudiées dans le cadre de la lubrification liquide pour optimiser les conditions de frottement.

3.2.2 Structures des surfaces naturelles hydrophobes

Dans le cadre de cette thèse, les propriétés super-hydrophobes des surfaces naturelles sont présentées, en se concentrant principalement sur les texturations topographiques de ces surfaces naturelles.

En 1997, Neinhuis et Barthlott sont les premiers à observer la structure des feuilles du lotus *Nelumba Nucifera* [98]. À partir de leurs visualisations, ils expliquent l'origine du comportement extrêmement déperlant du lotus par la superposition de deux échelles de textures, comme le montre la figure 3.3. Une première échelle de texturation micrométrique définit un réseau de plots constitué par les papilles de la feuille, dont les dimensions sont de l'ordres de la dizaine de micromètres. S'ajoute une seconde échelle de texturation nanométrique portée par la cire épicuticulaire, qui joue également le rôle de revêtement chimique hydrophobe. Cette double échelle de texturation, permet de maintenir un état Cassie-Baxter, avec une faible adhésion de la goutte sur la surface.

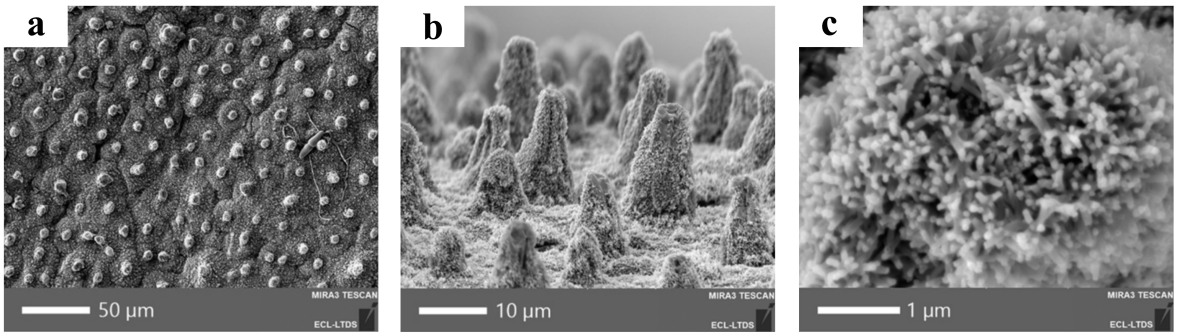

Figure 3.3 : Images MEB permettant de visualiser la texturation multi-échelle de la feuille de lotus, issues de [109]. (a) Réseau de papille vue de dessus ; (b) Microstructure des papilles observées à partir d'une vue inclinée ; (c) Tubules de dimension nanométrique formés par la cire épicuticulaire.

Les travaux de Neinhuis et Barthlott s'étendant sur un large échantillon d'espèces végétales, ils ont pu montrer que le lotus n'est pas un cas isolé. En effet, malgré des formes et des dimensions différentes, cette stratégie multi-échelle a été observée pour plusieurs surfaces végétales. La cire épicuticulaire est constituée d'un mélange d'alcools, d'alcanes et d'acides gras dont la composition varie en fonctions de la plante. De plus, les structures nanométriques des cristaux de cire sont également très variables [99, 110]. Dans le cas du lotus, la cire forme des tubules d'une centaine de nanomètres de diamètre. Les plantes sont capables de régénérer leur couche de cire épicuticulaire avec le temps, permettant une bonne durabilité du comportement superhydrophobe. Cependant, des études ont montré une évolution de la composition de la cire avec le vieillissement [111] Ce phénomène peut engendrer une évolution des propriétés de mouillabilité.

Cette stratégie de texturation multi-échelle est aussi présente chez les animaux. Notamment, chez le papillons *Morpho Aega*, présenté précédemment, dont l'observation des ailes renseigne sur leurs structures. Les ailes sont constituées d'une multitude d'écailles flexibles d'une centaine de micromètres de long, qui présentent des stries parallèles larges de plusieurs centaines de nanomètres, elles-mêmes composées de plusieurs lamelles empilées. En vol, la courbure de l'aile modifie l'agencement des textures permettant de piloter l'adhésion de la goutte, comme illustrée dans la figure 3.4 [105]. En effet, lorsque l'aile est orientée vers le corps du papillon, les écailles et les lamelles sont parfaitement plaquées, assurant un contact liquide-solide important et continu qui favorise l'adhésion. Au contraire, lorsque l'aile est dirigée vers l'extérieur, les écailles et les lamelles sont légèrement espacées permettant de piéger de l'air sous la goutte, ce qui favorise un comportement déperlant.

Bien que le developpement de textures multi-échelles soit une stratégie viable et largement

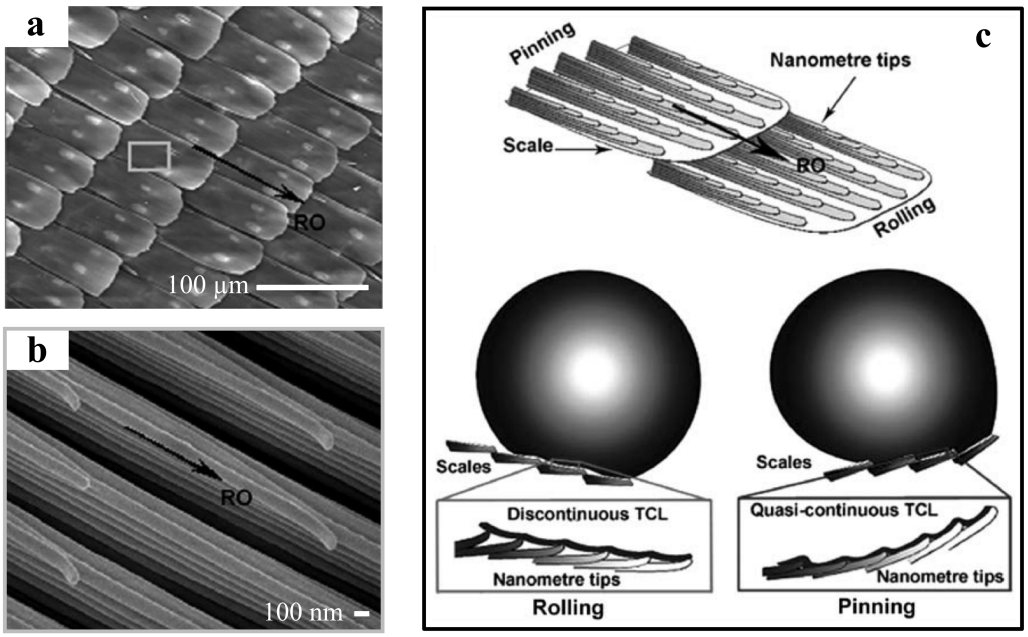

Figure 3.4 : Illustration du mécanisme de contrôle d'adhésion des gouttes sur les ailles de *Morpho Aega*, issue de [105]. (a,b) Structures multi-échelles observées au MEB ; (c) Agencement des structures en fonction de l'adhésion recherchée.

représentée pour atteindre la super-hydrophobie, toutes les surfaces multi-échelles observables dans la nature ne sont pas super-hydrophobes. L'exemple le plus concret étant celui du pétale de rose, dont l'aspect multi-échelle favorise l'ancrage du liquide [104, 112].

Que ce soit dans la faune ou dans la flore, la stratégie multi-échelle n'est pas la seule solution permettant d'atteindre la super-hydrophobie [113]. Une deuxième solution correspond au développement de géométries réentrantes permettant de piéger de l'air entre le liquide et la surface. Les structures formées à la surface des feuilles de *Salvinia Biloba* illustrent bien cette stratégie. La surface de ces feuilles est intégralement recouverte de tiges aux dimensions millimétriques, comme le montre la figure 3.5. Au sommet, la tige se divise en quatre brins qui finissent par se rassembler quelques centaines de micromètres après leurs séparations. La géométrie ainsi formée permet de piéger l'air sous la goutte. De plus, l'ancrage de la goutte sur le sommet des tiges est favorisé par une chimie hydrophile au niveau de la fusion des 4 brins.
Chez les insectes, les collemboles possèdent également des géométries réentrantes pour assurer le caractère super-hydrophobe de leurs corps [114, 115]. Dans le cas des collemboles, leur cuticule s'est développée suivant un réseau compact de motifs réentrants, avec une géométrie très différente de celle retrouvée sur la feuille de *Salvinia Biloba*, comme le montre la figure 3.5. Cependant, il est intéressant de noter que chacun de ces deux organismes a développé un système de réentrance pour garantir la même fonction. En effet, pour ces deux exemples, la super-hydrophobie de la surface a pour objectif la rétention d'air, lorsque la surface est immergée dans l'eau.

3.2.3 Limites fonctionnelles

Il est toutefois important de discuter des limites du biomimétisme. La première limite est indissociable de la démarche, tant elle est inhérente à la notion d'évolution. En effet, suite à des millions d'années d'évolution, les organismes vivants se sont adaptés et ils continuent d'évoluer en fonction de leur environnement, lui-même en perpétuel changement. Les observations actuelles

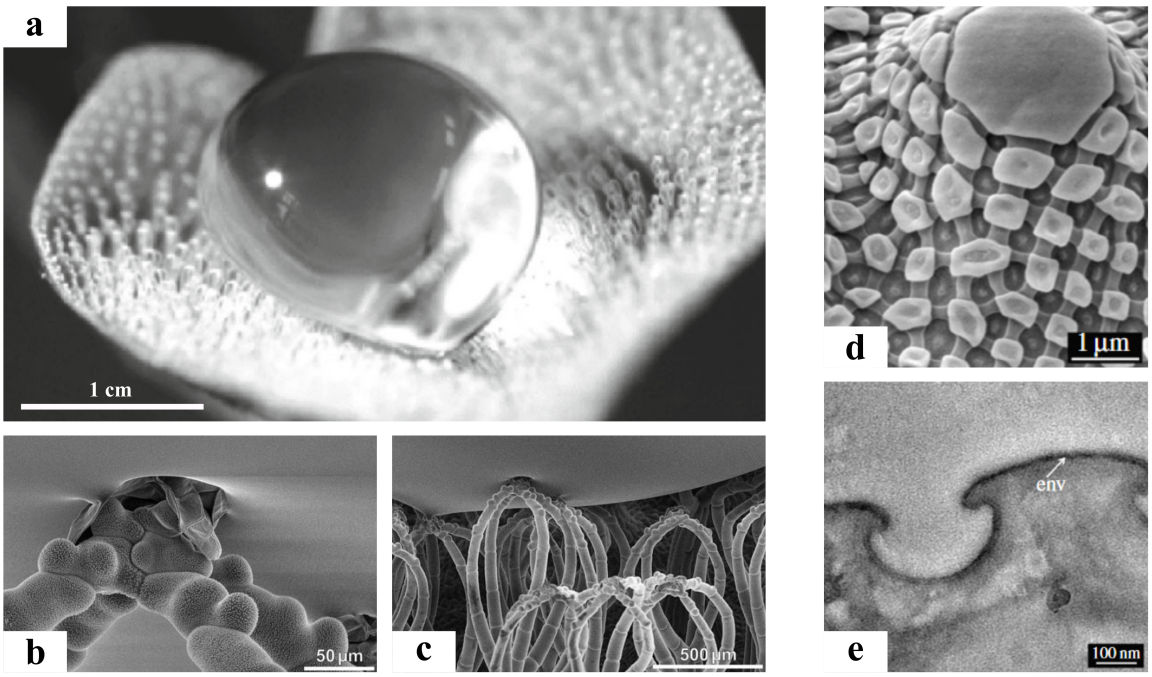

Figure 3.5 : Exemples de structures naturelles réentrantes garantissant le caractère super-hydrophobe de la surface. (a,b,c) Feuilles de *Salvinia Biloba* [99, 113] ; (d,e) Cuticule de collemboles [114].

du vivant ne représentent qu'une image dans l'évolution de l'espèce. Au regard du passé et du devenir d'une espèce, rien ne garantit qu'une structure organique observée soit le résultat de l'optimisation d'un trait caractéristique associé à une fonction, ou le résidu d'un ancien besoin. De plus, au sein d'un environnement, les espèces se doivent de répondre à une multitude de besoins distincts. Ainsi, les surfaces naturelles reflètent d'un compromis entre diverses fonctions. Il suffit de reprendre l'exemple du papillon *Morpho Aega* pour illustrer cette multiplicité fonctionnelle [116]. Comme expliqué précédemment, la structure des ailes, permettant le contrôle de l'adhésion des gouttes, répond à une nécessité de protéger le corps des liquides. Mais ces structures participent également à la coloration des ailes, dont le papillon a besoin pour des fonctions de contrôle de la température du corps, de camouflages et d'identification pour la reproduction.

Une autre grande limite, notamment en science des matériaux, est liée à la complexité des structures naturelles. En effet, les surfaces naturelles présentent plusieurs échelles de texturations à la fois chimiques et topographiques, dont l'agencement et les géométries sont difficilement reproductibles. Bien qu'il existe des procédés pour reproduire certaines de ces surfaces [117–121], les problématiques de production de ces texturations restreignent le nombre de systèmes naturels d'intérêt. De plus, si les méthodes sont viables en termes de temps de fabrication, des ressources consommées et de l'énergie dépensée à l'échelle d'un échantillon, elles ne sont pas forcément applicables à l'échelle d'un produit fini.

3.3 Méthode d'optimisation évolutionnaire

3.3.1 Origine, concepts et applications

Comme illustré dans la partie précédente, les organismes vivants présentent des traits caractéristiques, un phénotype, assurant des fonctions adaptées à leurs besoins. Charles Darwin observe que les espèces vivantes sont en perpétuel changement, permettant l'apparition et la disparition de différents traits caractéristiques, dont la sélection est conditionnée par leur habitat naturel [122]. Ses observations le mènent à définir la théorie de l'évolution, dans laquelle les espèces soumises à la sélection naturelle changent pour s'adapter à leur écosystème. Suite à la découverte de la génétique par Gregor Mendel [123], Theodosius Dobzhansky [124] et Ernst Mayr [125] approfondissent la théorie de l'évolution, notamment, en incorporant des notions de variations aléatoires du génotype des espèces permettant l'expression de nouveau phénotype. En substance, le processus d'évolution des espèces est une méthode d'optimisation naturelle, capable de répondre à des problèmes multi-fonctionnels dépendant d'un grand nombre de paramètres.

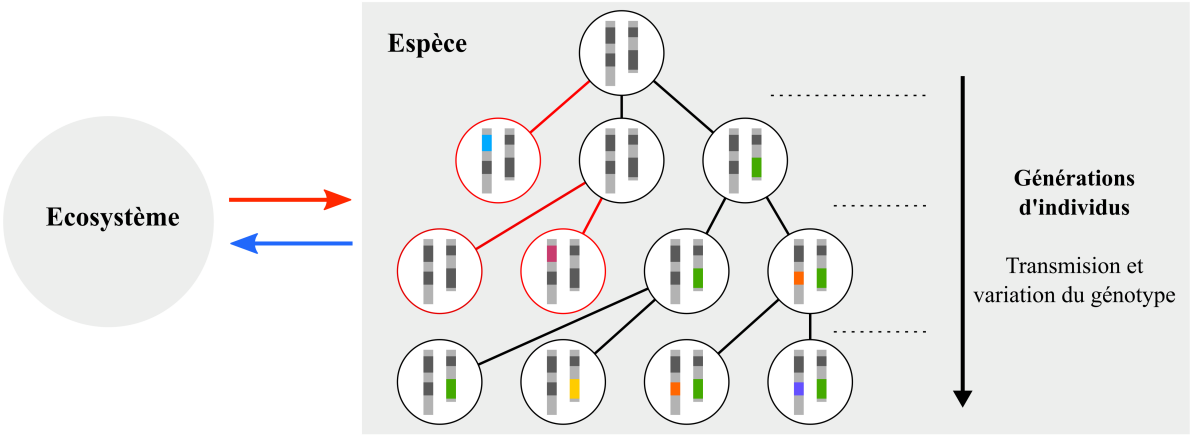

Figure 3.6 : Illustration de la théorie de l'évolution. En interaction avec son écosystème, une espèce évolue en sélectionnant les variations les plus adaptées de son génotype.

Dans la nature, l'évolution d'une espèce est observable à une échelle de temps infiniment supérieure à celle d'un individu de l'espèce. Dès l'arrivée des premiers ordinateurs, plusieurs scientifiques cherchent à étudier les processus d'évolution numériquement à des échelles de temps significativement plus courtes. Rechenberg et Schwefel développent des stratégies pour imiter l'évolution des espèces numériquement avec pour objectif l'optimisation de paramètres dans des problèmes non-linéaires [126, 127]. Durant la même période, Holland et Fogel développent parallèlement des systèmes numériques capables de s'adapter automatiquement à leur environnement [128, 129]. De cette effervescence, résulte un ensemble de programmes et d'algorithmes bio-inspirés pouvant être regroupés sous l'appellation d'algorithmes évolutionnaires, ou *evolutionary algorithms* en anglais (EA).
D'après De Jong [130], il est possible de définir quatre caractéristiques de base sur lesquelles repose l'ensemble des algorithmes évolutionnaires :

1. Un EA maintient en permanence un ensemble de plusieurs solutions possibles et non une solution unique, en opposition aux nombreuses autres méthodes d'optimisation numérique.

2. Au sein de l'EA, certaines solutions peuvent être remplacées par de nouvelles solutions.

3. La performance de chaque solution de l'EA doit pouvoir être quantifiée pour choisir quelles solutions sont remplacées.

4. À chaque itération de l'EA, les nouvelles solutions ajoutées sont construites à partir de la variation de solutions existantes.

En respectant l'ensemble de ces quatre caractéristiques, à chaque itération, l'EA tend à optimiser l'ensemble de solutions ainsi que la meilleure solution. De plus, ces quatre caractéristiques de base peuvent être implémentées et étendues de diverses façons permettant une très grande diversité de modèles d'EA [130–132].

Toutes les recherches sur les algorithmes évolutionnaires n'ont pas pour objectif la résolution de problèmes, bien que ce soit le principal champ d'application de ces systèmes. Une autre application s'intéresse à améliorer la compréhension des systèmes évolutifs naturels à travers une approche numérique. Les algorithmes associés à cette démarche priorisent donc la fidélité du modèle numérique par rapport au système naturel, plutôt que leurs capacités de résolution.

De par la grande variété de modèles et leur simplicité d'implémentation, les EA en tant que méthode d'optimisation numérique sont des outils répandus dans un large spectre d'applications. En principe, les EA peuvent être appliqués à des problèmes complexes, à la seule condition de pouvoir évaluer quantitativement les solutions, sans forcement nécessiter de formuler le problème suivant une expression mathématique. De plus, ils sont adaptés à la résolution de problèmes avec un nombre de paramètres allant jusqu'à plusieurs dizaines de paramètres, ce qui favorise leur utilisation. Parmi leurs différents domaines d'application, les EA sont fortement représentés en gestion pour des problématiques de planifications et d'optimisation d'itinéraires [133, 134]. Le traitement d'images et de vidéo est un autre domaine d'application courant des EA [135, 136]. Les propriétés des EA leur permettent de générer des agents informatiques capables d'automatiquement s'adapter, ce qui est entre autre utilisé dans les jeux vidéos [137]. Enfin, dans le cadre de problèmes paramétriques, les EA trouvent de nombreuses applications que ce soit pour choisir les conditions optimales de procédé de fabrication [138, 139], de synthèse chimique [140], ou la conception de structures [141], de réseaux [142] ou de formes optimales [143, 144].

Dans le cadre de cette thèse, l'objectif est de proposer une méthode pour concevoir des surfaces texturées bio-inspirées répondant aux problématiques de mouillabilité. Ainsi, la suite de ce chapitre est consacrée aux algorithmes génétiques, *genetic algorithm* en anglais (GA), dont l'efficacité n'est plus à démontrer, notamment pour l'optimisation de forme [145–147].

3.3.2 Algorithme génétique

3.3.2.1 Terminologie et implémentation de l'algorithme

Comme leur nom l'indique les algorithmes génétiques sont inspirés de la génétique telle que définie en biologie. Dans un premier temps, il est donc nécessaire de présenter les bases de la génétique, afin de comprendre l'origine des principes sur lesquels les GA sont construits.

En biologie, le terme phénotype désigne l'ensemble des caractéristiques observables chez un organisme [148, 149]. Par définition, le phénotype d'un individu est encodé physiquement au sein de l'organisme à travers un ensemble de gènes, le génotype. Plus généralement, à l'échelle de l'espèce et non de l'individu, cet ensemble des gènes est nommé génome. Le génome est encodé à travers différents éléments physiques, nommés chromosomes. Chaque gène possède

une position fixe dans le génome de l'espèce, le locus, correspondant à une position spécifique sur l'un des chromosomes. Par construction, les différents gènes peuvent s'exprimer sous différentes variations que l'on nomme les allèles. Ainsi, un génotype n'est qu'une expression possible du génome parmi un très grand nombre de variations possibles. Enfin, deux individus aux génotypes similaires et soumis au même environnement vont exprimer des phénotypes semblables.
Lors de la genèse d'un nouvel individu, le génotype est recomposé à partir des ascendants. De cette façon, le descendant hérite d'une partie du génotype de chacun des ascendants. Cependant, chaque gène du nouvel individu est susceptible de subir une mutation, résultant en l'expression d'un allèle différent et donc d'une variation du génotype.

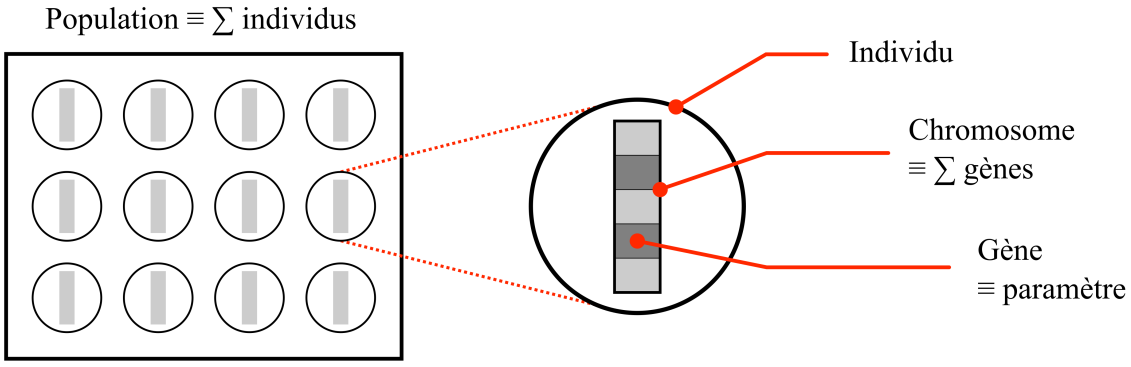

Figure 3.7 : Illustrations des notions de population, d'individu, de chromosome et de gène dans le cadre des algorithmes génétiques.

Les GA reprennent donc les grands principes de la génétique, énoncés précédemment, ainsi que la terminologie associée, comme illustrée dans la figure 3.7 [150, 151]. Pour un GA, l'ensemble des solutions à optimiser est appelé la population, dont chaque solution est désignée par le terme individu. Comme en biologie, chaque individu est défini par un ensemble de gènes encodé sur un chromosome. Cependant, dans le cas des GA, chaque gène correspond à un des paramètres de l'espace d'étude, dont la valeur, aussi appelée allèle, est à optimiser. Ainsi, un GA a pour objectif d'optimiser la population et le génotype le plus performant au fur et à mesure des générations. Le terme de génération correspond aux itérations de la boucle d'optimisation de l'algorithme.

Pour l'encodage des gènes sur le chromosome, il existe principalement deux méthodologies :

1. Historiquement, les GA ont été développés avec un encodage binaire, c'est-à-dire que chaque paramètre est traduit en binaire, puis assemblé bout à bout pour former le chromosome. Un gène correspondant à une position unique et fixe du chromosome, cette méthode implique que chaque paramètre est codé sur plusieurs gènes limités aux valeurs 0 et 1.

2. La seconde méthode correspond à l'encodage flottant. Suivant cette méthodologie, chaque paramètre est représenté par un unique gène dont la valeur varie au sein d'un intervalle de valeur réelle. Ceci permettant, en théorie, une infinité d'allèles possibles.

Bien que l'encodage binaire soit l'encodage d'origine des GA, bénéficiant donc de nombreux travaux théoriques, l'encodage flottant montre de bons résultats et semble plus adapté dans le cas

de paramètres continus [140]. D'autre part, dans le cas de l'encodage binaire, l'augmentation de la précision des paramètres implique une augmentation de la longueur du chromosome, rendant la convergence de l'algorithme plus difficile.

Une fois les termes définis, il est possible de présenter la stratégie d'optimisation des GA, à travers les différentes étapes à implémenter. Pour commencer, la première étape consiste à construire la population initiale, composée de N_{pop} individus dont le génotype est généré aléatoirement, pour couvrir l'ensemble de l'espace d'étude. Dans certains cas spécifiques, il peut être intéressant de forcer une partie des individus initiaux dans un sous-espace de l'espace d'étude, où les solutions optimales sont susceptibles d'être trouvées [150].

Ensuite, l'algorithme rentre dans la boucle d'optimisation, où interviennent les mécanismes évolutifs, comme représenté par la figure 3.8.

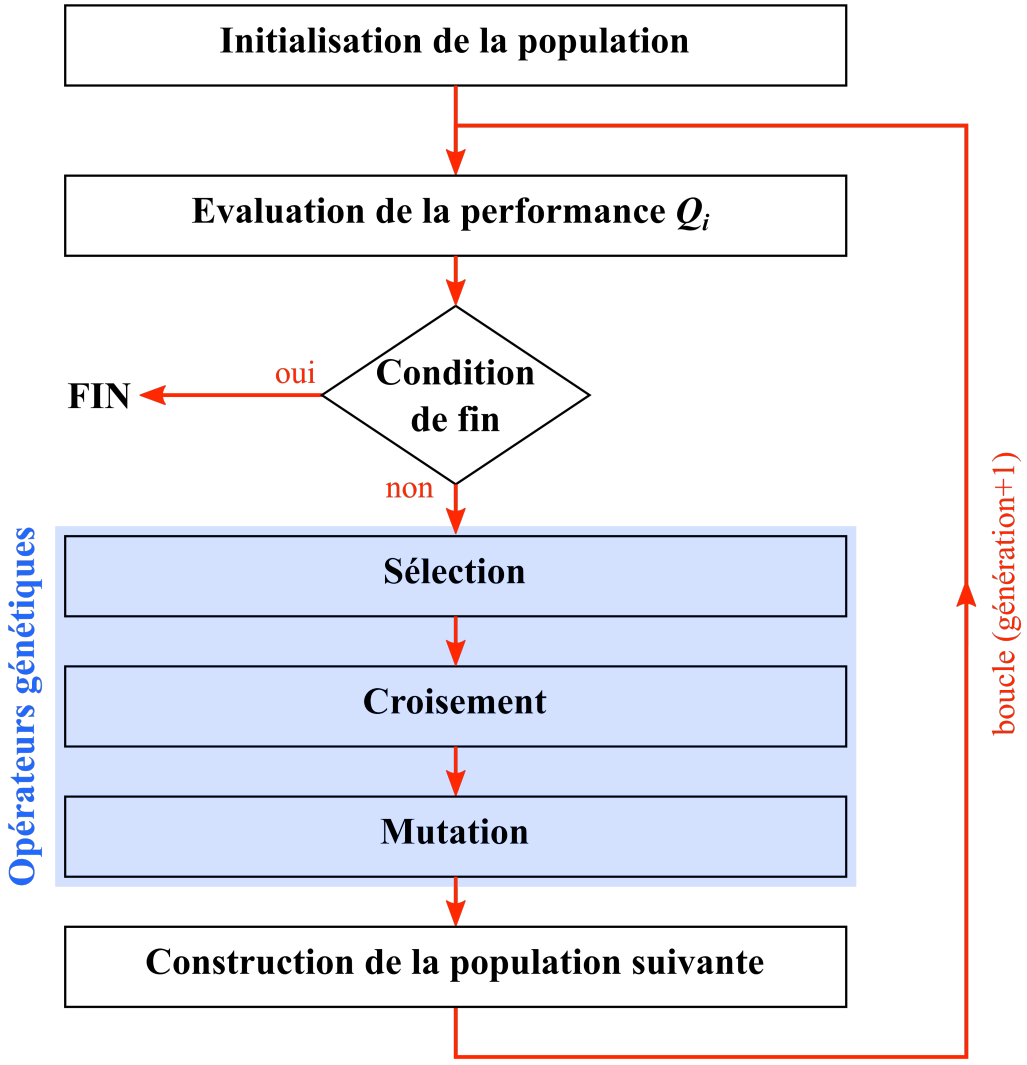

Figure 3.8 : Représentation des étapes générales d'un algorithme génétique.

- **L'étape d'évaluation** :
  Au sein de la population, il convient d'évaluer quantitativement chaque individu i à travers une fonction de performance, ou critère Q_i.

- **L'étape de sélection** :
  En fonction de l'évaluation de performance des individus, $N_{parents}$ individus sont sélectionnés pour engendrer la population suivante. Les individus ainsi sélectionnés sont appelés parents. La sélection est considérée comme le premier opérateur génétique, dont il existe plusieurs méthodologies d'implémentation qui sont présentées ultérieurement.

- **L'étape de croisement** :
  Durant cette étape, qui correspond à la reproduction des individus, les génotypes des parents sont croisés deux à deux. Par ce croisement des génotypes, $N_{enfants}$ nouveaux individus, les enfants, sont générés. Le croisement correspond au deuxième opérateur génétique, qui est également détaillé par la suite.

- **L'étape de mutation** :
  De manière analogue à la biologie, les gènes des enfants sont susceptibles de subir une mutation lors de leur création. Cette variation aléatoire du génotype, considérée comme le troisième opérateur génétique, permet une meilleure exploration de l'espace de recherche. Les différentes méthodes pour définir les mutations sont précisées dans la suite du chapitre.

- **L'étape de construction de la population suivante** :
  Une fois l'ensemble des opérateurs génétiques réalisés, il convient de constituer une population de N_{pop} individus, pour la génération suivante, à partir des $N_{parents}$ et $N_{enfants}$.

L'algorithme réitère les étapes de la boucle d'optimisation jusqu'à atteindre sa condition de fin. Il existe différentes conditions de fin possible, dont l'une des plus simples est d'imposer un nombre de générations K_{gen}. Selon l'application, il est également pertinent de s'arrêter dès qu'un individu atteint une performance satisfaisant un critère spécifique, mais dans cette condition rien n'assure que la solution finale soit la plus optimale [150]. Au contraire, pour aider l'algorithme à ne pas s'arrêter sur un optimum local, certaines études définissent une condition de fin en fonction d'un nombre de générations successives sans modification du meilleur individu $i_{optimal}$, ou sans amélioration significative de la performance maximal $Q_{optimal}$, qu'il est possible de noter K_{series} [150].

3.3.2.2 Opérateur de sélection

Une fois l'ensemble des individus évalué, l'étape de sélection a pour objectif de choisir quels génotypes sont utilisés pour générer les prochains individus. Dans le but de sélectionner les génotypes les plus aptes à répondre efficacement à la problématique, les opérateurs de sélection sont généralement dépendants de la fonction de performance Q_i. Cette section est consacrée à la présentation d'opérateur de sélection couramment traités dans la littérature.

1. Une première approche possible est de directement sélectionner les $N_{parents}$ les plus adaptés en ordonnant les individus du plus performant au moins performant. Cette méthode très simple est appelée choix des meilleurs.

2. À l'inverse, il est possible de construire un opérateur basé sur une sélection aléatoire uniforme. Dans ce cas, chaque individu à la même probabilité P_i d'être sélectionné :

$$P_i = \frac{1}{N_{pop}} \tag{3.1}$$

   Bien que la sélection aléatoire permette de conserver une forte diversité des solutions,

cette méthode comporte un inconvénient majeur. En effet, avec cet opérateur, la sélection est indépendante de la performance. Le risque de perdre les individus performants d'une génération à l'autre est donc important.

3. La sélection par roulette, aussi désignée *fitness proportional selection* en anglais (FPS), associe une sélection aléatoire tout en conservant une forte dépendance à la performance des individus [151, 152]. Cette méthode consiste à exprimer la probabilité de sélection d'un individu en fonction de sa performance par rapport aux autres individus.

$$P_i = \frac{Q_i}{\sum_i Q_i} \tag{3.2}$$

S'il existe de très grands écarts de performance entre les individus, alors les meilleurs individus sont très majoritairement représentés parmi les individus sélectionnés. Ainsi, la diversité génétique dans la population diminue rapidement. Avec l'effondrement de la diversité, l'AG peut certes converger rapidement, mais risque également d'être piégé autour d'un optimal local.

4. La sélection par rang, ou *linear rank selection* en anglais (LRS), reprend le principe de la méthode FPS en linéarisant l'écart entre les performances des individus [152]. Dans un premier temps, les individus sont classés en fonction de leurs performance Q_i. Puis l'ordre dans le classement octroie un rang $O(i)$ à l'individu au sein de la population. Par construction, le rang le plus élevé est égal à N_{pop} et le rang le plus bas est égal 1. Une fois les rangs attribués, la probabilité de sélection est exprimée en fonction du rang et non de la performance.

$$P_i = \frac{O(i)}{N_{pop} \cdot (N_{pop} - 1)} \tag{3.3}$$

Cette méthode de sélection réduit le risque de convergence prématurée vers un optimal local [152].

3.3.2.3 Opérateur de croisement

À la suite de la sélection, des groupes, très généralement des paires, de parents sont formés pour générer de nouveaux individus. L'opérateur de croisement correspond donc aux règles pour combiner les génotypes des parents lors de la genèse des enfants. Habituellement, un premier génotype est construit puis un second génotype complémentaire est produit, mais il est en théorie possible de générer plus d'enfants à partir des parents. Il existe une grande variété de méthodes possibles pour définir le croisement des génotypes. Plusieurs opérateurs sont présentés dans cette section, en considèrant une paire de parents :

1. La méthode la plus simple consiste à déterminer aléatoirement gène après gène quel allèle prendre entre les deux parents. Cet opérateur aléatoire revient à successivement avoir une chance sur deux de prendre l'allèle du parent i_1 ou du parent i_2.

2. L'opérateur de croisement par deux-points propose de déterminer un point de croisement entre deux locus du chromosome. Lors de la combinaison des génotypes, à chaque point de croisement, le parent dont les allèles sont sélectionnés alterne.
Cette méthode peut être étendue à l'opérateur de croisement par x-points, en définissant plusieurs points de croisement. Après chaque croisement, le parent à partir duquel l'allèle est choisi change. Par construction, pour un chromosome de longueur L_{ch}, le nombre de points de croisement x ne peut pas dépasser la valeur $L_{ch} - 1$.

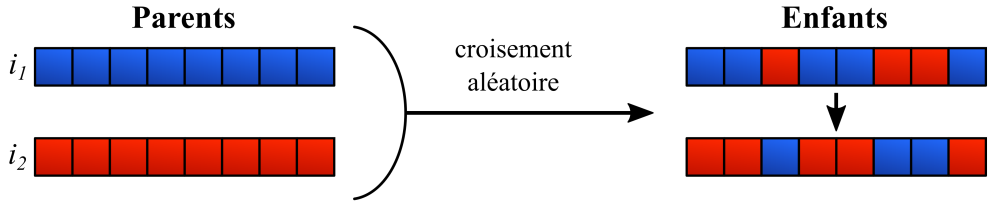

Figure 3.9 : Illustration de l'opérateur de croisement aléatoire.

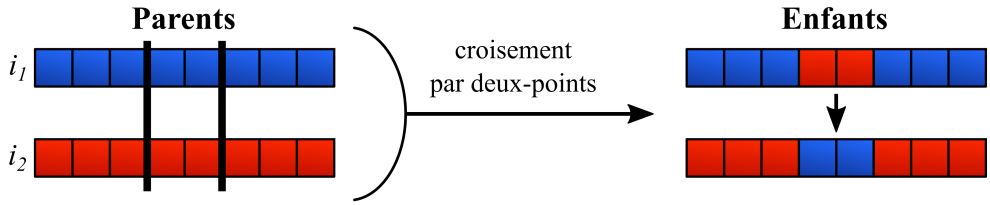

Figure 3.10 : Illustration de l'opérateur de croisement par deux-points.

3. Il est également possible de construire des opérateurs de croisement dit heuristiques [153]. Contrairement aux deux autres opérateurs présentés, les allèles des enfants peuvent varier légèrement de celui des parents, permettant une étude plus approfondie de l'espace d'étude. Il existe plusieurs opérateurs heuristiques, certains sont consacrés à l'exploration, alors que d'autres sont dédiés à l'exploitation, comme illustré dans la figure 3.11. L'exploitation correspond à l'étude des valeurs comprises dans le sous-espace borné par les allèles des parents, alors que l'exploration correspond à l'étude de valeurs à l'extérieur de ce sous-espace de recherche.

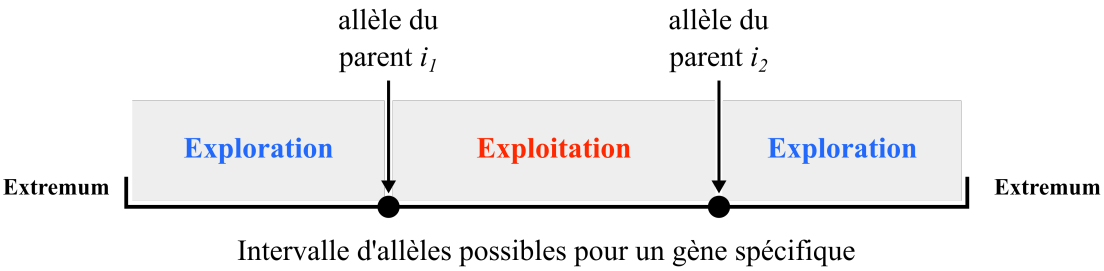

Figure 3.11 : Représentation des notions d'exploration et d'exploitation de l'espace d'étude à l'échelle d'un seul gène.

Par exemple, il est possible de présenter l'opérateur heuristique de Wright [153, 154]. Cet opérateur permet l'exploration de l'espace d'étude. Il est possible de noté $a_{l,1}$ l'allèle du parent i_1 pour le gène situé au locus l. En considérant, les deux parents i_1 et i_2, avec i_1 le parent le plus performant de la paire, il est possible d'exprimer $a_{l,W}$ l'allèle de l'enfant tel que :

$$a_{l,W} = \varepsilon \left(a_{l,1} - a_{l,2} \right) + a_{l,1} \tag{3.4}$$

Avec ε une valeur choisie aléatoirement et comprise entre 0 et 1. Cependant, la valeur $a_{l,W}$ doit rester limitée aux valeurs possibles dans l'espace de recherche.

3.3.2.4 Opérateur de mutation

Lors de l'étape de mutation, chaque enfant a une probabilité, noté P_{mut}, d'être sujet à une mutation. Par mimétisme des systèmes naturels, la mutation doit être un événement relativement rare

afin de pouvoir conserver une cohérence entre un individu et ses descendants. Ainsi, la probabilité est généralement inférieure à 10% bien qu'il existe une grande disparité des valeurs de P_{mut} dans la littérature. Par exemple, dans ses travaux, Bäck propose de choisir $P_{mut} = 1/L_{ch}$ [155]. Certaines études proposent de faire évoluer la probabilité de mutation en fonction de la génération, ou encore en fonction de la position de l'individu dans l'espace de recherche [156–158].
Une fois la mutation d'un individu décidée, chaque gène du chromosome a une probabilité $P_{mut,l}$ de muter. Généralement, cette probabilité est choisie de sorte qu'un ou deux gènes subissent une variation.
Ensuite, il existe plusieurs possibilités de mise en œuvre pour appliquer la mutation au niveau du gène. La première méthode la plus couramment utilisée est de remplacer l'allèle par une autre valeur prise aléatoirement dans l'espace de recherche. Une autre méthode consiste à modifier légèrement, de 10 à 20%, la valeur de l'allèle exprimé par le gène muté [140].

3.3.2.5 Equilibre entre convergence et diversité

Malgré les différents avantages qu'apportent les GA, il existe certaines difficultés à leur implémentation, notament dans le choix des différents paramètres. En effet, l'efficacité d'un GA résulte en un compromis entre la convergence et la diversité. Or, ces deux caractères sont fortement dépendants des différents paramètres de l'algorithme, que ce soit la taille de la population, la définition de la fonction de performance ou le choix des méthodes utilisées pour les opérateurs génétiques.

Le choix de la taille de la population initiale est capital dans l'efficacité des GA [159, 160]. En théorie, plus la taille de la population initiale est importante plus la solution finale sera de qualité. En revanche, les coûts en ressource et en temps seront excessivement importants. À l'inverse, si la population initiale est trop petite les risques de s'arrêter sur un optimum local sont très grands.
D'autre part, le choix de la fonction de performance est également très important pour pouvoir répondre correctement au problème d'optimisation à résoudre.

Enfin, comme vu précédemment, chaque méthode d'implémentation des opérateurs génétiques comporte des avantages et des inconvénients en termes de capacité à converger rapidement où à diversifier les solutions testées. Il est donc important de choisir des méthodes complémentaires qui permettent d'équilibrer la vitesse de convergence, l'exploration et l'exploitation de l'espace de recherche [151]. Le but étant d'étudier l'ensemble de l'espace de recherche rapidement avec le moins de ressource consommée et sans se retrouver piégé dans un optimum local.

Partie II

Etude numérique du mouillage

Chapitre 4

Outil de simulation numérique

« Tout ce qui est de ce monde n'est fait que de vent... Le solide est un liquide lent... Eh oui ! Le liquide est fait d'air dense, ralenti, rendu plus épais... Notre univers, croyez-moi, n'existe qu'à force de lenteur. »

Alain Damasio, *La horde du contrevent*

Sommaire

4.1 Simulation du mouillage par la méthode Lattice-Boltzmann 84
4.2 Présentation de l'outil de simulation 86
4.2.1 Outils de calcul et caractéristiques techniques 86
4.2.2 Incorporation de surfaces complexes 87
4.2.3 Système adimensionné via le nombre de Bond 88
4.3 Post-traitement et caractérisation numérique du mouillage 91
4.3.1 Angles de contact macroscopiques 91
4.3.2 Quantification de l'interface liquide-solide 92
4.3.3 Imprégnation et ancrage 93
4.3.4 Dynamique d'étalement 95
4.4 Validation du code de simulation 95
4.4.1 Interface fluide-fluide 95
4.4.2 Angles de contact pour une surface plane 98
4.4.3 Courbure des gouttes soumises à la gravité 99
4.4.4 Essai d'inclinaison pour une surface plane 103

Ce chapitre a pour objectif de présenter, dans son ensemble, l'outil de simulation numérique du mouillage développé et exploité durant cette thèse. Pour commencer, le chapitre s'ouvre sur le choix des modèles numériques implémentés dans le code pour simuler le mouillage avec la méthode Lattice-Boltzmann. Dans une seconde partie, les capacités et les caractéristiques du code numérique ainsi que celles du calculateur sont détaillées. Dans une troisième partie, les méthodes de post-traitement, associées à l'outil de simulation et développées au cours de cette thèse, sont présentées. Pour finir, une partie intégralement consacrée à la validation du code, dans des configurations spécifiques, clôture ce chapitre dédié à l'outil de simulation.

4.1 Simulation du mouillage par la méthode Lattice-Boltzmann

Dans le cadre de cette thèse, le code LBM employé et approfondi est un code développé au sein du laboratoire, dont le développement a été initié durant une thèse précédente [161]. Pour la simulation numérique des propriétés de mouillabilité des surfaces, il a été choisi d'appliquer la méthode des pseudo-potentiels de Shan-Chen, comme présentée dans le chapitre 2 (Section 2.3.3). De cette manière, la physique des interactions fluide-fluide est contrôlée par un paramètre numérique : le potentiel d'interaction inter-fluide $G_{\sigma\bar{\sigma}}$. De plus, en se référant au modèle de Martys-Chen [78], amélioré par Sukop *et al.* [79], les interactions fluide-solide sont également contrôlées par $G_{\sigma\bar{\sigma}}$. La valeur de $G_{\sigma\bar{\sigma}}$ utilisée dans les simulations est discutée ultérieurement lors de la validation de l'interface fluide-fluide (Section 4.4.1).

Dans le cadre des travaux numériques initiés dans l'équipe, le choix de ce modèle repose sur plusieurs raisons. Premièrement, l'approche par pseudo-potentiels permet de directement régir les interactions entre les particules, ce qui permet de conserver une approche physique des phénomènes de cohésion ou d'adhésion à l'échelle de paquet de particules. De plus, les étapes qui sont rajoutées par la mise en œuvre de cette méthode sont relativement peu coûteuses en temps de calcul. Il est également intéressant d'utiliser le modèle à pseudo-potentiel au vu de sa large utilisation dans la littérature, et ainsi de profiter des améliorations apportées par la communauté scientifique. Par exemple, les travaux de Sukop *et al.* simplifient la simulation du mouillage par cette méthode en reliant directement le potentiel d'interaction avec les propriétés intrinsèques du solide [79].

Pour les simulations présentées au sein de cette thèse, l'expérience de la goutte sessile est simulée par un système multi-composants mono-phasique. En effet, chaque composant fluide est défini à travers son propre lattice, sans possibilité de changement de phase. Les simulations sont définies avec un lattice dédié au liquide qui compose la goutte, généralement de l'eau, mais rien n'empêche de simuler un autre liquide comme de l'huile par exemple. Le second lattice correspond aux particules composant l'air ambiant, en considèrant l'air comme un gaz parfait. Les deux fluides sont simulés avec des rapports de viscosité cinématique ν_L/ν_V et de masse volumique ρ_L/ρ_V égaux à 1. Ce paramétrage implique une hypothèse forte sur la dynamique d'étalement de la goutte, qui doit être supposée quasi-statique. Or, cette hypothèse est couramment admise dans le cadre du mouillage partiel d'une goutte déposée sur une surface.

En pratique, les simulations en 2D sont réalisées avec un schéma de discrétisation D2Q9, et les simulations en 3D avec une discrétisation de type D3Q15. En effet, pour les travaux réalisés durant cette thèse, les schémas D3Q15 et D3Q19 donnent des résultats très proches, il a donc été décidé d'utiliser la discrétisation la moins coûteuse en ressource de calcul. De plus, le modèle de Shan-Chen est appliqué en utilisant le schéma de force d'origine (VSM) et un voisinage

d'ordre 4 (V_{o4}). Ceci correspond à l'ordre de voisinage le plus classique, avec seulement les nœuds les plus proches qui interagissent ensemble. Encore une fois, au vu du faible gain en précision pour notre application, ce choix est justifié par une volonté de limiter la mémoire et le temps de calcul nécessaires aux simulations.

Pour les systèmes étudiés, les conditions aux limites sont choisies parmi celles présentées dans le chapitre 2 (Section 2.2.3.1). Aux frontières entre les fluides et le solide, il a été choisi d'appliquer des conditions de rebond *half-way bounce-back*. Pour les limites extérieures, des conditions périodiques sont implémentées, comme illustrées par la figure 4.1

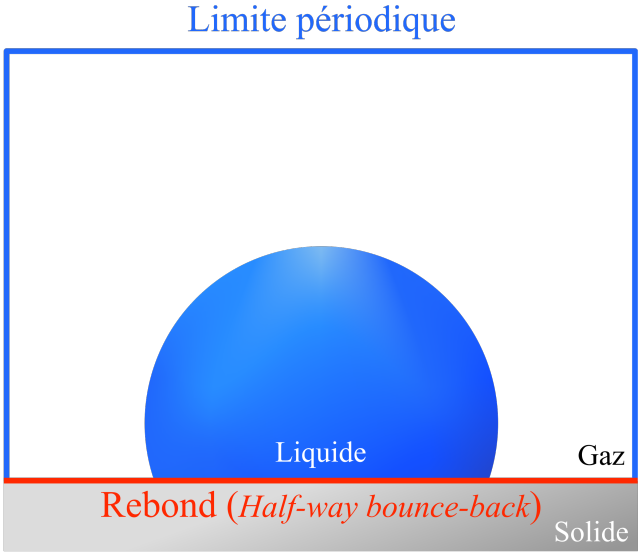

Figure 4.1 : Illustration en 2D des conditions aux limites pour les simulations de mouillabilité des surfaces par goutte sessile.

À l'initialisation des simulations, une goutte parfaitement sphérique de liquide est positionnée par rapport à la surface. En 3D, la position est dans un premier temps définie suivant les axes x et y, avec l'origine placée au centre de la surface. Suivant l'axe z, l'origine est définie lorque la goutte est tangente au solide. Par construction, l'origine en z dépend du volume de goutte et de la topographie de la surface. La position exacte de la goutte à l'initialisation est donc configurée à travers trois paramètres géométriques, qui définissent la position de la goutte par rapport à la position d'origine, comme présentée en 2D dans la figure 4.2. Ces trois paramètres géométriques sont notés X_{Offset}, Y_{Offset} et Z_{Offset}, correspondant respectivement au décalage suivant chaque axe.

Enfin, lors de cette initialisation, les masses volumiques locales dans chacun des deux lattices fluides sont à définir en fonction de la géométrie de la goutte. Dans le lattice du liquide, la masse volumique locale des nœuds au cœur de la goutte est fixée à 1 et 0 en-dehors. À l'inverse, pour le gaz, la masse volumique est initialisée à 1 à l'extérieur de la goutte et 0 à l'intérieur. Au niveau de l'interface liquide-gaz, une fonction tangente hyperbolique est utilisée pour assurer une interface progressive entre les deux composants.

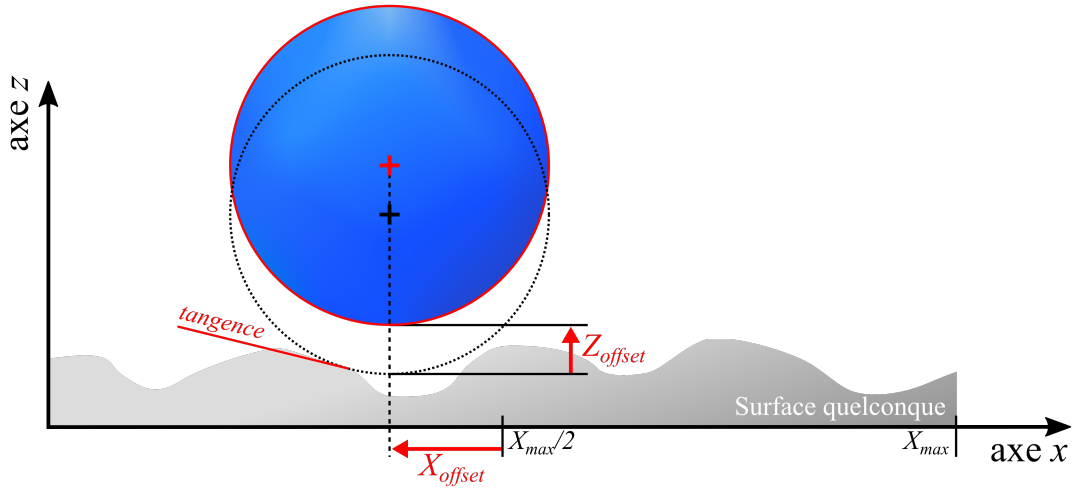

Figure 4.2 : Représentation en 2D des paramètres de positionnement de la goutte à l'initialisation.

4.2 Présentation de l'outil de simulation

4.2.1 Outils de calcul et caractéristiques techniques

L'outil de simulation, utilisé et développé durant cette thèse, prend la forme d'un programme en Python. Le code python comprend l'ensemble de l'architecture de l'algorithme, de la gestion des paramètres, jusqu'à la sauvegarde et au post-traitement des données générées. Cette partie est traitée directement sur l'unité centrale de calcul, ou *central processing unit* (CPU). Cependant, le programme est couplé à l'outil CUDA pour l'allocation de mémoire et la définition des kernels de calcul à exécuter en parallèle sur la carte graphique, *graphics processing unit* en anglais (GPU). En effet, l'ensemble des calculs inhérents à la LBM est effectué sur une carte graphique, afin de profiter au maximum de la parallélisation de la méthode et de réduire considérablement le temps de calcul par rapport à une implémentation directe sur le CPU. À noter que pour l'ensemble des calculs géré par CUDA, les flottants sont définis en simple précision. De plus, pour la visualisation des résultats, le code repose sur la bibliothèque logicielle VTK, dont est issu, par exemple, le logiciel de visualisation de données ParaView.

Pour les différentes simulations réalisées dans cette thèse, le code a été exécuté sur deux configurations en fonction des besoins et de la disponibilité.

1. Un ordinateur de calcul doté d'une carte graphique Nvidia Quadro P5000, possédant 16 Go de mémoire (NQ5).

2. Le super-calculateur Newton disponible sur le site de L'École Centrale de Lyon. Cependant, l'architecture actuelle du code limite à l'utilisation d'un seul GPU. Dans cette configuration, les calculs sont effectués sur une carte graphique Nvidia Quadro RTX 6000, possédant 24 Go de mémoire (NQ6).

La capacité technique de la carte graphique, spécifiquement la quantité de mémoire, conditionne le nombre de nœuds maximum dans les systèmes à simuler. Ainsi, un récapitulatif de cette limite est présenté dans le tableau 4.1, en fonction de la configuration et du schéma de discrétisation DdQq.

Schéma de discrétisation	D2Q9		D3Q15	
Configuration de calcul	NQ5	NQ6	NQ5	NQ6
Nombre de noeuds maximum	43 450 000	65 175 000	27 000 000	40 500 000
Taille du côté du lattice [LU] pour un lattice uniforme	≤ 6591	≤ 8073	≤ 300	≤ 343

Tableau 4.1 : Limite en taille des systèmes simulés.

Une fois la limite de la taille des lattices discutée, il est important de présenter les vitesses de calcul en fonction de la configuration utilisée. En effet, il est impératif de pouvoir déterminer le temps de calcul nécessaire pour une simulation avant de l'exécuter. Le tableau 4.2 présente les vitesses de calcul caractéristiques du code en fonction de la configuration de calcul et le schéma de discrétisation. Ces vitesses sont des valeurs approchées, qui ont pour but d'estimer les temps de calcul des simulations à priori. Elles ont été calculées en divisant le temps de calcul total d'exécution du code par le nombre de nœuds sur l'ensemble des itérations. Par conséquent, les vitesses de calcul sont exprimées en nœuds par seconde ($n \cdot s^{-1}$), en moyennant le temps d'exécution de l'ensemble des itérations de calcul et des temps sauvegardés.

	Schéma de discrétisation	
	D2Q9	D3Q15
NQ5	$1,2 \cdot 10^8$	$9,8 \cdot 10^7$
NQ6	$2,1 \cdot 10^8$	$1,8 \cdot 10^8$

Tableau 4.2 : Vitesse de calcul caractéristique du code en nœuds par seconde ($n \cdot s^{-1}$).

Il est important de noter que l'opération de sauvegarde est très coûteuse en temps, car elle nécessite de dialoguer entre le CPU et le GPU pour transférer les informations contenues dans les lattices entre les différentes unités de calcul. Les vitesses de calcul, données dans le tableau 4.2, sont donc applicables uniquement pour des simulations avec un très petit nombre de sauvegardes par rapport au nombre d'itérations total, typiquement inférieur à 0,05%.

Dans le cadre de cette thèse, une grande partie des simulations est réalisée avec des lattices cubiques de 250 LU de côté, soit un total de 15 625 000 nœuds à mettre à jour par itération. Distinctement, pour les deux configurations, il est possible de calculer la performance du code en MLUPS (*Million Lattice Updates per Second*) pour ce type de simulation en 3D. La performance dans le cas de la configuration NQ5 vaut environ 8,7 MLUPS et 17,4 MLUPS avec la configuration NQ6. De plus, pour des simulations de goutte sessile, sans inclinaison, l'équilibre statique est généralement atteint avant les 30 000 itérations. Ainsi, le temps caractéristique d'une simulation de mouillage d'une surface texturée en statique, est d'environ 90 minutes avec la configuration NQ5, et inférieur à 45 minutes pour la configuration NQ6.

4.2.2 Incorporation de surfaces complexes

Dans le cadre de cette thèse, le code LBM est appliqué à des surfaces texturées topographiquement avec des motifs complexes, notamment des structures réentrantes bio-inspirées. Dans le

but d'intégrer ces géométries complexes dans le modèle numérique, un outil de discrétisation des surfaces en lattice a été développé.

L'intérêt d'un tel outil est de pouvoir directement simuler le dépôt d'une goutte pour une surface réelle, caractérisée topographiquement à l'aide d'un microscope à force atomique (AFM), d'un interféromètre, ou d'un microscope confocal. Il est également possible de discrétiser une surface issue de la conception assistée par ordinateur (CAO).

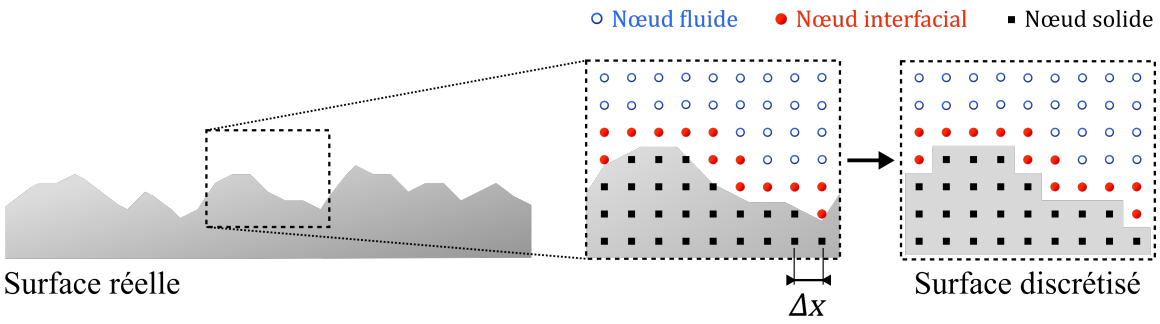

Figure 4.3 : Représentation en 2D de la discrétisation d'une surface réelle en un lattice composé d'éléments cubiques.

Dans le cas des surfaces texturées les plus simples, seul un fichier contenant les coordonnées des points composant la surface est nécessaire. En revanche, cette méthode ne peut pas être appliquée pour des structures réentrantes. Pour les surfaces plus complexes, la discrétisation est réalisée à partir d'un fichier dans le format *stl*. En effet, dans un fichier *stl*, les informations de la surface sont stockées en définissant les facettes triangulaires, qui composent la surface, à travers la position des points aux sommets du triangle et de la normale sortante [162, 163]. Ainsi, la position des nœuds correspondant à l'interface solide-fluide est donnée par la position des facettes triangulaires. Et les vecteurs normaux sont utilisés pour déterminer quel côté de l'interface appartient au solide.
Grâce à cet outil, toute surface peut être incorporée dans le code LBM. Cependant, il est nécessaire de correctement choisir le pas d'espace Δx pour la discrétisation, afin de s'assurer que la surface discrétisée est suffisamment résolue pour représenter la surface réelle. De fait, au vu des limitations du nombre de nœuds maximum dans le lattice, certaines surfaces réelles ne peuvent pas être discrétisées sans perdre une partie significative de la topographie. Ce qui limite les surfaces étudiables.
En revanche, le code permet également d'associer différentes chimies aux texturations topographiques. En effet, pour chaque nœud solide, il est possible d'attribuer une valeur spécifique. Pour un unique substrat, tous les nœuds solides partageant la même valeur sont associés au même matériau. De cette manière, il est possible de simuler une texturation chimique, à condition de pouvoir déterminer un angle de contact intrinsèque θ_Y pour chacune des chimies.

4.2.3 Système adimensionné via le nombre de Bond

Dans le but de comparer quantitativement les résultats des simulations avec des approches expérimentales, il est impératif de garantir que les simulations soient effectuées dans les mêmes régimes physiques que les expériences. Pour cette raison, il est nécessaire de relier les grandeurs physiques du système étudié avec les grandeurs numériques du système simulé.

Les grandeurs physiques et numériques peuvent être reliées en construisant un système adimensionnel adapté. En effet, toute grandeur physique, notée $[q]$, composant le système peut être définie comme étant la composition de cinq unités indépendantes. Dans le cas de la LBM, il est plus judicieux d'utiliser la masse volumique plutôt que la masse parmi les cinq unités de bases pour définir le système adimentionnel. Ainsi, la grandeur $[q]$ peut s'exprimée telle que :

$$[q] = [L]^{qL} \cdot [T]^{qT} \cdot [\rho]^{q\rho} \cdot [\Theta]^{q\Theta} \cdot [N]^{qN} \tag{4.1}$$

Avec $[L]$ l'unité de longeur, $[T]$ l'unité de temps, $[\rho]$ l'unité correspondante à la masse volumique, $[\Theta]$ celle pour la température et enfin $[N]$ pour la quantité de matière.

Grandeur physique	Symbole	Unité SI	qL	qT	$q\rho$	$q\Theta$	qN
Longueur	L	m	1	0	0	0	0
Temps	T	s	0	1	0	0	0
Masse volumique	ρ	$kg \cdot m^{-3}$	0	0	1	0	0
Température	Θ	K	0	0	0	1	0
Quantité de matière	N	mol	0	0	0	0	1
Masse	M	kg	3	0	1	0	0
Vitesse	U	$m \cdot s^{-1}$	1	-1	0	0	0
Accélération	A	$m \cdot s^{-2}$	1	-2	0	0	0
Viscosité cinématique	ν	$m^2 \cdot s^{-1}$	2	-1	0	0	0
Pression	P	$N \cdot m^{-2}$	2	-2	1	0	0
Force volumique	F	$N \cdot m^{-3}$	1	-2	1	0	0
Energie	E	$J \equiv kg \cdot m^2 \cdot s^{-2}$	5	-2	1	0	0
Entropie molaire	S	$J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$	5	-2	1	-1	-1

Tableau 4.3 : Récapitulatif du système adimensionnel utilisé.

Pour chaque grandeur physique $[q]$, il existe un facteur de conversion, généralement noté C_q, qui permet de passer du système de grandeur physique au système numérique. Par exemple pour l'unité de longueur $[L]$:

$$L^{LU} = \frac{L^{SI}}{C_L} \tag{4.2}$$

Où L^{LU} est la valeur numérique de la longueur dans le système d'unités du lattice (LU) et L^{SI} la valeur physique exprimée dans le système international (SI).

Pour déterminer les facteurs de conversions, il existe plusieurs stratégies applicables pour les simulations LBM. Ces stratégies consistent à contraindre le choix de certains paramètres de simulation, en assurant qu'un ou plusieurs nombres adimensionnels soient respectés entre le système étudié et la simulation. Dans la littérature LBM, en fonction du sujet d'étude, le nombre de Reynolds (Re), le nombre de Mach (Ma) ou encore le nombre de Bond (Bo) sont des nombres adimensionnels couramment utilisés [52].
Dans le cas de l'étude des propriétés de mouillabilité des surfaces, notamment lors du dépôt d'une goutte sessile, les vitesses d'écoulement sont très faibles. Il est donc difficile de définir,

à priori, une vitesse caractéristique pour décrire le phénomène. Dans ces conditions, il a été choisi de paramétrer les simulations en respectant la valeur du nombre de Bond.
Pour rappel, comme présenté dans le chapitre 1 (Section 1.1.3), le nombre de Bond représente le rapport entre la pesanteur et les effets capillaires, et s'exprime :

$$Bo = \frac{\Delta\rho \; g \; l^2}{\gamma} \tag{4.3}$$

Avec $\Delta\rho$ la différence de masse volumique entre le liquide et le gaz, γ la tension de surface liquide-gaz, g l'accélération gravitationnelle et l une longueur caractéristique. La longueur l correspond, généralement, au rayon d'une goutte parfaitement sphérique de volume équivalant, dont le rayon est également noté R_0 et le volume V_0.

À l'initialisation de chaque simulation, les facteurs de conversion des cinq unités principales du système sont déterminés en fonction des paramètres de la simulation.

1. Premièrement, l'objet d'étude étant le comportement de la goutte de liquide sur la surface, le facteur de conversion de la masse volumique C_ρ est déterminé à partir de la masse volumique physique du liquide ρ_L^{SI}, sachant que ρ_L^{LU} est fixée égale à 1. Pour l'eau, avec une température ambiante d'environ 20°C, ρ_L^{SI} vaut approximativement 997 $kg \cdot m^{-3}$.

2. Dans le système numérique, le pas de discrétisation Δx^{LU} est choisi égal à 1, permettant la simplification d'une partie des calculs de la LBM. Ainsi, le facteur de conversion C_L est directement déterminé par le choix du pas de discrétisation de la surface physique Δx^{SI}.

3. Pour déterminer C_T, il est nécessaire de passer par le nombre de Bond et de déterminer la valeur de l'accélération due à la pesanteur dans le système numérique g^{LU}. En effet, par nature, le nombre de Bond doit être égal entre les deux systèmes, il est donc possible d'écrire les égalités suivantes :

$$Bo = \kappa^{SI} \; g^{SI} \left(R_0^{SI}\right)^2 = \kappa^{LU} \; g^{LU} \left(R_0^{LU}\right)^2 \tag{4.4}$$

$$\text{avec} \qquad \kappa^{SI} = \frac{\Delta\rho^{SI}}{\gamma^{SI}} \qquad \text{et} \qquad R_0^{SI} = \sqrt[3]{\frac{3 \; V_0^{SI}}{4 \; \pi}}$$

Où V_0^{SI} correspond au volume de la goutte liquide à simuler.
Dans un premier temps, le nombre de Bond est calculé à partir des valeurs physiques, avec κ^{SI} dépendant du couple liquide-gaz et $g^{SI} = 9,81 \; m \cdot s^{-2}$.
Ensuite, il est possible de calculer g^{LU} en réécrivant (4.4).

$$g^{LU} = \frac{Bo}{\kappa^{LU} \left(R_0^{LU}\right)^2} \tag{4.5}$$

Le rayon de la goutte dans le lattice R_0^{LU} est déterminé en utilisant le facteur de conversion C_L. Quant à κ^{LU}, il est choisi en fonction du schéma de discrétisation. Le choix de la valeur de κ^{LU} est justifié, dans la suite du chapitre, dans la section consacrée à la validation de la courbure des gouttes soumises à la gravité (Section 4.4.3).
Une fois g^{LU} déterminé, il est possible de calculer le facteur de conversion des accélérations $C_A = g^{SI}/g^{LU}$. Enfin, le facteur de conversion du temps peut être retrouvé par l'expression qui relie C_T avec C_A.

$$C_A = \frac{C_L}{C_T^2} \qquad \text{soit} \qquad C_T = \sqrt{\frac{C_L}{C_A}} \tag{4.6}$$

4. Tel qu'utilisé durant cette thèse, le code numérique ne prend pas en compte les variations de température dans les simulations. Cependant, pour respecter la relation $c_s = \sqrt{R\,\Theta}$, la valeur de la température ambiante dans la simulation Θ^{LU}_{amb} est fixé égale à $1/3$. Le facteur de conversion des températures C_Θ peut être calculé à partir de Θ^{LU}_{amb} et de la valeur de température du système physique Θ^{SI}_{amb} pour laquelle sont déterminées les propriétés des fluides, telles que la masse volumique et la viscosité cinématique.

5. Pour déterminer C_N, le facteur de conversion de la quantité de matière, il a été choisi de paramétrer la valeur de la constante des gaz parfaits dans le lattice R^{LU} égale à 1. Or R^{SI} s'exprime en $J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$, il est donc possible d'écrire C_N à partir du facteur de conversion pour la constante des gaz parfaits et des autres facteurs de conversion.

$$C_S = \frac{R^{SI}}{R^{LU}} = \frac{C_L^5 \cdot C_\rho}{C_T^2 \cdot C_\Theta \cdot C_N} \qquad \text{soit} \qquad C_N = \frac{C_L^5 \cdot C_\rho}{C_T^2 \cdot C_\Theta} \frac{R^{LU}}{R^{SI}} \tag{4.7}$$

En pratique, dans le cadre de cette thèse, seuls les facteurs de conversions pour les longueurs C_L, le temps C_T, et la masse volumique C_ρ sont utiles.

4.3 Post-traitement et caractérisation numérique du mouillage

Cette partie a pour objectif de présenter les méthodes de caractérisation des propriétés de mouillabilité rendues possibles par l'approche numérique. En effet, les post-traitements développés pour quantifier la mouillabilité des simulations y sont détaillés en spécifiant leurs intérêts en comparaison avec les méthodes expérimentales. De plus, tous ces post-traitements peuvent être généralisés à toutes les itérations sauvegardées au cours de la simulation pour étudier les évolutions dynamiques des propriétés de mouillabilité durant l'étalement de la goutte.

4.3.1 Angles de contact macroscopiques

Premièrement, de manière analogue à la méthode expérimentale, il est possible de mesurer les angles de contact macroscopiques apparents θ. Pour une goutte en équilibre, l'angle apparent est généralement noté θ_e.
La mesure de l'angle de contact repose sur l'observation latérale de la goutte, et plus spécifiquement sur la géométrie de l'interface liquide-gaz au voisinage des points triples. Pour rappel, dans le plan d'observation, les points triples correspondent aux intersections entre la ligne triple, la ligne d'interface entre les trois phases solide-liquide-gaz et le plan d'observation. Ainsi, pour une simulation en 3D, il est possible de réaliser plusieurs mesures d'angle de contact macroscopique en fonction de l'angle de rotation φ autour de la goutte, comme illustré par la figure 4.4.
Cette capacité à pouvoir étudier la goutte suivant différents plans d'observation permet de facilement mettre en avant des propriétés d'anisotropie d'étalement. Pour chacun des plans d'observation, les points de la ligne triple sont déterminés automatiquement à partir d'une projection de la simulation 3D sur le plan d'observation à 2D. La ligne de base est ensuite définie à partir des deux points triples extérieurs, à gauche et à droite de la goutte. Pour chacun des points triples détectés, il est possible de mesurer l'angle de contact. De manière similaire aux essais expérimentaux, l'angle de contact est mesuré entre la ligne de base et la tangente à l'interface liquide-gaz, selon la méthode tangente-2 [102, 164].
La première étape de cette méthode de mesure consiste à approximer la courbure de la goutte

à l'aide d'une équation polynomiale. Une fois la courbure définie mathématiquement, il est possible de déterminer la tangente à la courbure au niveau du point triple. Enfin, les angles de contact sont mesurés, à gauche et à droite de la goutte, entre la tangente au point triple et la ligne de base.

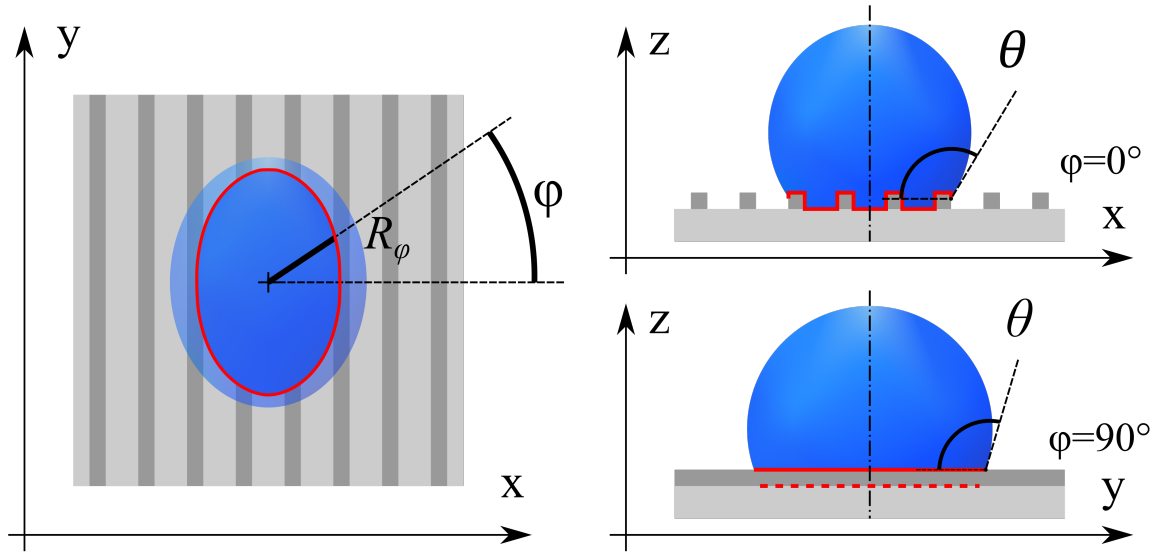

Figure 4.4 : Illustration de la mesure de l'angle de contact macroscopique suivant l'orientation du plan d'observation, dans le cas d'une goutte avec des propriétés de mouillabilité anisotropes.

Il aurait également pu être choisi de faire un plan de coupe, ce type de post-traitement serait très pertinent pour certaines formes spécifiques de goutte, notamment pour des gouttes comportant des géométries concaves. Cependant, pour des gouttes en régime de Cassie-Baxter sur des texturations organisées en réseau régulier, il est très probable qu'il n'existe pas de point triple au sein du plan de coupe. Ce choix a donc pour but de garder un post-traitement le plus généralisable possible sur l'ensemble des simulations.
En revanche, la détection numérique des points triples étant plus précise qu'expérimentalement, il existe donc une différence notable de la position de la ligne de base entre les deux approches, comme illustré par la figure 4.5. En effet, expérimentalement, dû à des problèmes de luminosité, contraste et résolution d'image, les points triples sont difficilement observables directement. Dans ces conditions, la ligne de base expérimentale est légèrement relevée. Pour la même étude, cette différence géométrique aura tendance à mesurer des angles de contact expérimentaux toujours inférieurs aux valeurs numériques, comme le montre la figure 4.5.

4.3.2 Quantification de l'interface liquide-solide

Comme exprimé précédemment, dans le chapitre 1 (Section 1.3), pour un grand nombre de modèles théoriques du mouillage, il est essentiel de pouvoir déterminer l'aire de contact mouillée et la longueur de ligne triple. Pourtant, ces informations sont très difficilement accessibles expérimentalement. En effet, il existe différentes méthodes expérimentales pour déterminer des valeurs approchées, mais chacune a des limites fortes. Par exemple, les observations depuis le dessous de la goutte sont limitées aux matériaux transparents [165]. D'autres méthodes indirectes, telles que les mesures par impédance électrochimique [166], dépendent fortement de l'hypothèse faite sur l'imprégnation de la texture, qui est difficile à déterminer pour des

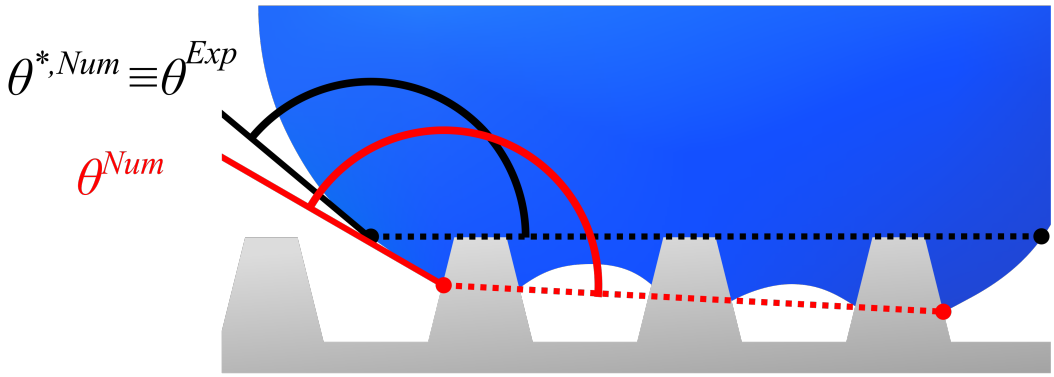

Figure 4.5 : Illustration de la différence entre les angles de contact apparent mesurés expérimentalement θ^{Exp} et numériquement θ^{Num}.

géométries complexes. Dans d'autres cas, l'interface liquide-solide est déterminée théoriquement à partir des valeurs de θ^{Exp} mesurées et du modèle de mouillage considéré. Enfin, le plus généralement, ces informations sont approximées à partir des rayons de base de la goutte en supposant le contact circulaire, ou ellipsoïdal pour les cas anisotropes.

Au contraire, l'approche numérique permet de caractériser l'interface liquide-solide, sans hypothèse préalable, à travers une quantification de l'aire de contact mouillée A_{wet} et de la longueur totale de la ligne triple L_T. Avec L_T incluant à la fois les lignes triples externes et internes.
Dans un premier temps, numériquement, il est possible d'identifier l'ensemble des nœuds de l'interface liquide-solide. Pour chacun de ces nœuds, la surface associée est calculée, en fonction de la topographie locale de la surface, déterminée à partir des nœuds solides voisins. De cette manière, l'aire de contact mouillée A_{wet} est obtenue en sommant l'ensemble des surfaces associées aux nœuds, composant l'interface liquide-solide, situées sous la goutte.
Dans un second temps, parmi les nœuds de l'interface liquide-solide, il est possible d'extraire ceux à l'interface liquide-gaz afin de déterminer les éléments constituant les différentes lignes triples externes et internes. Ensuite, pour chaque nœud constituant la ligne triple totale, il est possible d'associer une longueur l_n. Les résultats présentés dans cette thèse sont réalisés avec une valeur de $l_n = \Delta x$. Cette première approche, permet d'approximer la valeur de L_T. Bien que cette valeur ne soit pas la valeur exacte, elle permet néanmoins de comparer les différentes simulations entre elles, en plus de proposer une méthode généralisable à toute simulation. Pour encore plus de précision, une amélioration serait de déterminer la valeur de l_n en fonction de chaque autre nœud voisin faisant également parti de la ligne triple.

4.3.3 Imprégnation et ancrage

Les méthodes expérimentales sont également très limitées pour renseigner sur l'imprégnation du liquide dans les textures ou quantifier la profondeur d'ancrage. Ainsi, dans le cadre de cette thèse, un autre outil de post-traitement numérique a été créé pour étudier l'imprégnation et l'ancrage du liquide dans les textures.

En effet, dans ces travaux de thèse, il est proposé d'étudier la distribution des nœuds composant l'interface liquide-solide en fonction de la profondeur. De manière analogue à la courbe d'Abbott présentée dans le chapitre 1 (Section 1.4), il est possible de tracer une courbe en cumulant la distribution d'une interface en fonction de la profondeur, comme représentée sur la figure 4.6. La profondeur d'ancrage maximale d'une goutte sur une surface texturée, notée Z_a,

est définie comme étant la profondeur atteinte à 100% de l'interface liquide-solide cumulé. De plus, il est également possible de construire, sur les mêmes graphiques, la surface solide cumulée en fonction de la profondeur. Pour les courbes de la surface solide, il est possible de cumuler la distribution des profondeurs uniquement sous la goutte ou sur l'ensemble de la surface. Il est toujours plus pertinent, à l'échelle d'une simulation, de tracer la courbe pour le solide uniquement sous la goutte pour observer indirectement l'imprégnation. Cependant, pour comparer des simulations entre elles, il peut être intéressant de tracer la courbe de la surface solide cumulée sur l'ensemble du solide, à condition que les surfaces soient les mêmes entre les simulations et que la surface comporte des motifs bien définis avec une répartition régulière et uniforme.

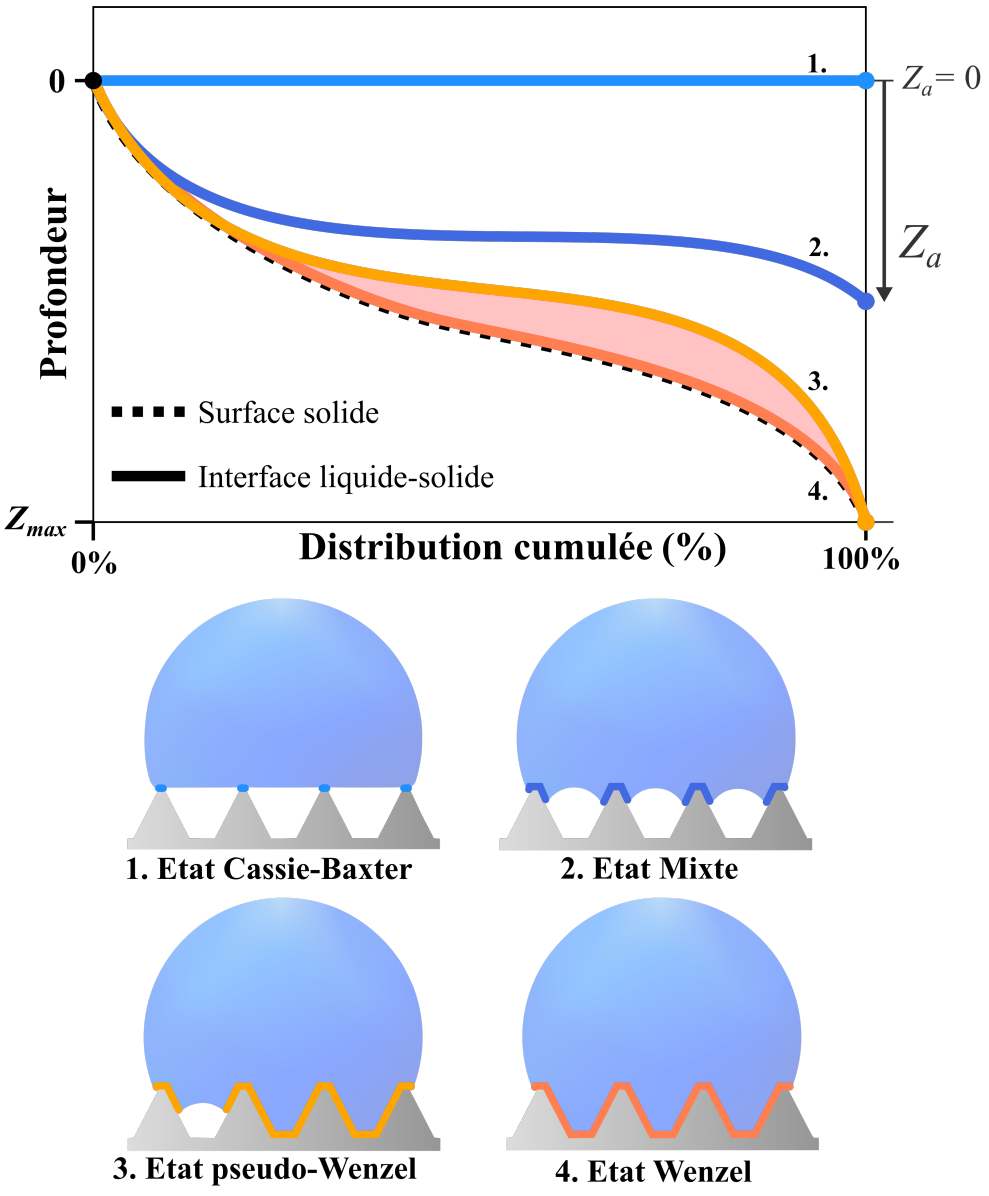

Figure 4.6 : Illustration des quatre états de mouillage possibles et des courbes associées des interfaces liquide-solide cumulées en fonction de la profondeur.

À partir de ces courbes, il est possible de caractériser une goutte suivant quatre régimes de mouillage allant de l'état de Cassie-Baxter à l'état Wenzel, en passant par plusieurs régimes intermédiaires.

1. L'état Cassie-Baxter (CBS), où la goutte est parfaitement suspendue aux sommets des textures.

2. L'état mixte (MS), où la goutte est en suspension, mais avec une imprégnation partielle des textures.

3. L'état pseudo-Wenzel (PWS), où le liquide imprègne la surface de manière hétérogène. Pour cet état, la profondeur d'ancrage maximale Z_a est égale à la hauteur des textures, ce qui signifie que le fond de la surface est imprégné, cependant des bulles de gaz sont piégées sous la goutte.

4. L'état Wenzel (WS), où le liquide pénètre complètement et de façon homogène dans l'ensemble des textures sous la goutte.

Pour les régimes dans lesquels la goutte est en suspension, il est facile de déterminer précisément dans quel état de mouillage se trouve la goutte, il suffit de vérifier que Z_a soit bien inférieur à la hauteur des textures. De plus, pour CBS, il faut spécifiquement que $Z_a = 0$.
Au contraire, pour les deux autres états de mouillage, où la goutte imprègne les textures, il est nécessaire d'étudier l'évolution de l'interface liquide-solide cumulée vis-à-vis de la surface solide cumulée. En effet, pour WS (4. dans la figure 4.6), les deux courbes sont superposées. En revanche, pour PWS (3. dans la figure 4.6), il existe un écart entre les courbes représentant l'interface liquide-solide cumulée et la surface solide cumulée.

4.3.4 Dynamique d'étalement

L'ensemble des post-traitements présentés peut être effectué sur l'ensemble des itérations sauvegardées, permettant d'étudier l'évolution dynamique des propriétés de mouillabilité. Lors d'une étude en dynamique, il est donc important de sauvegarder suffisamment d'itérations pour être capable d'identifier au mieux les phénomènes.

Dans le cadre du post-traitement d'études dynamiques, il est notamment possible de quantifier la vitesse de déplacement de la ligne triple en fonction de la direction de propagation φ. Lors de l'étalement d'une goutte sur une surface, cela permet d'identifier les directions d'étalement favorisées par la texturation. Ces données servent à expliquer l'état d'équilibre de la goutte à l'équilibre en fonction de l'historique d'étalement, en étudiant les dynamiques de piégeage de bulles d'air sous la goutte. Pour certains systèmes, quantifier la vitesse de la ligne triple permet également de mettre en avant des effets de coller-glisser de la ligne triple sur la surface, communément désignés par l'anglais *stick-slip*.

4.4 Validation du code de simulation

Avant de pouvoir exploiter le code pour l'étude numérique du mouillage des surfaces texturées, il est impératif de valider certaines propriétés du modèle numérique en lien avec le système physique étudié. Cette partie est donc consacrée à justifier la validité du code de simulations dans le cadre des travaux réalisés durant cette thèse.

4.4.1 Interface fluide-fluide

Le premier élément du modèle à valider est la stabilité de l'interface entre les deux composants fluides. Comme présentée dans le chapitre 2 (Section 2.3.3.1), dans le modèle à pseudo-potentiel de Shan-Chen, la stabilité de l'interface fluide-fluide est essentiellement dépendante

du potentiel d'interaction inter-fluides $G_{\sigma\bar{\sigma}}$. Cette section repose donc principalement sur le choix de la valeur de $G_{\sigma\bar{\sigma}}$ à utiliser dans les simulations.

Pour déterminer une bonne valeur du potentiel d'interaction inter-fluides, il est proposé de simuler une goutte libre de liquide dans un milieu gazeux, sans solide et sans pesanteur, pour différentes valeurs de $G_{\sigma\bar{\sigma}}$. Pour rappel, dans le cadre de cette thèse, la goutte est considérée comme étant composée d'eau et le gaz est supposé être l'air ambiant avec cependant un rapport de masse volumique numérique égale à 1. Les simulations de validation de l'interface fluide-fluide, ou plus exactement de l'interface liquide-gaz sont réalisées en 2D et en 3D. Les lattices sont constitués de 200 nœuds de côté et la goutte liquide est initialisée avec une forme sphérique au centre du lattice. Dans chacune des simulations, le rayon initial de la goutte est fixé à 50 LU et l'interface est initialisée avec une épaisseur de 5 LU.

Pour assurer la stabilité de l'interface sur des temps très longs, les simulations sont réalisées sur 300 000 itérations. Ce nombre d'itérations ést très supérieur aux autres simulations réalisées durant cette thèse, qui sont généralement de 30 000 itérations. Il est donc également nécessaire dans le choix de $G_{\sigma\bar{\sigma}}$ que l'interface se stabilise avant 30 000 itérations.

En plus d'observer qualitativement la stabilité de l'interface, il est nécessaire de quantifier la largeur de l'interface et la quantité de liquide au sein de la goutte. Pour cette raison, il est possible de définir Q_{goutte} en pourcentage, comme étant le rapport de la somme des masses volumiques locales du liquide dans la goutte sur la somme des masses volumiques locales du liquide. Un nœud étant considéré dans la goutte si la masse volumique local du liquide $\rho_L(x) \geq 0,5$.

$$Q_{goutte} = 100 \cdot \frac{\sum (\rho_L(x) \cdot q)}{\sum \rho_L(x)} \tag{4.8}$$

$$\text{avec} \qquad q = \begin{cases} 1 & \text{si } \rho_L(x) \geq 0,5 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Pour ces simulations avec une goutte initialisée sphérique, Q_{goutte} vaut 98.2% à l'initialisation.

Comme le confirme la figure 4.7, le choix de $G_{\sigma\bar{\sigma}}$ est primordial pour assurer la stabilité de l'interface liquide-gaz. En effet, pour $G_{\sigma\bar{\sigma}} = 1$, l'interface se diffuse rapidement et l'ensemble du liquide initialement contenu dans la goutte est réparti de manière homogène dans le lattice avec une faible masse volumique locale $\rho_L(x) \approx 0,2$. Avec $G_{\sigma\bar{\sigma}} = 1,5$ et $G_{\sigma\bar{\sigma}} = 2$, le liquide contenu dans la goutte est diffusé à travers l'interface jusqu'à atteindre un rayon inférieur autour duquel l'interface se stabilise. Dans ces deux cas, l'épaisseur de l'interface stabilisée est d'environ 7 LU pour $G_{\sigma\bar{\sigma}} = 1,5$ et d'environ 5 LU pour $G_{\sigma\bar{\sigma}} = 2$, avec respectivement Q_{goutte} égale 68,1% et 89,7%. Cependant, bien que l'interface se stabilise, une grande quantité de liquide est sortie de la goutte et la stabilisation de goutte est atteinte tardivement après respectivement 100 000 et 50 000 itérations.
Enfin, dans le cas où $G_{\sigma\bar{\sigma}} = 3$, l'interface se stabilise rapidement avant la 30 000ième itérations, avec une épaisseur de 3 LU. Après stabilisation, la goutte conserve 97.2% de liquide, soit environ 1% d'écart avec la quantité initiale. De plus, les résultats pour les simulations en 3D sont similaires à ceux présentés en 2D, avec un écart de quantité de liquide après stabilisation d'envrion 2%.
Au vu de ces résultats, $G_{\sigma\bar{\sigma}}$ est choisi égal à 3 pour l'ensemble des simulations présentées dans cette thèse. Cette valeur de $G_{\sigma\bar{\sigma}} = 3$ est suffisante pour assurer la stabilité de l'interface liquide solide sans s'exposer à d'autres problèmes. En effet, il serait possible d'augmenter la valeur

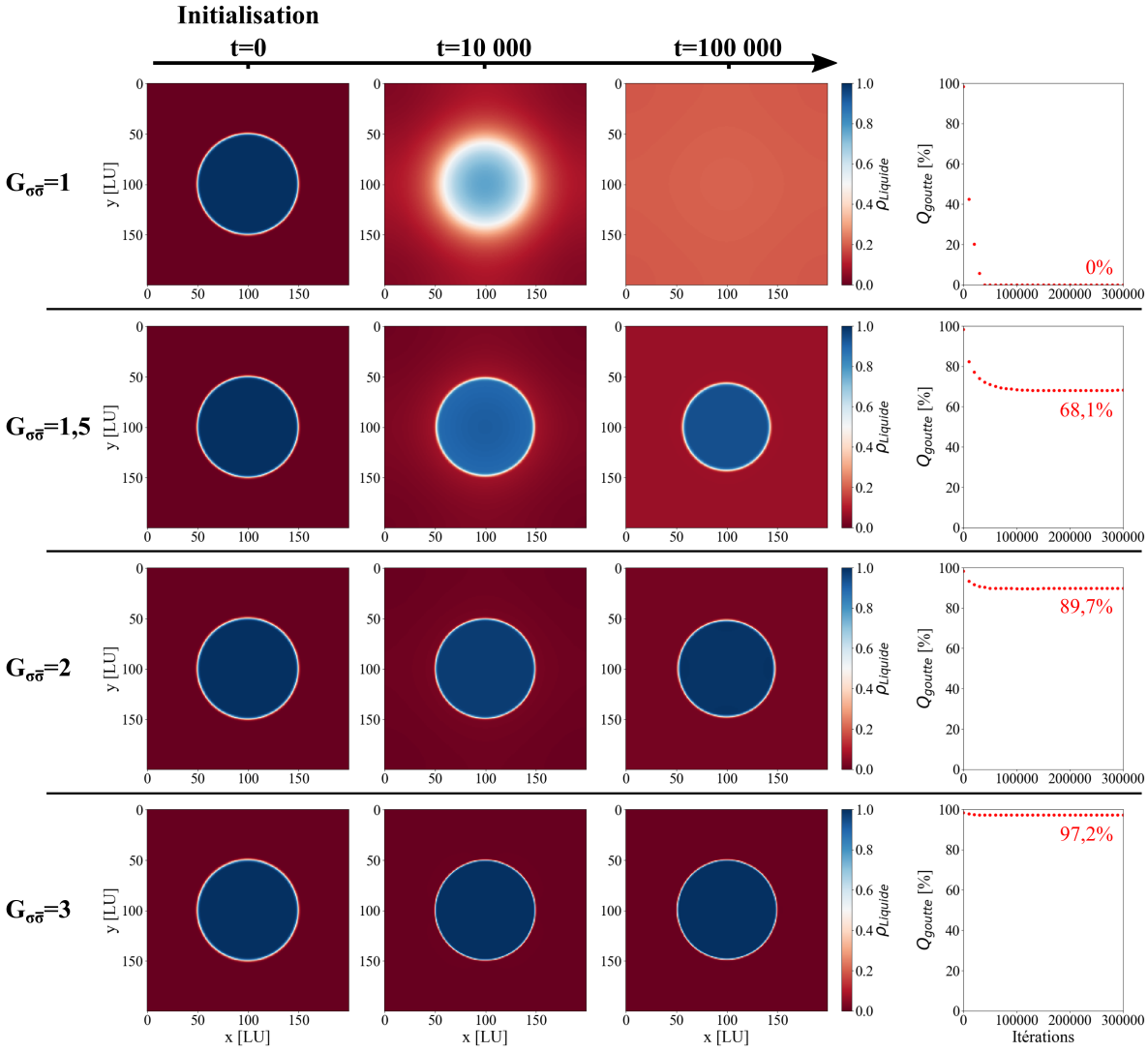

Figure 4.7 : Illustration de l'impact de la valeur du potentiel d'interaction inter-fluide $G_{\sigma\bar{\sigma}}$ sur la stabilité de l'interface liquide-gaz pour les simulations en 2D.

de $G_{\sigma\bar{\sigma}}$, mais cela reviendrait indirectement à augmenter les vitesses locales u^{eq} à l'interface de par la relation entre les forces d'interactions et la vitesse (Section 2.3.3.3). Or, il est important de conserver des vitesses très inférieures à la vitesse du son dans le lattice c_s à des fins de stabilité [52]. Augmenter $G_{\sigma\bar{\sigma}}$ diminuerait également l'épaisseur de l'interface liquide-solide, ce qui augmenterait fortement le gradient de masse volumique local et par la même occasion l'intensité des courants parasites [52, 89].
De plus, pour que le nombre d'itérations nécessaires à la stabilisation soit le plus faible possible, les simulations sont toutes directement initialisées avec l'épaisseur d'interface égale à 3 LU, contrairement aux 5 LU utilisées dans cette section.

D'autre part, il est possible d'initialiser la goutte suivant d'autres géométries, cubique par exemple. Avec $G_{\sigma\bar{\sigma}} = 3$, quelle que soit la forme initiale, la goutte libre finit par se stabiliser suivant la forme d'une sphère. Cependant, afin de limiter les dynamiques de déformation de l'interface durant les premières itérations, il est choisi de toujours initialiser la goutte avec une forme sphérique.

4.4.2 Angles de contact pour une surface plane

Il est également crucial de valider le modèle d'interaction fluide-solide. Dans le code, les interactions entre les fluides et le solide sont gérées à travers la définition des forces d'adhésion comme présenté durant le chapitre 2 (Section 2.3.3.2). Les forces d'interaction sont définies en fonction de la valeur de l'angle de contact intrinsèque du matériau, soit l'angle de Young θ_Y. Pour les simulations, θ_Y est donc le paramètre d'entrée des simulations qui détermine la valeur du potentiel d'interactions entre les fluides et le solide $G_{adh,\sigma}$. Ainsi, pour vérifier le modèle d'interaction fluide-solide, il est nécessaire de simuler l'étalement d'une goutte liquide sur une surface parfaitement plane et homogène chimiquement. Si les angles de contact post-traités à l'équilibre correspondent aux valeurs de θ_Y utilisées pour paramétrer les simulations alors le code sera considéré comme étant valide.

Pour cette validation, les simulations sont réalisées à la fois en 2D et en 3D, avec un nombre d'itérations total égal à 30 000. Pour les simulations en 2D, le lattice est construit avec 250 LU en hauteur et 1000 LU en largeur. De plus, en 2D, la goutte est initialisée avec un rayon de 90 LU. Au contraire, pour les simulations en 3D, le lattice est cubique avec pour côté 200 LU et un rayon de goutte initial égale à 40 LU. Dans la configuration 3D, pour s'assurer que les conditions aux limites périodiques ne soient pas atteintes, θ_Y est toujours choisi supérieur à 60°. Dans les deux cas, la goutte est légèrement enfoncée dans le solide pour favoriser l'étalement dès les premières itérations, ce qui est d'autant plus nécessaire que ces simulations sont réalisées sans pesanteur

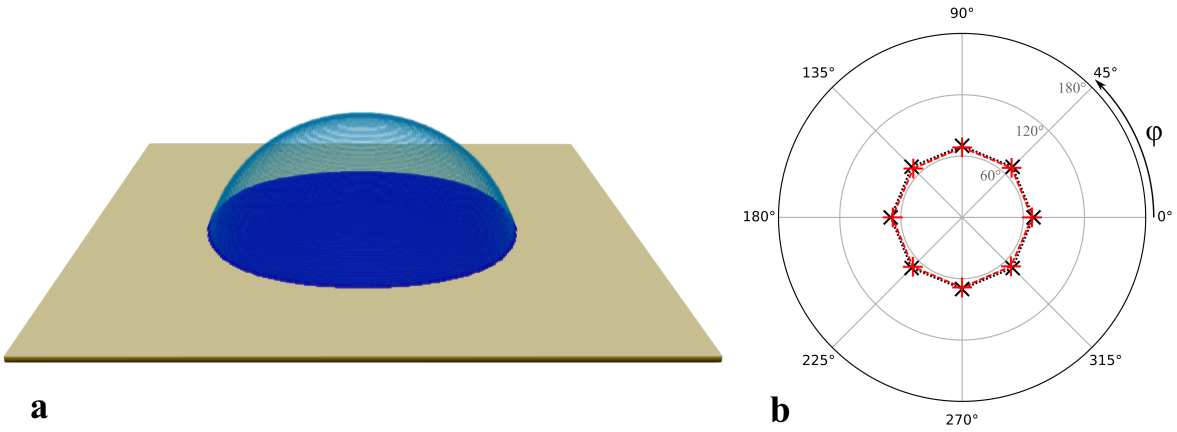

Figure 4.8 : (a) Visualisation en 3D d'une simulation d'une goutte à l'équilibre sur une surface plane avec $\theta_Y = 70°$; (b) Représentation polaire des valeurs de θ_Y (*pointillés noirs*) et de θ^{Num} post-traitées (*tirets rouges*) autour de la goutte tous les 45°.

Pour valider le modèle, la valeur de θ^{Num} utilisée est issue de la moyenne de plusieurs angles observables à la dernière itération, sachant que quelque soit la valeur de θ_Y l'équilibre est atteint avant la 30 000ième itération. En 2D, seuls les deux angles observables sont post-traités. Dans le cas des simulations en 3D, huit valeurs d'angles de contact sont mesurées autour de la goutte avec un espacement de 45°, comme illustré dans la figure 4.8.

De plus, pour valider le modèle, un critère quantitatif est utilisé [82]. Pour cette raison, il est

possible de définir le coefficient de détermination R^2, tel que :

$$R^2 = 1 - \frac{\sum \left(\theta^{Num} - \theta_Y\right)^2}{\sum \left(\theta^{Num} - \bar{\theta}^{Num}\right)^2} \tag{4.9}$$

Avec $\bar{\theta}^{Num}$, l'angle de contact moyen pour l'ensemble des simulations. Ensuite, une valeur seuil de validité du modèle est fixée arbitrairement. Dans le cas de cette thèse, il a été choisi de considérer le modèle valide si R^2 est supérieur à 0,95.

Enfin, les simulations sont effectuées avec des valeurs de θ_Y correspondant à une goutte d'eau entourée d'air déposée en contact avec différents matériaux, principalement des polymères. Pour chacun des matériaux testés, les valeurs de θ_Y ont été obtenues expérimentalement avec une surface poli-miroir. L'ensemble de ces matériaux et leurs valeurs d'angle de contact intrinsèques associées sont présentés dans le tableau 4.4, dont les valeurs sont issues d'expériences de goutte sessile avec 3 µL d'eau distillée sur des échantillons polis miroirs.

Matériaux	Angle de contact θ_Y
PDMS	112°
mPMMA	100°
PP	90°
ABS	84°
X40Cr14Az	80°
PET	76°
X8CrNi19-11	70°
PA6.6	67°

Tableau 4.4 : Valeur de l'angle θ_Y donnée comme paramètre d'entrée des simulations pour différents matériaux

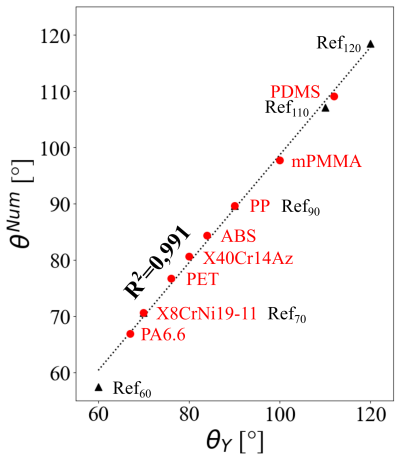

Figure 4.9 : Validation des angles de contact simulés en 2D.

Les valeurs de θ^{Num} issues des simulations 2D sont tracées, sur la figure 4.9, en fonction de l'angle intrinsèque donné en entrée. S'ajoute aux valeurs pour les matériaux, plusieurs valeurs d'angle de référence compris entre 60°et 120°. Comme le montre les résultats en 2D, il existe une très bonne correspondance entre les valeurs de θ^{Num} et θ_Y. En effet, le coefficient de détermination R^2 vaut environ 0,99. Les résultats sont similaires pour les simulations en 3D, avec $R^2 \approx 0,97$.
Pour conclure, que ce soit en 2D ou en 3D, les résultats dépassent la valeur seuil de R^2. Ainsi, le modèle d'interaction entre les fluides et le solide incorporé dans le code est validé.

4.4.3 Courbure des gouttes soumises à la gravité

Une fois les différentes forces d'interaction du modèle validées, l'adimensionnement du système doit être vérifié. Sachant que l'adimensionnement du système numérique est basé sur le nombre de Bond, noté Bo, il est impératif de vérifier que pour une même valeur de Bo les mêmes comportements sont observés. Comme exprimé dans la section consacrée à la construction du système adimensionné (Section 4.2.3), la valeur de l'accélération gravitationnelle dans

le lattice g^{LU} dépend de la valeur de κ^{LU}. Pour rappel, κ^{LU} est un paramètre d'ajustement numérique associé au rapport de masse volumique et à la tension de surface entre les deux fluides. Cette section est donc dédiée à la méthode permettant de déterminer la valeur de κ^{LU}.

Visuellement, une différence de nombre de Bond est caractérisée par une différence de la courbure de la goutte. Ainsi, une bonne valeur de κ^{LU} doit satisfaire la correspondance entre la courbure de la goutte simulée et la courbure théorique.

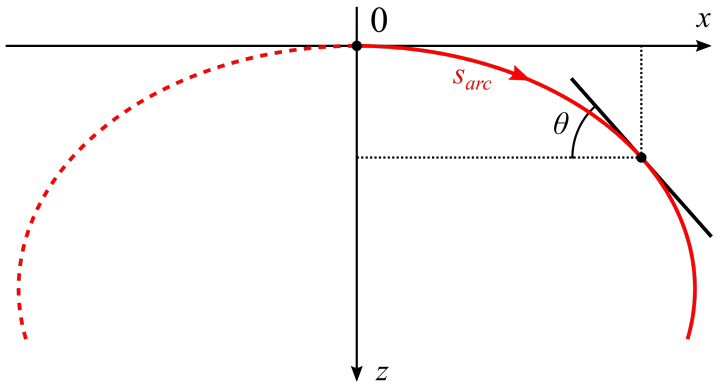

Figure 4.10 : Système de coordonnées utilisé pour décrire la courbure de l'interface axisymétrique d'une goutte sur une surface plane et homogène chimiquement, reproduit à partir de [167].

Pour déterminer la courbure théorique d'une goutte soumise aux effets de la gravité, il est possible de réécrire l'équation de Laplace pour décrire l'équilibre mécanique de l'interface [167, 168].
Premièrement, il est possible de considérer l'interface d'une goutte sessile, sur une surface parfaitement plane et homogène chimiquement, comme ayant une interface liquide-gaz axisymétrique, dont l'axe de symétrie est l'axe z, comme illustré dans la figure 4.10. Pour le système de coordonnées utilisé dans la figure 4.10, il est possible de décrire cette interface axisymétrique à travers le système d'équation différentielle suivant [167] :

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}s_{arc}} = \cos\theta \tag{4.10}$$

$$\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}s_{arc}} = \sin\theta \tag{4.11}$$

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}s_{arc}} = 2\,b + c\,z - \frac{\sin\theta}{x} \tag{4.12}$$

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}s_{arc}} = \pi\,x^2\sin\theta \tag{4.13}$$

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}s_{arc}} = 2\,\pi\,x \tag{4.14}$$

Où b représente la courbure de l'interface à l'origine du système de coordonnées, soit au sommet de la goutte. Le terme c correspond à la constante de capillarité du système et s'ecrit $c = \kappa^{SI} \cdot g$, avec g orienté suivant z et $\kappa^{SI} = \Delta\rho^{SI}/\gamma^{SI}$ comme défini précédemment (Section 4.2.3). L'angle tangent à l'interface est noté θ, par analogie avec l'angle de contact. Enfin, A et V

représentent respectivement la surface de l'interface et le volume de la goutte.
Ainsi défini, ce système d'équations différentielles, a pour conditions initiales :

$$x(0) = z(0) = \theta(0) = V(0) = A(0) = 0 \tag{4.15}$$

De plus, au sommet de la goutte, quand $s_{arc} = 0$:

$$\frac{\sin\theta}{x} = b \tag{4.16}$$

Il est donc possible de réécrire l'équation 4.12, lorsque $s_{arc} = 0$.

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}s_{arc}} = b \tag{4.17}$$

Cette réécriture permet d'éviter la division par 0 à l'initialisation de l'intégration du système d'équations différentielles.

Une fois le système d'équations différentielles et les conditions initiales définis, il reste à résoudre numériquement le système pour exprimer la courbure théorique de l'interface liquide-gaz d'une goutte soumise à la gravité. Tout d'abord, pour la résolution, il est possible de choisir une valeur de Bo et de θ_Y pour lesquelles déterminer la courbure théorique. Dans le cadre de cette thèse, la goutte liquide est constituée d'eau en équilibre dans l'air ambiant à une température de 20°C. En connaissance des masses volumiques des fluides considérés, de la tension superficielle entre ces mêmes fluides et du nombre bond, il est possible de déterminer le rayon de la goutte sphérique équivalent R_0 et le volume de liquide V_0. Ensuite, le rayon de la calotte sphérique non déformée par la gravité R_{CS} est calculé en fonction de V_0 et de la valeur de θ_Y.
La résolution numérique du système d'équations est initialisée en estimant une valeur de courbure au sommet b. En pratique, une approximation de b peut être exprimée comme l'inverse du rayon de la calotte sphérique R_{CS}.
Enfin, le système d'équations différentielles est résolu par une méthode numérique de Runge-Kutta d'ordre 4, jusqu'à ce que l'intégration suivant s_{arc} permette d'atteindre $\theta = \theta_Y$. Une fois θ_Y atteint, il est impératif de vérifier que V soit environ égal à V_0. Si l'écart entre V et V_0 est inférieur à 0.1%, il est considéré que la courbure théorique de l'interface est correct. Sinon, le système doit à nouveau être résolu avec une valeur de b légèrement corrigée par rapport à l'itération précedente. Par exemple, si $V < V_0$, alors il manque du volume et il faut diminuer la courbure au sommet, notée b. Inversement, si $V > V_0$, le volume de la goutte dépasse le volume théorique, il est nécessaire d'augmenter b. De cette manière, le système d'équations est résolu, de manière répété, jusqu'à atteindre une valeur de V satisfaisante.

Après avoir déterminé la courbure théorique soumise à la gravité, il faut simuler l'étalement de la goutte numériquement avec le code LBM pour différentes valeurs de Bo, de θ_Y et de κ^{LU}. Ces simulations sont réalisées en 2D et en 3D avec des configurations similaires à celles utilisées pour la validation des interactions liquide-solide (Section 4.4.2). Une fois les simulations faites, la courbe de l'interface liquide-gaz est déterminée en interpolant la position de l'interface entre l'ensemble des paires de nœuds voisins dont les valeurs de $\rho_L(x)$ encadrent la valeur seuil égale à 0,5. De plus, afin de s'affranchir des différences de volumes entre les valeurs de Bo, il a été choisi de tracer l'interface liquide-solide avec des valeurs adimensionnées de la hauteur H et du rayon projeté suivant x, noté R_x. L'adimensionnement est fait en divisant les valeurs de H et R_x par le rayon de la sphère équivalente R_0. Ceci permet de facilement comparer les courbures entre elles.

Dans un premier temps, plusieurs simulations sont réalisées en 2D et en 3D pour $Bo = 5$ et $\theta_Y = 90°$ avec différentes valeurs de κ^{LU} dans le but d'identifier la valeur de κ^{LU} qui respecte l'adimensionnement. Par construction, les déformations de l'interface dues à la gravité sont non négligeables pour $Bo > 1$. Ainsi, un nombre de Bond élevé est choisi pour favoriser la visualisation des écarts entre la courbure théorique et les courbures numériques en fonction de κ^{LU}.

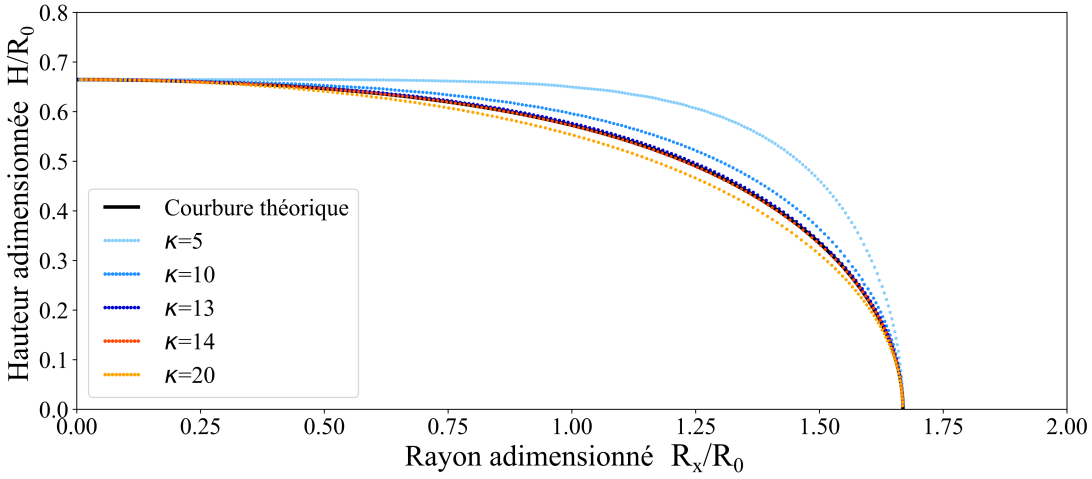

Figure 4.11 : Courbures numériques en fonction de κ^{LU} avec $Bo = 5$ et $\theta_Y = 90°$, pour un schéma de discrétisation D2Q9, et comparées avec la courbure théorique.

La figure 4.11 présente les courbures issues des simulations LBM en 2D en fonction de κ^{LU}. Il est possible de comparer chacune des courbes avec la courbure théorique de l'interface liquide-gaz, pour trouver celle qui concorde au mieux. En 2D, avec un schéma de discrétisation de type D2Q9, la courbe la plus satisfaisante est obtenue pour $\kappa^{LU} = 13$. De manière analogue, il est possible de déterminer la bonne valeur de κ^{LU} en 3D avec un schéma de discrétisation D3Q15. Comme le montre la figure 4.12, la valeur de κ^{LU} requise est différente qu'en D2Q9 et vaut 5. Ce qui montre également que la valeur de κ^{LU} à choisir varie en fonction de schéma de discrétisation, ou à minima du nombre de dimensions.

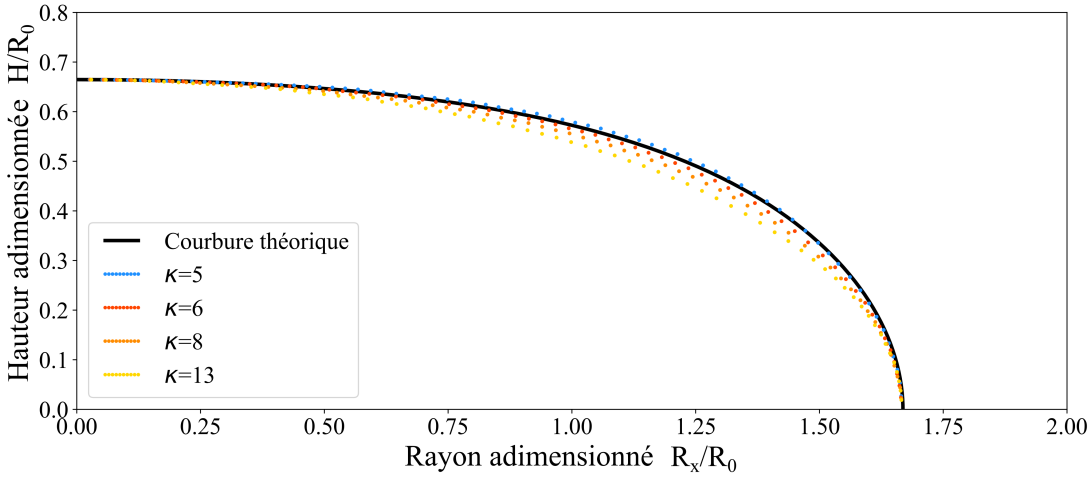

Figure 4.12 : Courbures numériques en fonction de κ^{LU} avec $Bo = 5$ et $\theta_Y = 90°$, pour un schéma de discrétisation D3Q15, et comparées avec la courbure théorique.

La valeur de κ^{LU} étant dépendante du schéma de discrétisation, il est important de vérifier qu'elle ne soit pas dépendante d'autres paramètres tels que le nombre de Bond et l'angle de contact intrinsèque θ_Y. Dans le but de garantir le choix des valeurs de $\kappa^{LU,2D} = 13$ et $\kappa^{LU,3D} = 5$, d'autres simulations sont réalisées en variant Bo et θ_Y. L'ensemble des courbures issues de ces simulations sont représentées sur la figure 4.13, toujours en les comparant aux courbures théoriques. Les résultats montrent une très bonne concordance, hormis pour le cas avec $\theta_Y = 70°$ et $Bo = 5$. Cependant, les simulations réalisées durant cette thèse sont soumises à un nombre de Bond de l'ordre de 0,1. Des résultats similaires sont obtenus pour les simulations en 3D. Ainsi, au vu de ces résultats, les valeurs de $\kappa^{LU,2D} = 13$ et $\kappa^{LU,3D} = 5$ sont validées.

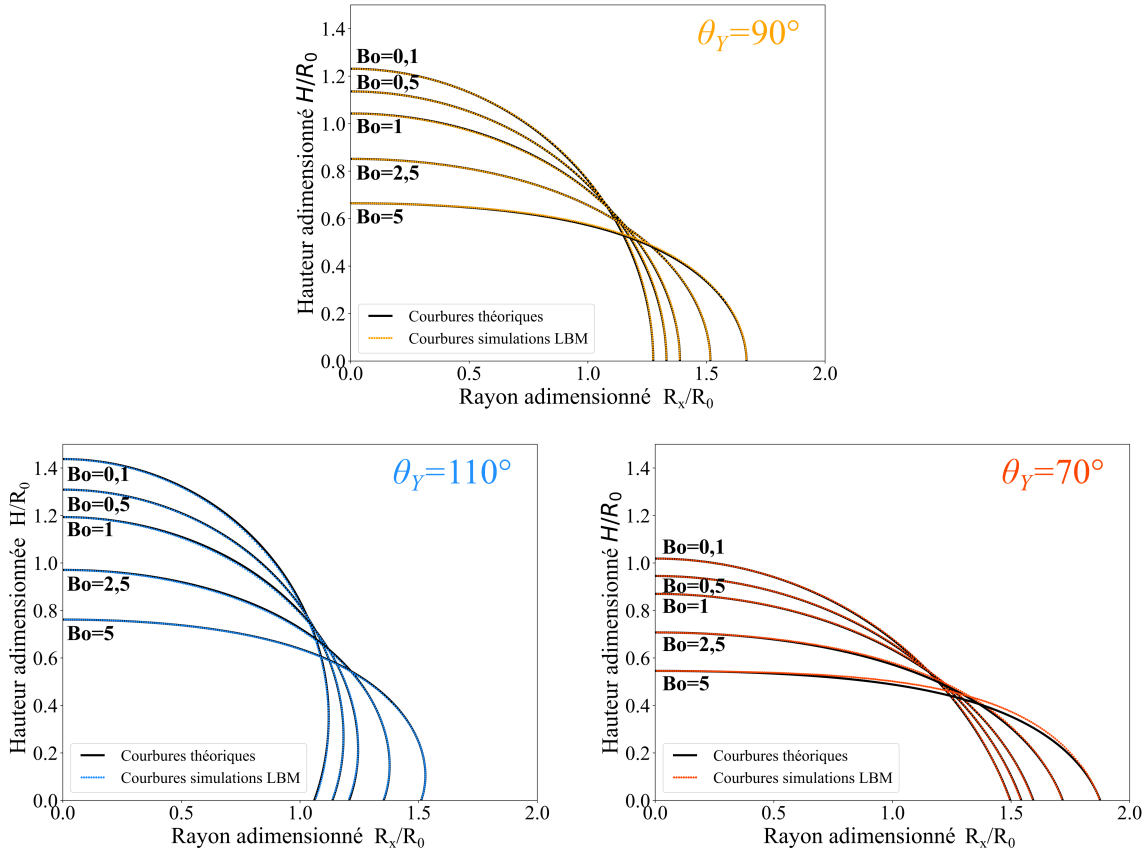

Figure 4.13 : Comparaison entre les courbures théoriques et les courbures simulées en 2D pour trois valeurs de θ_Y respectivement 110°, 90°et 70° et différentes valeurs du nombre de Bond.

4.4.4 Essai d'inclinaison pour une surface plane

Après avoir validé les différents modèles d'interaction entre les phases du système ainsi que l'incorporation des forces de pesanteur dans le code, il est envisageable de simuler des essais d'inclinaison. Pour rappel, comme présenté dans le chapitre 1 (Section 1.2.3), les essais d'inclinaison de goutte sessile sont utilisés pour déterminer les angles de contact lors du décrochage de la goutte. Cette méthode permet de quantifier l'angle d'avancée θ_a et l'angle de reculée θ_r d'une goutte sur une surface et ainsi de calculer l'hystérèse d'angle de contact $\Delta\theta = \theta_a - \theta_r$, à condition d'observer un décrochage.

Pour reproduire des essais d'inclinaison numériquement, il a été choisi d'ajuster l'orientation des forces de pesanteurs au fur et à mesure de l'inclinaison en fonction de l'angle d'inclinaison

α. De cette manière, il n'est pas nécessaire de modifier la géométrie du solide dans les lattices, ce qui serait extrêmement coûteux en temps de calcul. Cependant, la modification régulière de l'orientation de la gravité dans la simulation oblige tout de même à communiquer plus souvent entre le CPU et le GPU. De plus, le nombre d'itérations nécessaires pour observer l'évolution du comportement de la goutte doit être significativement plus long que le temps requis pour atteindre l'état d'équilibre sans inclinaison. En effet, de façon analogue aux essais expérimentaux, une fois la goutte sessile à l'équilibre sur la surface, l'angle d'inclinaison doit évoluer entre $\alpha = 0°$ et $\alpha = 90°$. Ces différents éléments impliquent des temps de simulation drastiquement plus longs pour des essais dynamiques avec inclinaison.

Pour tester et valider les simulations avec inclinaison, il a été choisi de se placer dans le cas d'une surface parfaitement plane et homogène chimiquement. En théorie, le phénomène d'hystérèse d'angle de contact étant originaire des hétérogénéités chimiques et topographiques, la goutte sessile doit se déplacer avec une hystérèse nulle, dès le début de l'inclinaison [8]. Si le même comportement est observé numériquement, alors les simulations avec inclinaison seront considérées comme étant fonctionnelles.

Ces simulations sont effectuées en 3D, en utilisant un lattice cubique avec une longueur de côté égale à 200 LU, mais en présence de gravité avec $Bo \approx 0.1$ correspondant à une goutte d'eau de 3 µL de volume. La configuration des simulations étant similaire aux simulations réalisées pour la validation du modèle d'interaction fluide-solide (Sections 4.4.2 et 4.4.3), il est possible de connaître le nombre d'itérations nécessaire pour atteindre l'équilibre de la goutte. Pour ces simulations, la goutte atteint l'équilibre autour de la 5 000ième itération. Ainsi, l'inclinaison numérique est simulée après l'itération 5 000, jusqu'à la 20 000ième itérations, soit avec une vitesse d'inclinaison de 0.006 degré par itération. Pour les cas tests, la mise à jour de l'orientation de la gravité est effectuée tous les 10°.

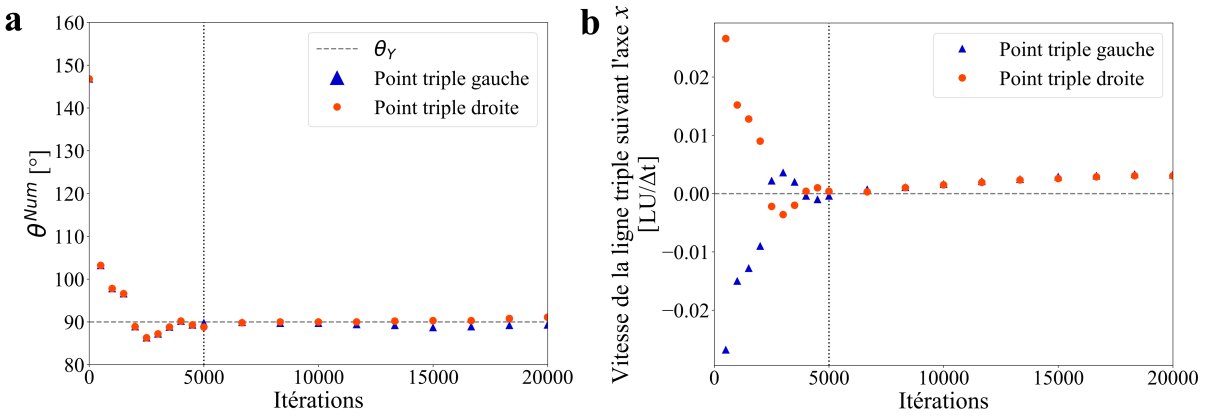

Figure 4.14 : Simulation d'inclinaison avec $\theta_Y = 90°$. (a) Evolution des angles de contact à gauche et à droite de la goutte dans le plan de l'inclinaison ; (b) Evolution de la vitesse de la ligne triple à gauche et à droite de la goutte dans le plan de l'inclinaison.

Pour analyser les résultats, il est possible de se concentrer sur la simulation avec $\theta_Y = 90°$, dont les résultats sont représentés sur la figure 4.14. Le tracé de l'évolution des angles de contact à gauche et à droite de la goutte permet de confirmer que la simulation atteint la valeur de θ_Y vers 5 000 itérations, avant l'inclinaison. Durant l'inclinaison, les valeurs d'angle à gauche et à droite restent très proches de θ_Y. D'autre part, en observant l'évolution de la vitesse de la ligne triple au niveau des points triples à gauche et à droite de la goutte, il est possible de constater

que les deux points triples se déplacent à la même vitesse dans le sens de l'inclinaison. De plus, les deux points triples se déplacent dès le début de l'inclinaison avec une vitesse croissante en accord avec l'augmentation de l'angle d'inclinaison α.
Enfin, les angles d'avancée et de reculée peuvent être mesurés à la première itération sauvegardée après le début de l'inclinaison. Ainsi $\theta_a = 90°$ et $\theta_r = 90°$, confirmant que l'hystérèse d'angle de contact $\Delta\theta$ est nulle.

Dans cette configuration avec une surface parfaitement plane et homogène chimiquement, toutes les simulations donnent des résultats similaires quelle que soit la valeur de θ_Y utilisée en paramètre d'entrée. Ces résultats permettent de valider la capacité du code de simulation, développé durant cette thèse, à simuler des essais d'inclinaison et à déterminer l'hystérèse d'angle de contact numériquement.

Chapitre 5

Etudes sur l'étalement et le décrochage des gouttes

« ... and still he'd see the matrix in his sleep, bright lattices of logic unfolding across that colorless void... »

William Gibson, *Neuromancer*

Sommaire

5.1 Mouillabilité numérique d'une surface texturée réelle 108
5.1.1 Propriétés de la surface texturée 108
5.1.1.1 Fabrication de la surface 108
5.1.1.2 Caractérisation topographique de la surface réelle 109
5.1.1.3 Concordance topographique de la surface discrétisée 110
5.1.2 Comparaison expérimental et numérique 111
5.1.2.1 Caractérisation de la mouillabilité 111
5.1.2.2 Comparaison de l'état d'équilibre de la goutte 112
5.1.2.3 Effets de la pesanteur sur l'état d'équilibre 113
5.1.3 Prédiction du comportement pour différentes chimies 115
5.1.3.1 Angle de contact et anisotropie d'étalement 115
5.1.3.2 Quantification de l'interface liquide-solide 118
5.2 Mouillabilité numérique de surfaces modèles 120
5.2.1 Motifs, réseaux et chimies des surfaces modèles 121
5.2.2 Goutte en équilibre statique 122
5.2.2.1 Comportement statique sur les textures topographiques . . 123
5.2.2.2 Comportement statique sur les textures chimiques 127
5.2.3 Décrochement dynamique par inclinaison 132
5.2.3.1 Comportement dynamique sur les textures topographiques . 133
5.2.3.2 Comportement dynamique sur les textures chimiques . . . 136

Dans le cadre de cette thèse, de nombreuses simulations LBM de gouttes sessiles ont été réalisées dans le but d'étudier numériquement les propriétés de mouillabilité des surfaces texturées. Ce chapitre est donc consacré à l'analyse des résultats de simulation, au vu de différentes campagnes de simulations, chacune étant dédiée à une catégorie de surface spécifique. Dans une première partie, les résultats numériques et expérimentaux sont comparés pour une surface réelle comportant une texturation anisotrope, puis le modèle numérique est exploité pour prédire le comportement dans le cas de chimies de surfaces différentes. Enfin, dans une deuxième partie, des simulations sont réalisées sur différentes surfaces modèles dans le but d'étudier le comportement d'étalement en fonction des paramètres géométriques de ces surfaces.

5.1 Mouillabilité numérique d'une surface texturée réelle

L'enjeu de cette première campagne de simulations est, dans un premier temps, de comparer les résultats expérimentaux avec les résultats numériques pour une surface réelle [169]. Ensuite, d'autres simulations, pour la même surface sont utilisées pour étudier l'impact de la gravité et de la chimie de surface sur l'état d'équilibre d'une goutte sessile [169].

5.1.1 Propriétés de la surface texturée

Tout d'abord, afin de pouvoir comparer les deux approches, il est crucial de choisir une surface avec des motifs suffisamment grands pour assurer une bonne concordance de la surface réelle est de son double discrétisé.

5.1.1.1 Fabrication de la surface

Pour cette étude, il a été choisi d'utiliser une surface texturée sur 3×3 mm^2, composée de larges motifs unidirectionnels. En effet, sur cette surface, plusieurs lignes de crêtes se répètent, suivant l'axe x, avec une période Π_x égale à 300 µm. Cette surface est obtenue à la suite de deux étapes de fabrication : une texturation laser suivie d'une réplication négative.
Dans un premier temps, un moule en polypropylène (PP) est réalisé par une opération de texturation en ablatant de la matière avec un laser femtoseconde. Des rainures sont ainsi formées en balayant le substrat avec des impacts laser successifs se chevauchant, le long de l'axe y, avec une période $\Pi_y = 70$ µm [170].
Ensuite, le moule en PP est utilisé pour une opération de réplication négative avec du polydiméthylsiloxane (PDMS). De cette manière, l'échantillon de PDMS texturé est produit avec des lignes de crêtes en opposition aux rainures du moule. La réplication négative est réalisée en suivant un protocole précis [14, 171], détaillé ci-dessous :

1. L'élastomère à base de silicone est mélangé à l'agent de durcissement avec un rapport de masse de 10 pour 1.

2. Le PDMS est versé dans le moule en PP et placé dans une chambre à vide pendant 2 heures pour favoriser l'imprégnation complète des textures.

3. L'ensemble est placé pendant 20 heures dans un environnement contrôlé à 25°C pour le durcissement, puis chauffé dans un four à 80°C pendant 1 heure.

4. Enfin, la réplique PDMS entièrement polymérisée peut être démoulée.

L'échantillon en PDMS obtenu par cette méthode de fabrication a été observé à l'aide d'un microscope électronique à balayage (MEB). Une vue de dessus ainsi qu'une vue inclinée avec un angle de 40° sont présentées dans la figure 5.1, permettant de visualiser les textures sur l'échantillon.

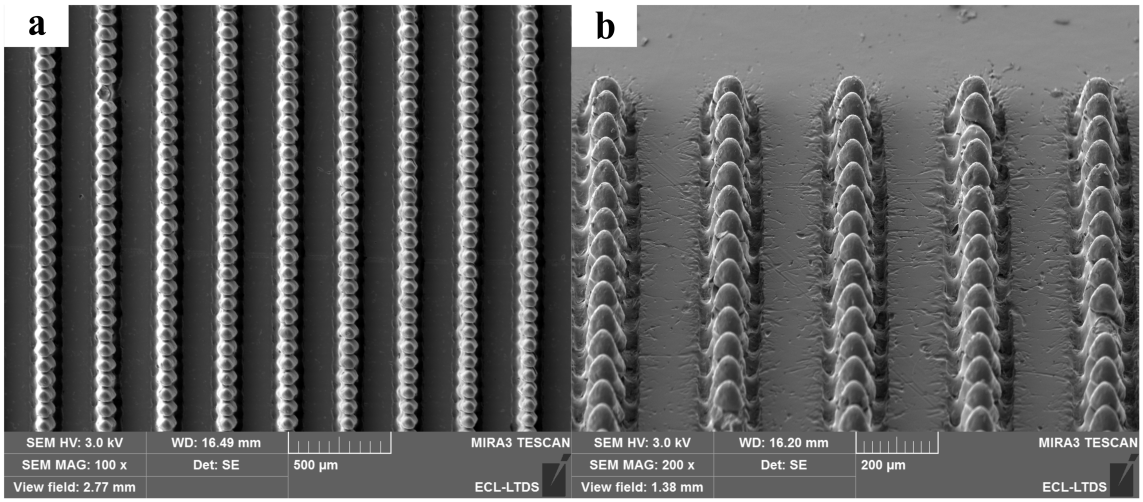

Figure 5.1 : Images MEB de l'échantillon de PDMS texturé. (a) Vue de dessus avec un zoom $\times 100$; (b) Vue inclinée à 40° avec un zoom $\times 200$.

5.1.1.2 Caractérisation topographique de la surface réelle

Une caractérisation topographique a été réalisée afin d'étudier quantitativement les propriétés de rugosité de la surface texturée [14].
Les mesures topographiques ont été effectuées par interférométrie optique à balayage vertical avec un objectif $\times 5$, une lentille $\times 0{,}55$ et une lumière verte de longueur d'onde 550 nm. Avec ces paramètres, la surface d'un scan est de $2{,}334 \times 1{,}750$ mm^2. Cependant, la surface totale peut être recomposée à partir de plusieurs zones scannées et combinées ensemble. Pour l'échantillon texturé sur 3×3 mm^2 utilisé dans cette étude, il suffit de quatre scans pour recomposer la surface totale.

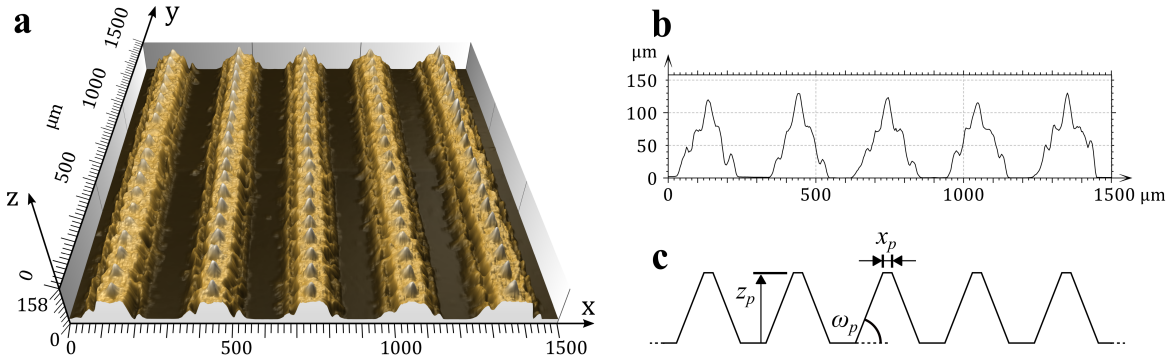

Figure 5.2 : (a) Visualisation 3D d'une zone extraite de la mesure interférométrique totale ; (b) Profil des texturations suivant une orientation transversale aux lignes de crêtes ; (c) Simplification du profil des textures utilisé pour estimer les valeurs requises dans les modèles théoriques.

La topographie de la surface a été caractérisée par différents paramètres de rugosité tels que la hauteur moyenne arithmétique S_a, la hauteur quadratique moyenne S_q et le rapport de la surface interfaciale développée S_{dr}. Ces paramètres ont été calculés, à trois reprises, pour différentes sous-surfaces de 1,5×1.5 mm^2 extraites à des endroits différents de la surface totale. Pour l'échantillon de PDMS réel utilisé durant les expériences, $S_a = 32,4$ µm, $S_q = 36$ µm et $S_{dr} = 0,99$.

La visualisation des mesures topographiques de l'échantillon de PMDS est présentée dans la figure 5.2. De plus, les motifs observés peuvent être simplifiés comme une ligne de crête de hauteur moyenne $z_p = 110$ µm, avec une largeur moyenne au sommet $x_p = 30$ µm et une pente moyenne $\omega_p = 50°$. Cette surface simplifiée est utilisée uniquement pour déterminer les valeurs théoriques nécessaires dans les modèles théoriques du mouillage, comme par exemple la fraction surfacique du solide ϕ_S dans le modèle de Cassie-Baxter [18].
Au contraire, la surface numérique incorporée dans le code LBM est directement discrétisée à partir des mesures topographiques.

5.1.1.3 Concordance topographique de la surface discrétisée

Avant d'étudier les propriétés de mouillabilité de la surface en PDMS, la concordance topographique entre l'échantillon expérimental et la géométrie discrétisée doit être évaluée en fonction de la discrétisation. En effet, plusieurs discrétisations de la surface sont effectuées en faisant varier le pas d'espace Δx de 20 µm à 5 µm. À titre de comparaison, les mesures interférométriques de la surface sont échantillonnées avec un pas d'espace de 3,65 µm pour les axes x et y et avec une résolution de 0,1 nm le long de l'axe z.

Dans le but de choisir le pas d'espace à utiliser pour les simulations, les paramètres de rugosité en fonction de Δx sont comparés à la mesure interférométrique utilisée comme référence. L'ensemble des paramètres de rugosité en fonction de la discrétisation est récapitulé dans le tableau 5.1.

Δx (LU)	S_a (µm)	S_q (µm)	S_{dr}
Référence	32.4 ± 1.2	36.0 ± 0.6	0.99 ± 0.03
20	33.0 ± 0.6	36.8 ± 0.5	0.93 ± 0.04
15	30.6 ± 0.7	34.3 ± 0.3	0.96 ± 0.02
12	32.6 ± 1.1	36.4 ± 0.5	1.19 ± 0.05
10	31.6 ± 1.4	35.2 ± 0.8	1.21 ± 0.05
5	32.3 ± 1.2	35.8 ± 0.6	1.39 ± 0.04

Tableau 5.1 : Paramètres de rugosité en fonction du pas d'espace Δx utilisé pour la discrétisation.

De manière prévisible, lorsque le pas d'espace Δx diminue, les paramètres de rugosité liés aux hauteurs S_a et S_q tendent vers les valeurs obtenues pour l'échantillon de PDMS réel, utilisé comme référence.
En revanche, il existe une augmentation des valeurs de S_{dr} liée à la diminution du pas d'espace de discrétisation. Cette tendance est facilement explicable par l'impact de la résolution de

l'échantillonnage dans la définition du S_{dr}. La diminution de Δx se traduit par une augmentation de la résolution d'échantillonnage utilisée pour la caractérisation topographique de la surface. En effet, une résolution d'échantillonnage plus fine permet de détecter plus d'aspérités topographiques, ce qui augmente la surface développée mesurée.
De plus, les valeurs de S_{dr} calculées pour les surfaces discrétisées sont considérablement augmentées par la discrétisation de la surface en éléments cubiques. En effet, le maillage cubique, nécessaire à l'incorporation dans le code LBM, augmente fortement l'aire interfaciale développée mesurée dans les pentes.

Pour la surface numérique, le pas de l'espace de discrétisation est choisi pour assurer la bonne concordance topographique, tout en limitant le temps de calcul et le coût en mémoire de calcul. Au vu des résultats, un bon compromis est trouvé avec $\Delta x = 12$ µm, pour lequel $S_a = 32,6$ µm, $S_q = 36,4$ µm et $S_{dr} = 1,19$. Avec ce choix de discrétisation, l'ensemble du système est défini dans un réseau cubique de 250 LU de côté.

5.1.2 Comparaison expérimental et numérique

5.1.2.1 Caractérisation de la mouillabilité

Afin d'évaluer les résultats de la simulation, des comparaisons sont effectuées entre les approches expérimentales et numériques dans des configurations identiques.

Les résultats expérimentaux sont quantifiés par une expérience de goutte sessile réalisée avec des gouttes de 3 µL d'eau distillée. La position exacte des dépôts expérimentaux étant difficilement contrôlable, les dépôts sont effectués cinq fois sur la surface afin d'assurer la répétabilité des résultats et d'estimer l'écart-type de l'essai. L'ensemble des expériences a été réalisé avec une aiguille en borosilicate (aiguille NE50 de KRÜSS). De plus, toutes ces expériences ont été menées dans une pièce maintenue à 20°C avec environ 30% d'humidité.

Pour le PDMS, les simulations de mouillage sont effectuées avec $\theta_Y = 112°$. Pour atteindre l'état d'équilibre, les simulations sont exécutées avec un nombre total d'itérations égal à 30 000. De plus, la goutte à l'initialisation est positionnée tangente à la surface solide, puis elle est légèrement enfoncée dans le solide avec un décalage suivant l'axe z de $Z_{Offset} = 5$ LU.

En accord avec les expériences, les simulations sont effectuées avec le même volume de liquide, ce qui correspond, à l'initialisation, à une goutte sphérique de 75 LU de rayon. Pour des gouttes d'eau distillée de 3 µL de volume entourées d'air ambiant, le nombre de Bond (Bo) est d'environ 0,1. À cette échelle, où les gouttes sont de taille inférieure à la longueur capillaire, la gravité a un impact limité sur la courbure de l'interface liquide-gaz. En revanche, la gravité joue toujours un rôle important dans la transition entre les régimes de mouillage suspendus et imprégnés [32, 35].

Étant donné que la position initiale des gouttes par rapport aux motifs peut influer sur les résultats, les simulations numériques ont été effectuées avec différentes positions initiales. Les simulations de mouillage sur la surface du PDMS ont été exécutées cinq fois en faisant varier la position initiale, choisie aléatoirement parmi plusieurs emplacements fixes par rapport aux périodes des motifs Π_x et Π_y, comme illustré dans la figure 5.3. De plus, deux des simulations sont forcées dans les configurations extrêmes suivant la direction transversale, c'est-à-dire centrées sur la ligne de crête et centrées entre deux lignes de crête.

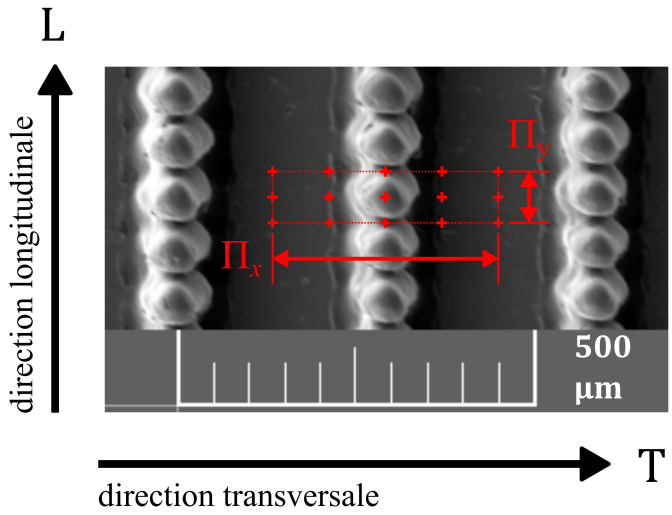

Figure 5.3 : Représentation schématique des positions initiales possibles, pour les dépôts numériques, suivant les directions transversale (axe x) et longitudinale (axe y).

5.1.2.2 Comparaison de l'état d'équilibre de la goutte

Tout d'abord, les approches expérimentales et numériques sont comparées qualitativement sur la base de l'observation de l'état d'équilibre. Comme le montre la vue latérale transversale dans la figure 5.4, pour les deux approches, la goutte atteint un état d'équilibre où elle reste en suspension sur les textures. En se référant aux états de mouillage définis dans le chapitre 4 (Section 4.3.3), il s'agit soit d'un état Cassie-Baxter (CBS) soit d'un état mixte (MS). Bien que cela ne soit pas clairement observable expérimentalement, la simulation numérique permet de conclure que la goutte est dans un régime MS stable, où les pentes des motifs sont partiellement imprégnées. En outre, pour les deux approches, l'observation latérale suivant la direction transversale permet de montrer que la goutte est suspendue sur trois motifs.

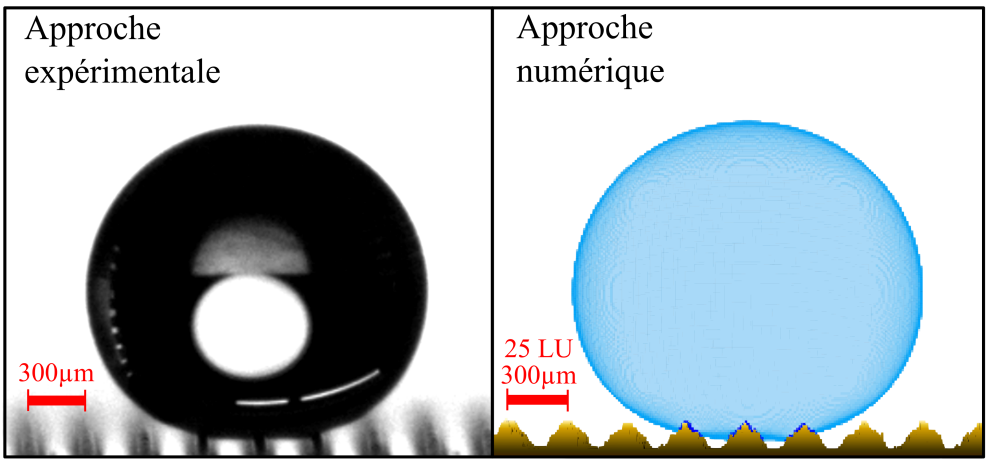

Figure 5.4 : Vue latérale, suivant la direction transversale, de l'état d'équilibre pour l'approche expérimentale et l'approche numérique pour le substrat en PDMS.

Étant donné que l'aire de contact mouillée A_{wet} et la profondeur d'ancrage Z_a ne peuvent être caractérisées expérimentalement, la comparaison quantitative n'est faite qu'à travers l'angle de contact macroscopique à l'équilibre. Pour chacune des approches, les angles de contact

macroscopiques sont comparés suivant deux directions : la direction longitudinale (axe y) et la direction transversale (axe x). Les angles de contact apparents associés à ces deux directions sont respectivement notés θ_L et θ_T. De plus, l'anisotropie d'angle de contact peut être calculée par l'expression : $|\theta_T - \theta_L|$.

Comme présenté au chapitre 4 dans la partie consacrée au post-traitement des angles de contact (Section 4.3.1), deux méthodes différentes de détermination de l'angle de contact numérique peuvent être appliquées. Premièrement, pour θ^{Num}, l'angle est calculé aux positions précises des points de la ligne triple, qui peuvent être situées, le long des pentes du motif, dans les textures. Dans la deuxième méthode, $\theta^{*,Num}$ correspond à l'angle de contact calculé pour une ligne de base relevée aux sommets des textures. Par construction, $\theta^{*,Num}$ est défini de manière similaire à l'angle de contact apparent mesuré expérimentalement, noté θ^{Exp}.

Méthode	θ_T		θ_L		$\lvert\theta_T - \theta_L\rvert$	
θ^{Exp}	152	$\pm$ 1.2	142	$\pm$ 0.4	10	$\pm$ 0.9
θ^{Num}	164	$\pm$ 2.8	146	$\pm$ 2.2	18	$\pm$ 2.3
$\theta^{*,Num}$	146	$\pm$ 2.6	140	$\pm$ 2.9	6	$\pm$ 2.1

Tableau 5.2 : Comparaison des angles de contact statiques apparents mesurés expérimentalement et numériquement.

Dans l'ensemble, chacune des approches capture le même comportement. Comme l'indique le tableau 5.2, les angles de contact sont toujours légèrement supérieurs dans le sens transversal que dans le sens longitudinal. Cependant, l'anisotropie reste faible ($\leq 10°$), sauf dans le cas du θ^{Num} avec $|\theta_T - \theta_L| = 18°$. Ceci est en accord avec l'observation de gouttes en suspensions, pour lesquelles une faible anisotropie d'angle de contact est attendue [50].

En comparant les angles de contact calculés, les valeurs de θ^{Num} sont environ 5,4% plus élevées que les valeurs expérimentales. Mais pour comparer la valeur numérique et la valeur expérimentale, il est plus pertinent de comparer θ^{Exp} avec $\theta^{*,Num}$, qui sont définis de manière similaire avec une ligne de base relevée. En effet, comme le montre le tableau 5.2, $\theta^{Exp} = 152°$ et $\theta^{*,Num} = 146°$ pour la direction transversale, et respectivement 142° et 140° pour la direction longitudinale. De cette manière, les différences entre les valeurs expérimentales et numériques sont réduites, avec des valeurs de $\theta^{*,Num}$ seulement inférieures de 2,6% aux valeurs expérimentales.
Compte tenu de ces résultats proches, le code confirme sa capacité à simuler le comportement de mouillabilité des surfaces texturées. Dans la suite, les simulations sont utilisées pour approfondir l'étude en caractérisant l'interface liquide-solide.

5.1.2.3 Effets de la pesanteur sur l'état d'équilibre

Avec l'approche numérique, il est possible de simuler l'étalement en absence de gravité, pour la même goutte de 3 µL et la même surface texturée en PDMS. Ceci a pour objectif de quantifier les effets de la pesanteur sur l'état d'équilibre et de vérifier s'il est possible de négliger les forces de pesanteur à cette échelle. Théoriquement, avec un nombre de Bond $Bo = 0,1$, les effets de la gravité sur la courbure de l'interface liquide-gaz sont négligeables. Cependant, comme précisé précédemment, la gravité peut être à l'origine d'une transition entre un état suspendu et un état imprégné.

Dans cette partie, les valeurs associées, au cas où les forces de gravité sont négligées, sont indicées avec la notation $0g$.
Dans la suite du manuscrit, les angles de contact étudiés sont déterminés à l'emplacement précis de la ligne triple au sein des textures, ce qui ne peut être obtenu que numériquement. Ceci correspond à utiliser les valeurs de θ^{Num}, contrairement à la partie précédente dédiée à la comparaison avec l'approche expérimentale (Section 5.1.2.2). Pour les résultats de simulations, θ^{Num} est préféré à $\theta^{*,Num}$, car l'ensemble des autres propriétés de mouillabilité accessibles, numériquement, sont post-traitées à partir de la détection de la triple ligne où θ^{Num} est calculé.

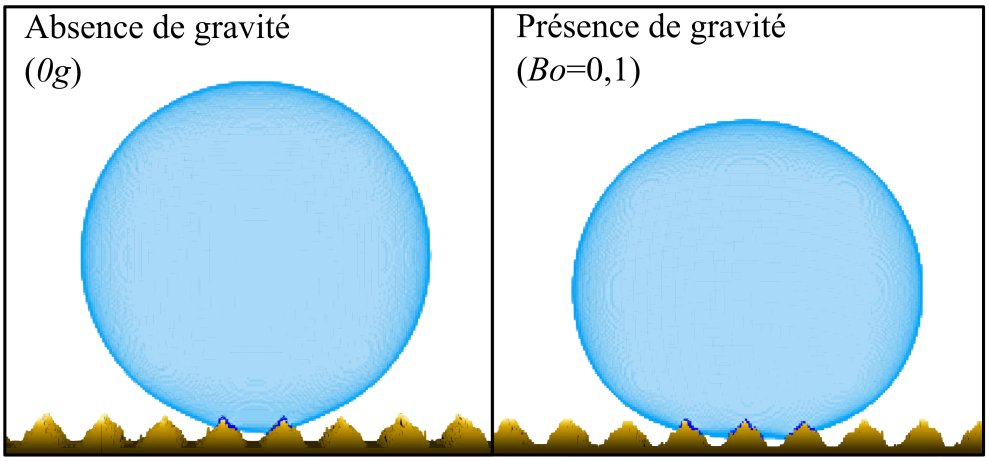

Figure 5.5 : Vue latérale, suivant la direction transversale, de l'état d'équilibre en l'absence ou en présence des forces de pesanteur.

Pour commencer, il est possible de comparer les deux configurations à partir de l'observation de l'état d'équilibre issue de la figure 5.5. Dans les deux cas, la goutte atteint un état d'équilibre en suspension sur les lignes de crêtes. Cependant, le nombre de motifs sous la goutte diffère. En effet, en l'absence de gravité, la goutte repose sur seulement deux motifs au lieu de trois.

Ensuite, il est possible de quantifier la différence de comportement de mouillabilité à travers la comparaison des angles de contact macroscopiques. Dans la direction transversale aux lignes de crêtes, les deux configurations ont approximativement les mêmes valeurs, soit $\theta_T = 164°$ et $\theta_{T,0g} = 162°$. Au contraire, dans la direction longitudinale, la goutte non soumise à la gravité a un étalement réduit et une valeur de $\theta_{L,0g} = 155°$ supérieure à $\theta_L = 146°$. Ainsi, en absence de gravité, l'anisotropie du comportement de mouillabilité induite pas la surface est très faible avec $|\theta_{T,0g} - \theta_{L,0g}| = 7°$.

En addition de la caractérisation des angles de contact, les post-traitements numériques permettent de quantifier l'imprégnation des textures ainsi que différentes propriétés de l'interface liquide-solide. Comme présenté dans le chapitre 4 (Section 4.3.3), il est possible de tracer les courbes de distribution cumulée de l'interface liquide-solide, ce qui permet notamment de visualiser la profondeur d'ancrage maximum Z_a. Comme le montrent les courbes dans la figure 5.6, la goutte soumise à la gravité pénètre plus en profondeur au sein de la texturation de surface. En effet, $Z_{a,0g} = 84$ µm, alors que pour le système réel, avec la gravité, Z_a vaut 96 µm.
Enfin, il est possible de comparer l'interface liquide-solide, dans les deux configurations, en déterminant la longueur de ligne triple totale L_T et l'aire de contact mouillée A_{wet}. Dans le cas où la gravité est négligée, $L_{T,0g}$ vaut environ 3,5 mm et délimite un contact liquide-solide dont l'aire $A_{wet,0g}$ est environ égale à 0,14 mm^2. Avec la gravité, l'interface liquide-solide est

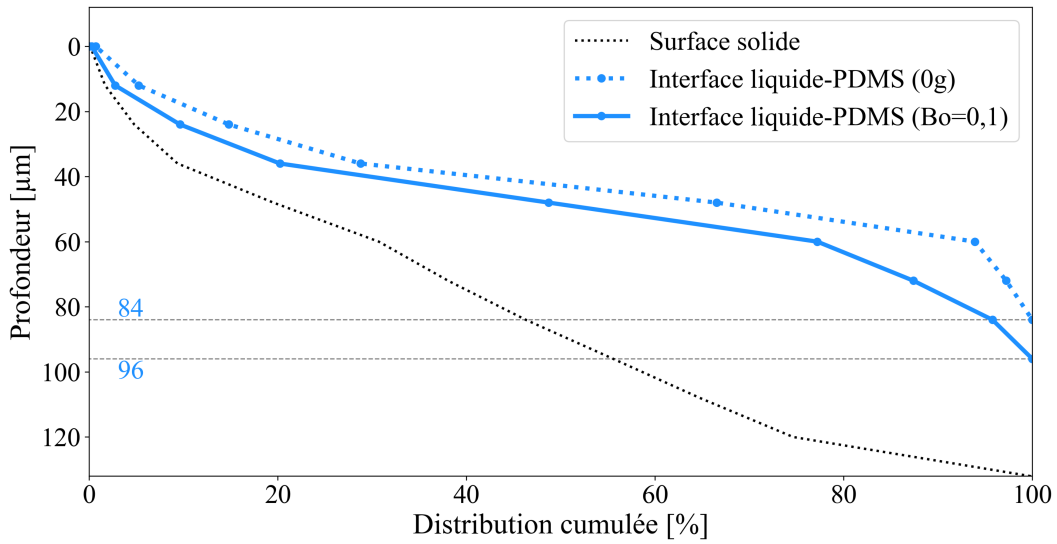

Figure 5.6 : Tracés des courbes de l'interface liquide-solide cumulée en l'absence ou en présence des forces de pesanteur.

plus importante avec $L_T \approx 7{,}2$ mm et $A_{wet} \approx 0{,}34$ mm^2. Ces valeurs confirment les résultats attendus. En effet, en raison d'un ancrage plus profond et d'un plus grand nombre de motifs sous la goutte, il était prévisible que l'interface liquide-solide soit plus grande en présence des forces de pesanteur.

Dans le cadre de cette topographie de surface avec une chimie de PDMS, négliger la gravité n'implique pas un changement radical de comportement avec une transition entre deux régimes de mouillage. Cependant, négliger la gravité à un impact significatif sur les valeurs de l'ensemble des propriétés de mouillabilité qu'il est possible de post-traiter. Pour la suite du manuscrit, il a été décidé de toujours considérer la gravité, bien que le nombre de Bond soit faible.

5.1.3 Prédiction du comportement pour différentes chimies

Pour approfondir l'étude, il est possible de prédire numériquement le mouillage pour la même topographie de surface, illustrée précédemment dans la figure 5.2, mais avec différentes chimies. Dans le cadre de cette étude, trois autres matériaux sont étudiés en plus du PDMS : du polyméthacrylate de méthyle modifié (mPMMA) provenant de l'industrie automobile, du polypropylène (PP) et de l'acrylonitrile butadiène styrène (ABS) avec chacun un angle de contact intrinsèque différent. Dans l'ordre pour le mPMMA, le PP et l'ABS, l'angle de contact intrinsèque θ_Y vaut respectivement 100°, 90° et 84°.

5.1.3.1 Angle de contact et anisotropie d'étalement

Pour tous les matériaux, l'angle de contact macroscopique dans chacune des deux directions est indiqué dans la figure 5.7. À partir de ces valeurs post-traitées, deux comportements différents peuvent être identifiés. Pour le PDMS, une faible anisotropie du comportement de mouillabilité est observée, tandis que pour les chimies moins hydrophobes, l'anisotropie est significativement plus importante. Ces variations de comportement peuvent être expliquées par l'adoption de différents états de mouillage à l'équilibre, en fonction du matériau. En effet, la simulation de

goutte sessile sur le substrat en PDMS s'équilibre dans un état mixte (MS), alors qu'un état imprégné (PWS ou WS) est observé pour les autres matériaux.

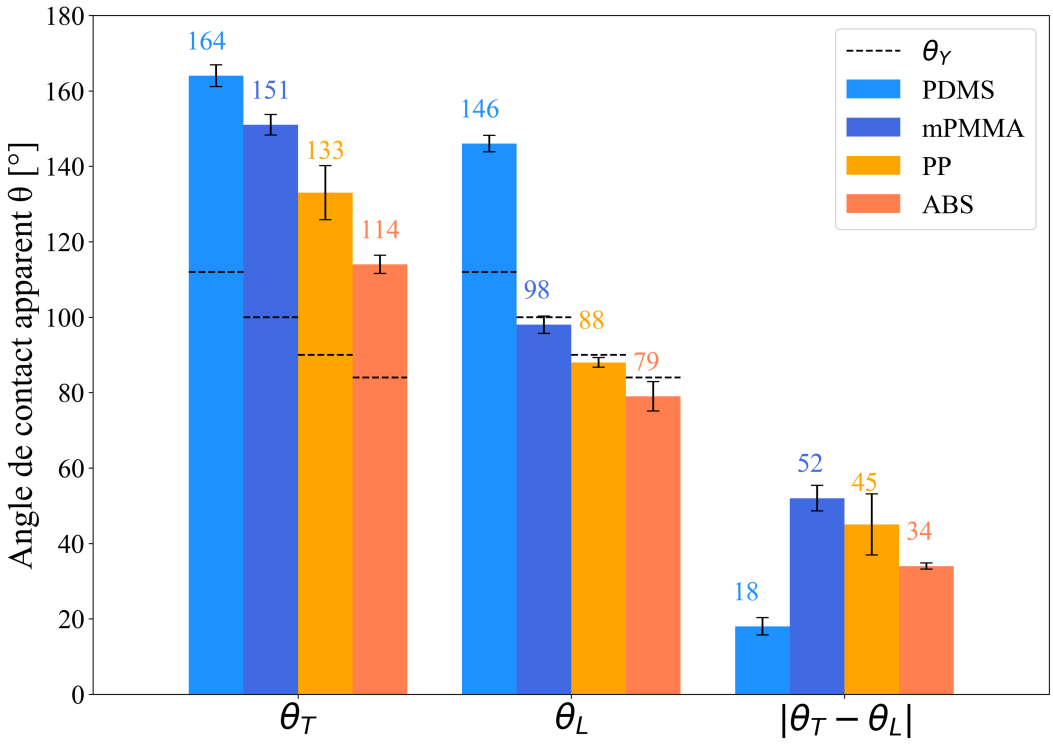

Figure 5.7 : Représentation des angles de contact numérique θ_T, θ_L et $|\theta_T - \theta_L|$ en fonction du matériau et donc de l'angle de contact intrinsèque θ_Y.

Dans le cas du PDMS, la valeur simulée de l'angle de contact macroscopique peut être comparée à la valeur théorique obtenue avec l'équation de Cassie-Baxter [18] : $\cos\theta_{CB} = -1 + \phi_S\,(\cos\theta_Y + 1)$. Où la fraction surfacique du solide ϕ_S peut être estimée en considèrent la surface simplifiée définie précédemment (Section 5.1.1.2). Ainsi ϕ_S est calculée pour des lignes de crêtes dont le sommet est large de $x_p = 30$ µm et chaque motif se répète avec une période $\Pi_x = 300$ µm. De cette façon, la valeur issue de la simulation $\theta_T = 164°$ s'avère proche de la valeur théorique $\theta_{CB} = 160°$.

D'une autre manière, pour les gouttes qui atteignent un état d'équilibre imprégné, l'angle de contact théorique, prédit par le modèle de Wenzel [17], est calculé tel que : $\cos\theta_W = r_W \cdot \cos\theta_Y$. Où la rugosité au sens de Wenzel r_W peut être déterminée à partir du paramètre de rugosité S_{dr}, comme présenté dans le chapitre 1 (Section 1.4), avec la relation : $r_W = S_{dr} + 1$. Pour cette étude, une valeur de $S_{dr} = 1,19$ est utilisée, correspondant à la valeur pour la surface discrétisée avec $\Delta x = 12$ µm et incorporée dans la simulation LBM. Pour les substrats en mPMMA, PP et ABS, les valeurs numériques de $\theta_T = 151°$, $133°$ et $114°$ sont beaucoup plus élevées que les valeurs théoriques, qui valent respectivement $\theta_W = 112°$, $90°$ et $77°$. Dans le modèle de Wenzel, les textures font partie de la rugosité de la surface et sont quantitativement représentées à travers le paramètre r_W, sans aucune information sur leur orientation ou leur nature anisotrope. Mais comme le montre la visualisation 3D des simulations dans la figure 5.8, l'étalement des gouttes dans la direction transversale aux lignes de crête est fortement limité par les phénomènes d'accroche aux sommets des lignes de crêtes, alors que l'étalement longitudinal est favorisé. Transversalement, il y a un très petit nombre de motifs sous la goutte, alors que

le modèle de Wenzel a été défini pour des tailles de goutte beaucoup plus grande par rapport aux dimensions des aspérités de la surface. Le faible nombre de motifs sous la goutte peut donc partiellement expliquer la différence entre les valeurs de θ_T et θ_W.

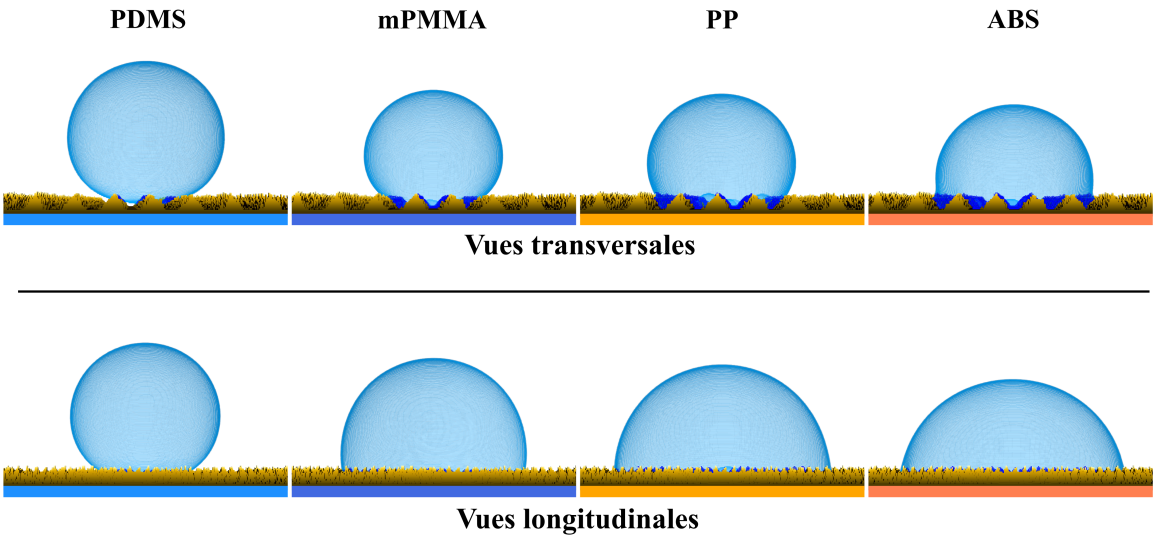

Figure 5.8 : Visualisation de l'état d'équilbre, à travers une vue transversale et une vue longitudinale, pour les différents matériaux simulés.

Dans la direction longitudinale, spécifiquement pour le PDMS, l'étalement des gouttes suivant la direction longitudinale est également limité avec une valeur élevée d'angle de contact apparent $\theta_L = 146°$ supérieure à $\theta_Y = 112°$. Au contraire, l'angle de contact macroscopique dans la direction longitudinale vaut $\theta_L = 98°$, $88°$ et $79°$ respectivement pour le mPMMA, le PP et l'ABS. Pour ces simulations, la goutte se répand au fond des textures entre les lignes de crêtes. Comme la rugosité du fond est inférieure au pas d'espace de discrétisation, le fond de la surface est parfaitement plan dans les simulations. Ceci explique pourquoi les valeurs de θ_L sont approximativement égales aux valeurs de θ_Y, pour le cas où la goutte imprègne la surface texturée.

Dans l'ensemble des simulations, les valeurs de θ_T sont strictement supérieures aux valeurs d'angle de contact dans la direction longitudinale θ_L, même pour le cas en Ms. Cela est directement dû à la nature anisotrope des textures. En effet, franchir une ligne de crête dans la direction transversale est très consommateur en énergie, ce qui favorise l'étalement le long des lignes de crêtes. Le comportement anisotrope a été quantifié pour chaque matériau, et vaut respectivement $|\theta_T - \theta_L| = 18°$, $52°$, $45°$ et $34°$ pour les substrats en PDMS, mPMMA, PP et ABS.

Pour les simulations conduisant à l'imprégnation des textures (mPMMA, PP et ABS), une deuxième tendance est observable au regard des valeurs de $|\theta_T - \theta_L|$. Avec cette topographie spécifique, plus le substrat est hydrophile, moins les textures semblent induire un comportement anisotrope du mouillage. Cette tendance est portée par l'impact de la dynamique d'étalement sur l'état d'équilibre. En effet, lors de l'étalement, les phénomènes d'accroche de la triple ligne aux sommets des textures ralentissent la propagation transversale. Cependant, plus le matériau est hydrophile, moins la ligne triple reste bloquée durant l'étalement, ce qui entraîne un comportement moins anisotrope.

5.1.3.2 Quantification de l'interface liquide-solide

Les post-traitements numériques présentés précédemment dans le chapitre 4 (Sections 4.3.2 et 4.3.3) permettent de caractériser quantitativement l'interface liquide-solide et l'imprégnation des textures. Pour analyser les résultats, il est proposé de comparer les valeurs de longueur de ligne triple L_T et d'aire de contact mouillée A_{wet} issues des simulations avec des approximations qui pourraient être réalisées expérimentalement. Expérimentalement, la forme de la goutte est généralement supposée être une calotte sphérique. Dans le cas de textures fortement anisotropes, telles que des lignes de crêtes, il est pertinent de supposer que la forme de la goutte est plus proche d'une calotte ellipsoïdale. Il est possible de noter la longueur de ligne triple pour cette approximation $L_{T,E}$ et de manière analogue l'aire de contact approximée pour une calotte ellipsoïdale $A_{wet,E}$. Ainsi, $L_{T,E}$ et $A_{wet,E}$ peuvent être considérées comme étant respectivement égales au périmètre et à l'aire d'une ellipse définie par deux demi-axes, avec comme demi-axes R_T dans la direction transversale et R_L dans la direction longitudinale. En pratique les valeurs de R_T et R_L sont post-traitées à partir des simulations comme étant les rayons de base de la goutte suivant l'orientation de la mesure.
L'approximation ellipsoïdale peut également être améliorée en tenant compte de la rugosité de la surface. Cela conduit à formuler une deuxième approximation où $L_{T,E}$ et $A_{wet,E}$ sont corrigées en prenant en compte le paramètre de rugosité de Wenzel r_W. Dans cette deuxième approximation, la longueur de ligne triple et l'aire de contact mouillée sont exprimées par $L_{T,rE} = r_W \cdot L_{T,E}$ et $A_{wet,rE} = r_W \cdot A_{wet,E}$.

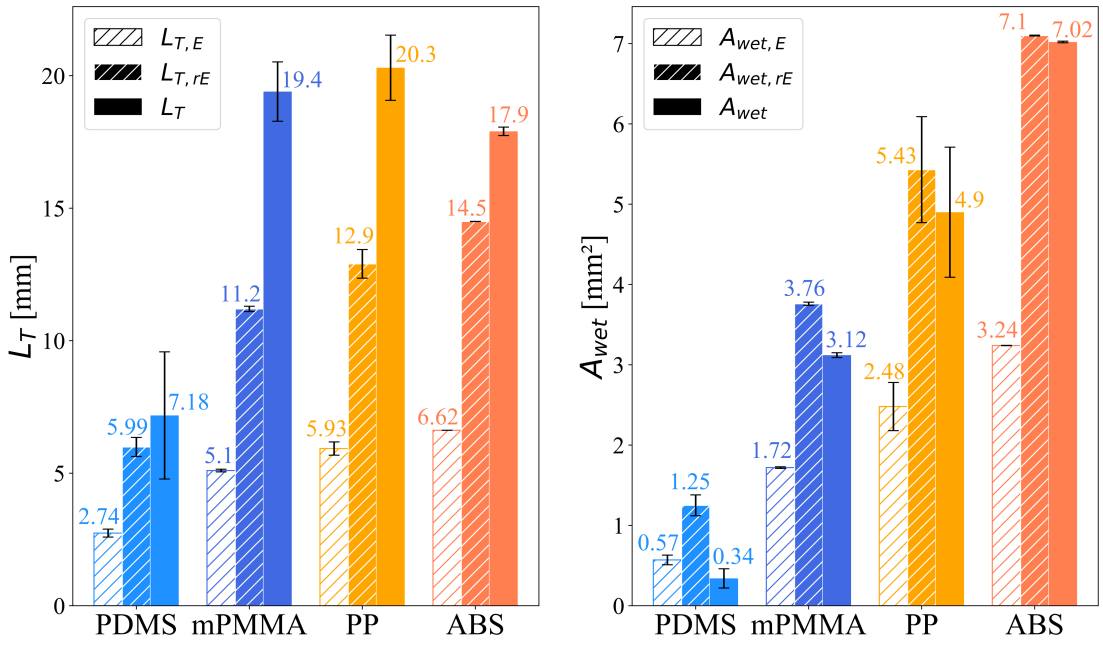

Figure 5.9 : Représentation des valeurs post-traitées des paramètres L_T et A_{wet} en fonction du matériau, permettant de quantifier l'interface liquide-solide.

La comparaison des valeurs de L_T et A_{wet}, entre les approximations et les simulations numériques pour chaque matériau, est présentée sous la forme de graphiques dans la figure 5.9.
Le cas du substrat en PDMS peut être traité séparément, puisqu'il s'agit du seul cas en MS. Cet état d'équilibre en suspension entraîne la formation de bandes de contact liquide-solide au sommet des lignes de crête. Par conséquent, les approximations de forme ellipsoïdale de l'interface liquide-solide ne conviennent pas pour estimer L_T et A_{wet} dans ce cas.

Pour les autres chimies, dont les gouttes présentent un comportement d'imprégnation des textures, les deux approximations montrent une augmentation linéaire de L_T et A_{wet} en lien avec la diminution de l'angle de contact intrinsèque θ_Y. Comparativement aux valeurs numériques, les approximations corrigées avec la rugosité ($L_{T,rE}$ et $A_{wet,rE}$) sont plus précises que les approximations ellipsoïdales parfaitement planes ($L_{T,E}$ et $A_{wet,E}$). Cependant, il existe toujours une différence entre les valeurs de $L_{T,rE}$, $A_{wet,rE}$ et celles de L_T et A_{wet}.

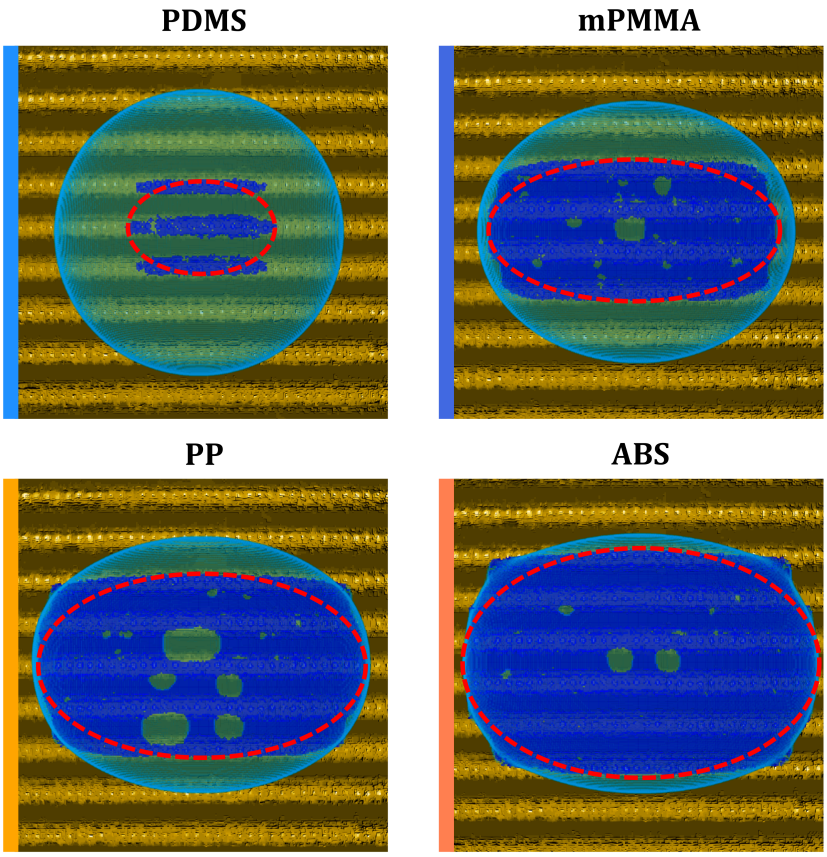

Figure 5.10 : Vue de dessus de l'interface liquide-solide en bleu pour les différents matériaux simulés et avec la forme des approximations ellipsoïdales représentée par les tirets rouges.

Cette différence peut s'expliquer par le manque d'informations sur l'imprégnation locale et la forme de l'interface dans les approximations. En effet, en observant la vue de dessus de l'interface liquide-solide visible sur la figure 5.10, les limites des deux approximations ellipsoïdales apparaissent clairement. Tout d'abord, la forme de l'interface liquide-solide semble plus proche d'une interface rectangulaire que d'une ellipse, ce qui tend à augmenter les valeurs L_T et A_{wet}. Deuxièmement, à l'équilibre, les gouttes sont dans un état pseudo-Wenzel (PWS), où il est possible d'observer des petites bulles d'air piégées sous la goutte liquide. Ces trous dans l'interface liquide-solide augmentent les valeurs post-traitées de longueur de ligne triple totale L_T. À l'inverse, la présence de ces bulles diminue les valeurs post-traitées de l'aire de contact mouillée A_{wet}. Cela explique pourquoi les approximations de $A_{wet,rE}$ semblent correctes à première vue pour évaluer A_{wet}, mais en réalité, c'est le résultat de deux erreurs qui se compensent. Ces observations permettent également d'expliquer pourquoi les valeurs de L_T n'augmentent pas linéairement avec la diminution de θ_Y, pour les cas en PWS (mPMMA, PP, ABS). La valeur de L_T, pour le substrat en PP et pour celui en mPMMA, est plus élevée que celle avec un substrat en ABS. Ce résultat en contradiction avec les approximations ellipsoïdales, s'explique par

la présence d'une plus grande surface de bulles d'air piégées sous le liquide, comme observé dans la figure 5.10.

Enfin, les différentes courbes des interfaces liquide-solide cumulées en fonction de la profondeur, tracées dans la figure 5.11, permettent de confirmer les régimes de mouillage observés sur les visualisations 3D. De plus, ces courbes d'interface cumulée en fonction de la profondeur peuvent être utilisées pour quantifier la profondeur d'ancrage Z_a, pour chaque simulation. En effet, la profondeur d'ancrage maximum Z_a peut être déterminée à 100% de la distribution cumulée, comme expliqué dans le chapitre 4 (Section 4.3.3). Pour rappel, dans le cas du PDMS soumis à la gravité, la goutte conserve un équilibre en suspension avec une profondeur d'ancrage $Z_a = 96$ µm.

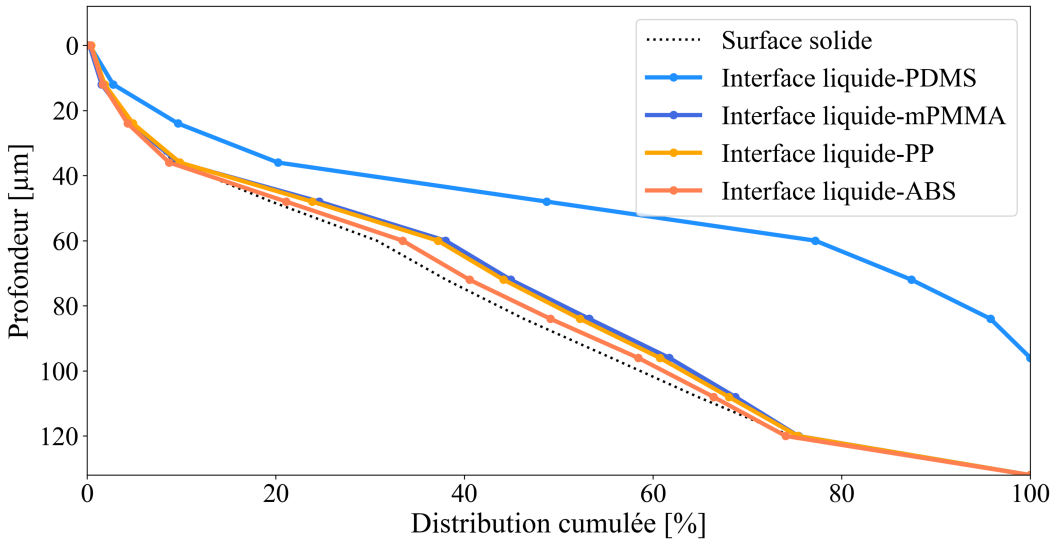

Figure 5.11 : Tracés des courbes de l'interface liquide-solide cumulée en fonction de la chimie.

D'autre part, pour toutes les simulations en PWS, la valeur de Z_a post-traitée est égale à 132 µm. Cette valeur peut paraître trop grande puisque la hauteur du motif simplifié z_p a été estimée à environ 110 µm. Cet écart peut s'expliquer par deux facteurs différents qui se cumulent. Premièrement, z_p a été défini pour la hauteur moyenne des lignes de crête à partir de mesures topographiques et donc les hauteurs locales peuvent dépasser la valeur de z_p. Deuxièmement, le pas d'espace de discrétisation Δx est égal à 12 µm. Avec cette résolution, la valeur la plus proche possible pour décrire z_p est de 108 µm, soit $9 \cdot \Delta x$ LU. Localement, avec un sommet plus haut et un fond de texture plus bas que la moyenne, Z_a peut facilement passer de 108 µm à 132 µm, soit $(9 + 2) \cdot \Delta x$ LU.

5.2 Mouillabilité numérique de surfaces modèles

Dans un premier temps, les simulations sont utilisées pour caractériser les propriétés de mouillabilité pour des surfaces modèles qui pourront donc être comparées aisément aux modèles théoriques. Dans le même temps, l'étude du comportement durant l'étalement, plus spécifiquement les phénomènes d'accroche et de décrochage de la ligne triple sur les textures sont étudiés. Enfin, des simulations d'inclinaison sont réalisées pour étudier numériquement l'impact des paramètres géométriques des surfaces modèles sur le décrochage de la goutte.

5.2.1 Motifs, réseaux et chimies des surfaces modèles

Dans le cadre de cette étude, il est proposé de travailler avec deux types de motifs. Une partie des surfaces modèles est constituée de surfaces avec des bandes de texturations, quant aux autres surfaces, elles sont composées d'un réseau ordonné de plots carrés, comme illustré dans la figure 5.12. Quel que soit le type de motif (bandes ou plots carrés), il est possible d'envisager une texturation topographique ou chimique de la surface.

Pour les deux types de surfaces, il est possible de décrire géométriquement les surfaces à travers un petit nombre de paramètres, représentés dans la figure 5.12. Dans un premier temps, les surfaces peuvent être définies par la largeur des motifs X_p et l'espacement entre deux motifs consécutifs, noté E_p. Pour cette étude, il a été décidé de fixer la valeur de $X_p = 120$ µm et de faire varier l'espacement E_p entre 120 et 300 µm.

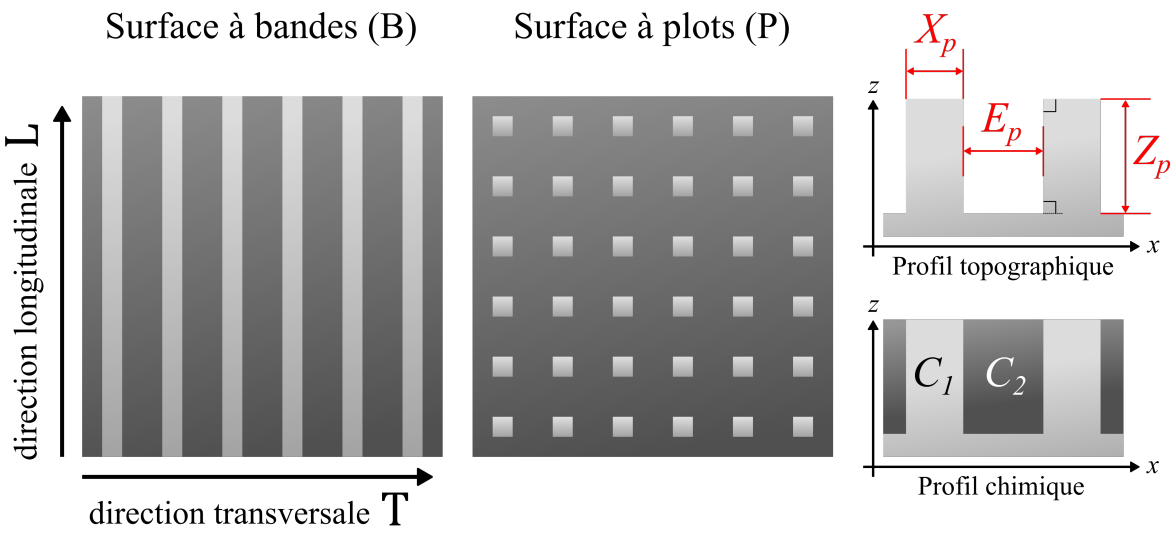

Figure 5.12 : Réprésentation schématique des paramètres géométriques des motifs et des réseaux pour les surfaces modèles testées.

Pour les surfaces à bandes, il est possible de définir deux directions principales. À l'instar de l'étude précédente, la direction transversale correspond à la direction qui coupe perpendiculairement les bandes, alors que la direction longitudinale est définie parallèle aux bandes. En revanche, il est important de préciser pour les surfaces à plots, que le réseau est un réseau carré et donc que les espacements suivant les directions transversale et longitudinale sont identiques.

À partir de cette définition des surfaces modèles, il a été décidé d'étudier trois texturations : deux topographies de surface différentes, ainsi qu'une texturation chimique. En résumé, pour les surfaces modèles testées dans cette étude, la texturation est soit topographique, soit chimique, mais jamais topographique et chimique à la fois.
Dans le cas des texturations topographiques, les espacements entre chaque motif sont creusés d'une profondeur Z_p, pour générer des profils en forme de créneaux avec des pentes de motif égales à 90°. Deux texturations sont étudiées, la première avec $Z_p = 60$ µm et une seconde, avec une profondeur plus importante, où Z_p vaut 120 µm. Pour chacun des cas, il est choisi de simuler le dépôt d'une goutte d'eau sur un matériau hydrophile, ce qui au vu des pentes permet d'assurer un état d'équilibre imprégné. Ici, il a été choisi de simuler des surfaces en polytéréphtalate d'éthylène (PET) dont l'angle intrinsèque θ_Y, utilisé pour les simulations, vaut 76°. Garantir un état imprégné permet de pouvoir étudier l'impact de l'anisotropie des texturations à bandes sur l'anisotropie d'étalement.

Dans le cas de la texturation chimique, le matériau principal C_1 reste le PET, cependant au lieu de creuser l'espacement entre les motifs, la chimie y est changée pour prendre la nouvelle valeur C_2. Pour la texturation topographique, il est attendu que la texturation réduise l'étalement comparativement à une surface plane de PET. Ainsi, pour conserver la même logique, la seconde chimie C_2 doit avoir un angle intrinsèque supérieur à celui du PET. Dans ce but, il a été choisi d'utiliser du PDMS avec $\theta_Y = 112° \gg 76°$.

	Type de motif	Bande	Bande	Bande	Bande	Plot	Plot	Plot	Plot
	E_p [µm]	120	180	240	300	120	180	240	300
r_W	$z_p = 60$ µm	1,5	1,4	1,33	1,29	1,5	1,32	1,22	1,16
	$z_p = 120$ µm	2	1,8	1,67	1,57	2	1,64	1,44	1,33
ϕ	$\theta_{Y,C_1} = 76°$	0,5	0,4	0,33	0,29	0,25	0,16	0,11	0,08
	$\theta_{Y,C_2} = 112°$	0,5	0,6	0,67	0.71	0,75	0,84	0,89	0,92

Tableau 5.3 : Paramètres géometriques en fonction du type de motif et de l'espacement E_p.

Pour pouvoir ensuite comparer les résultats des simulations avec des valeurs théoriques issues des modèles de mouillabilité, il est nécessaire de calculer différents paramètres de surfaces en fonction des motifs. Pour les surfaces modèles texturées topographiquement, il est possible de calculer la rugosité au sens de Wenzel r_W [17]. Au contraire, pour les texturations chimiques, les différentes fractions surfaciques ϕ sont calculées, comme dans le modèle Cassie-Baxter [18].

Les différentes valeurs de r_W et ϕ en fonction de la surface modèle sont regroupées dans le tableau 5.3. De manière cohérente, les valeurs de r_W diminues avec l'augmentation de l'espacement E_p. Logiquement, avec l'augmentation de l'espacement, les fractions surfaciques pour C_2 augmentent et les fractions surfaciques associées à C_1 diminuent.

5.2.2 Goutte en équilibre statique

Pour ces simulations de dépôt de goutte sur les surfaces modèles, chaque système est discrétisé dans un lattice de 375×375 LU de coté pour la base, avec une hauteur de 200 LU. De plus, la goutte est initialisée avec une forme sphérique de rayon 60 LU et avec un volume de 3 µL, soit un nombre de Bond d'environ 0,1. Ainsi, un pas d'espace numérique Δx vaut 15 µm dans le système physique. Avec une telle discrétisation, les motifs d'épaisseur $X_p = 120$ µm sont définis en 8 LU, ce qui permet d'avoir deux interfaces liquide-gaz sur un seul motif, dont pour rappel l'épaisseur est de 3 LU. Une meilleure résolution serait préférable, mais en raison de la limite de mémoire de calcul disponible, cette discrétisation est le meilleur compromis entre le nombre de motifs sous la goutte et la résolution des motifs en nombre de nœuds.
De plus, pour atteindre l'état d'équilibre avant la fin de la simulation, le nombre d'itération total est fixé à 30 000 pour les simulations en quasi-statique des gouttes.

Pour la suite les différentes surfaces sont nommées suivant une désignation spécifique définie par : le type de motifs, l'espacement, la texturation. Pour limiter le nombre de caractères utilisés pour désigner les surfaces, les dimensions géométriques sont exprimées dans les unités du lattice (LU). Par exemple, pour une surface à bandes, avec un espacement de 120 µm (8 LU) et une texturation topographique avec une profondeur de 120 µm (8 LU), alors la surface est désigné B-8-8. Autrement, dans le cas d'une surface à plots, avec un espacement de 300 µm (20 LU) et une texturation chimique, la surface est nommée P-20-C.

5.2.2.1 Comportement statique sur les textures topographiques

Cette partie est consacrée aux simulations de gouttes sessiles sur les surfaces texturées topographiquement. Ces simulations sont utilisées pour comprendre, par une approche numérique, l'impact du type de motifs et de l'espacement sur l'équilibre statique de la goutte et le contact liquide-solide.

Dans un premier temps, il est possible d'observer l'ensemble des résultats des simulations à travers une visualisation vue de dessus des états d'équilibre pour les différentes surfaces modèles. Les vues de dessus sont observables sur la figure 5.13. En fonction du type de motifs, deux comportements très différents sont observés.

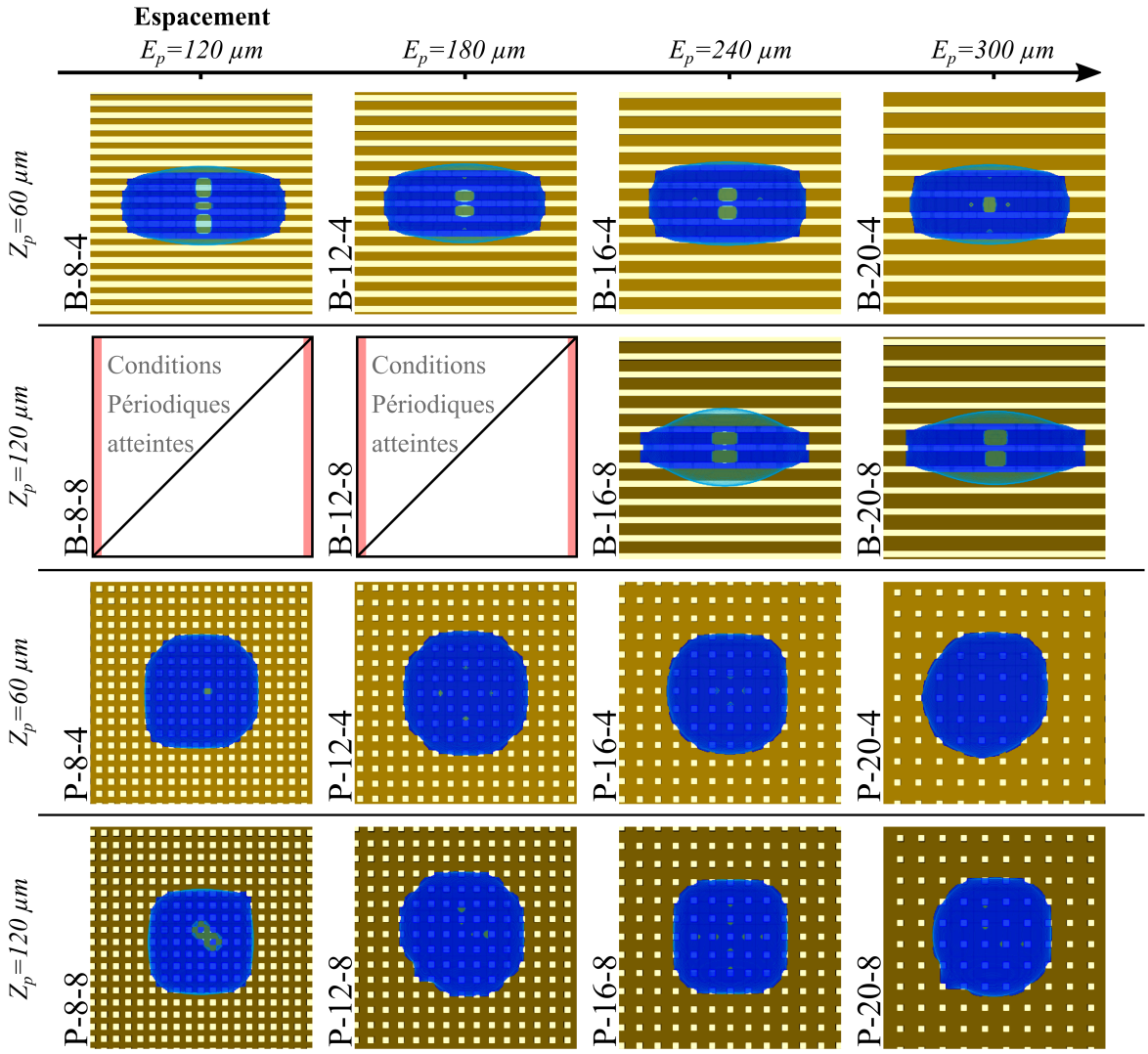

Figure 5.13 : Vue de dessus de l'état d'équilibre des gouttes sur les surfaces modèles texturées topographiquement.

Pour les surfaces modèles à bandes, comme attendu, il existe une forte anisotropie d'étalement induite par la texturation. En effet, l'étalement de la goutte est favorisé dans la direction longitudinale, alors les bandes limitent l'étalement transversal. Dans le cas des surfaces texturées avec $Z_p = 60$ µm, les gouttes ont environ le même étalement transversal et longitudinal quel que soit l'espacement E_p. En comparant avec les surfaces texturées avec $Z_p = 120$ µm, il est possible

de constater que dans cette seconde configuration les gouttes ont un comportement d'étalement dont l'anisotropie est encore supérieure. A telle point qu'avec $Z_p = 120$ µm, si l'espacement $E_p \leq 180$ µm, alors la goutte franchit les conditions périodiques dans la direction longitudinale, rendant impossible l'analyse quantitative des surfaces B-8-8 et B-12-8. Cependant, en plus du comportement fortement anisotrope de la goutte, pour l'ensemble des surfaces à bandes, des bulles d'air piégées sous la goutte sont présentes dans les rainures.

Au contraire, pour les surfaces modèles à plots, les vues de dessus dans la figure 5.13, permettent de constater que l'étalement de la goutte est identique dans les directions longitudinales et transversales. Cependant, le comportement dans les diagonales du réseau carré diffère, donnant une goutte en équilibre sous une forme déformée qui tend vers la forme carrée avec un étalement supérieur dans les diagonales. En revanche, les gouttes ne sont pas parfaitement carrées, comme attendues. En effet, elles arborent de légères asymétries. Les différents espacements étant définis suivant des nombres pairs, à l'initialisation la goutte n'est jamais parfaitement positionnée de manière symétrique par rapport aux motifs. Il est donc cohérent de supposer que l'asymétrie de l'état d'équilibre en fin de simulations est principalement due à l'asymétrie initiale. Enfin, contrairement aux surfaces à bandes, hormis quelques exceptions, aucune grosse bulle d'air n'est piégée sous la goutte.

Cette opposition de comportement entre l'anisotropie d'étalement pour les surfaces à bandes et les surfaces à plots est également visualisable grâce aux représentations 3D des états d'équilibre, comme l'illustre la figure 5.14 pour les surfaces B-16-8 et P-16-8.

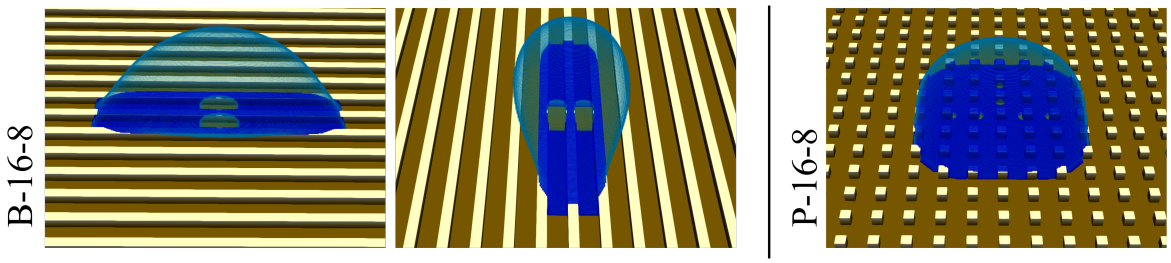

Figure 5.14 : Visualisation 3D de l'état d'équilibre des simulations pour les surfaces B-16-8 et P-16-8.

Afin d'analyser les résultats, il est possible de comparer le comportement de mouillabilité des surfaces modèles en mesurant l'angle de contact macroscopique suivant les différentes directions. En outre, pour les surfaces topographiquement texturées, les angles de contact résultant des simulations sont également analysés par rapport aux valeurs d'angle de contact prédites par le modèle de Wenzel θ_W [17]. Pour rappel, θ_W est calculé tel que : $\cos\theta_W = r_W \cdot \cos\theta_Y$. Les valeurs de θ_W sont déterminées à partir des valeurs de r_W regroupées dans le tableau 5.3.
Le tableau 5.4 et la figure 5.15 regroupent les angles de contact post-traités numériquement suivant la direction transversale θ_T et longitudinale θ_L, avec $Z_p = 60$ µm. De plus, pour comparer efficacement les différentes valeurs d'angle de contact entre les deux types de configurations, il est possible d'ajouter en indice la lettre B (pour les bandes) ou P (pour les plots carrés). Par exemple, $\theta_{T,B}$ correspond à un angle de contact mesuré dans la direction transversale pour une surface modèle composée de bandes texturées.

Surface	B-8-4	B-12-4	B-16-4	B-20-4	P-8-4	P-12-4	P-16-4	P-20-4
θ_T [°]	122	123	109	119	87	75	77	68
θ_L [°]	67	70	71	69	86	75	79	69
θ_W [°]	69	70	71	72	69	71	73	74

Tableau 5.4 : Valeurs d'angles de contact numériques et théoriques en fonction des paramètres de la surface modèle, pour une texturation topographique avec $Z_p = 60$ µm.

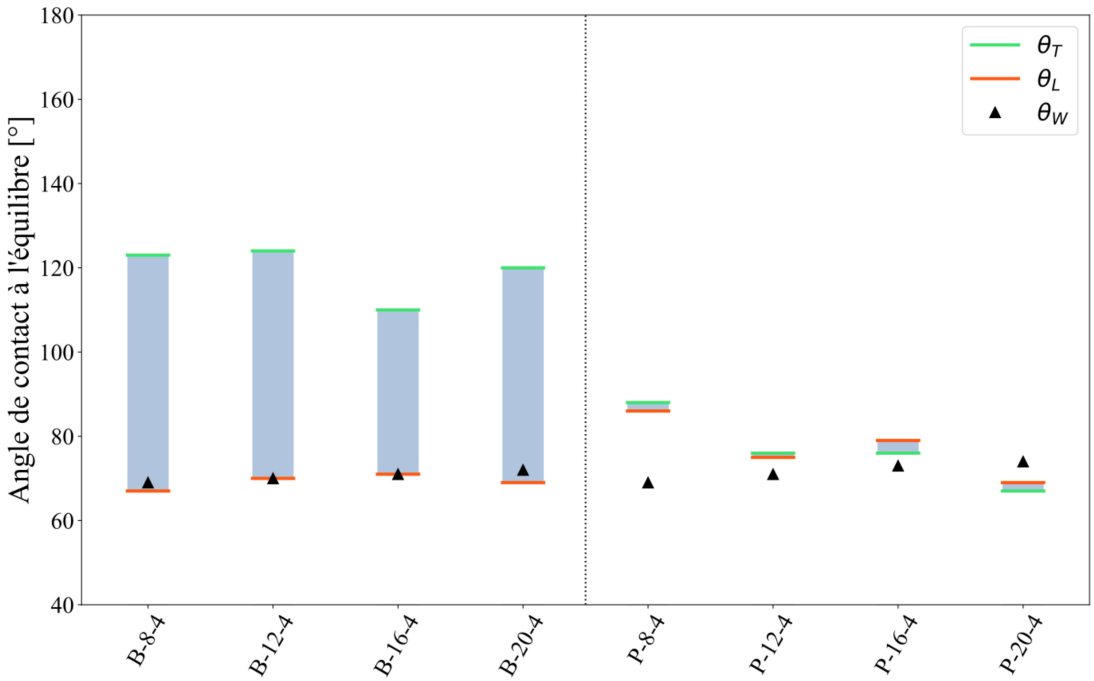

Figure 5.15 : Représentation graphique des angles de contact à l'équilibre pour les surfaces modèles texturées topographiquement avec $Z_p = 60$ µm. (issue du tableau 5.4)

Premièrement, concernant les résultats, il est possible de confirmer, pour les surfaces à bandes, que la texturation induit une forte anisotropie du comportement de mouillabilité, avec $\theta_T \gg \theta_L$. À l'inverse, pour les surfaces à plots, les angles de contact suivant les deux directions sont environ égaux. En comparant les angles de contacts suivant la direction transversale entre les deux types de surface, pour le même espacement, il est possible de montrer que $\theta_{T,B}$ est largement supérieur à $\theta_{T,P}$, avec respectivement $122° > 87°$, $123° > 75°$, $109° > 77°$ et $119° > 68°$. Dans la direction longitudinale, c'est l'inverse avec $\theta_{L,B} \leq \theta_{L,P}$.
Toujours d'après les résultats présents dans le tableau 5.4, les angles de contact macroscopiques n'évoluent pas significativement en fonction de l'espacement. Or, les valeurs de θ_W dépendent de E_p, ce qui explique la différence avec les valeurs obtenues par les simulations. Cependant, les valeurs de θ_W sont pourtant proches des valeurs d'angle de contact dans la direction longitudinale pour les surfaces à bandes $\theta_{L,B}$. Cette correspondance est fortuite, car le fond des rainures est parfaitement plat et donc $\theta_{L,B}$ devrait plutôt valoir environ $\theta_Y = 76°$. Mais, en raison de la forme des texturations, les angles dans la direction transversale sont post-traités aux sommets des bandes, ce qui a pour cause de diminuer les valeurs de $\theta_{L,B}$ par rapport à θ_Y.

Surface	B-8-8	B-12-8	B-16-8	B-20-8	P-8-8	P-12-8	P-16-8	P-20-8
θ_T [°]	-	-	152	142	98	72	82	79
θ_L [°]	-	-	60	61	98	71	82	81
θ_W [°]	61	64	66	68	61	67	70	71

Tableau 5.5 : Valeurs d'angles de contact numériques et théoriques en fonction des paramètres de la surface modèle, pour une texturation topographique avec $Z_p = 120$ µm.

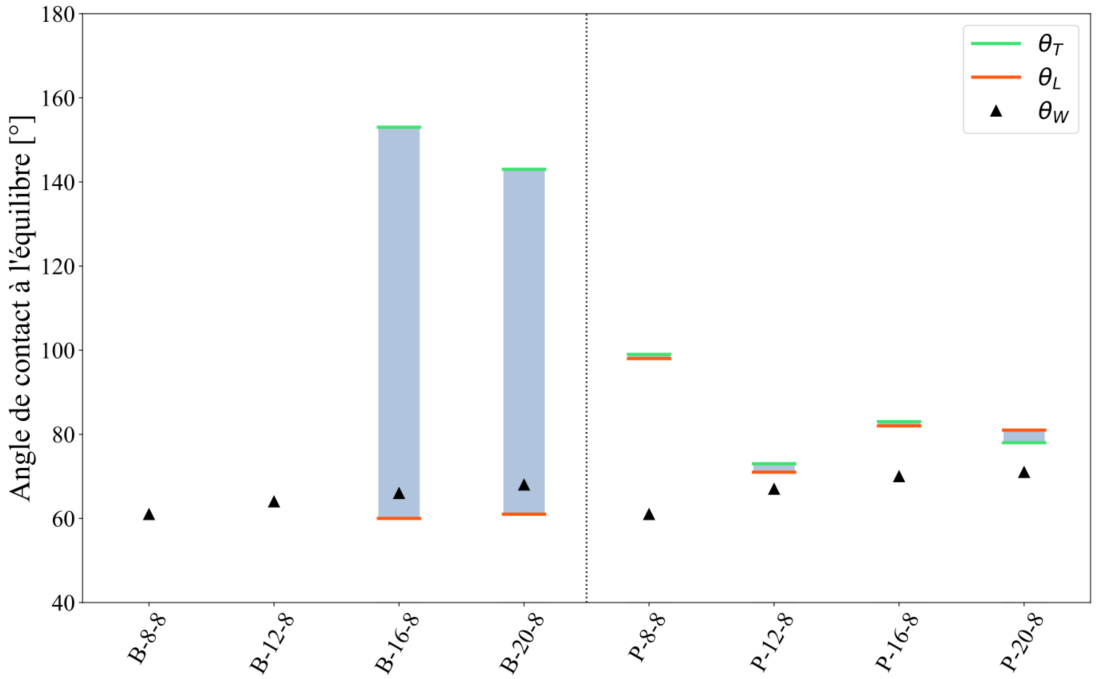

Figure 5.16 : Représentation graphique des angles de contact à l'équilibre pour les surfaces modèles texturées topographiquement avec $Z_p = 120$ µm. (issue du tableau 5.5)

De la même façon, le tableau 5.5 et la figure 5.16 présentent l'ensemble des angles de contact post-traités pour les surfaces modèles avec $Z_p = 120$ µm. De manière générale, il est possible d'observer les mêmes comportements qu'avec $Z_p = 60$ µm, mais avec des valeurs plus prononcées. En effet, pour les surfaces à bandes, l'anisotropie d'étalement est bien plus importante avec $\theta_{T,B} > 140°$ et $\theta_{W,B} \approx 60°$. Pour les surfaces à plots, en moyenne, les angles de contact mesurés sont supérieurs à ceux calculés pour $Z_p = 60$ µm. De plus, les valeurs numériques sont toujours très différentes des valeurs théoriques calculées avec le modèle de Wenzel.

Enfin, dans le but de comprendre la présence de bulles d'air sous la goutte, pour les surfaces à bandes, il est possible d'observer l'évolution du contact liquide-solide durant l'étalement, jusqu'à atteindre l'équilibre. Pour illustrer les mécanismes mis en évidence durant cette étude, il a été choisi de se concentrer sur le cas de la surface B-8-4, dont l'historique d'étalement est illustré dans la figure 5.17. Comme le montrent les vues de dessus, l'état d'équilibre est le résultat de la compétition entre l'étalement transversal, l'étalement longitudinal et l'imprégnation des textures.

Il est possible de décrire l'étalement suivant différentes étapes :

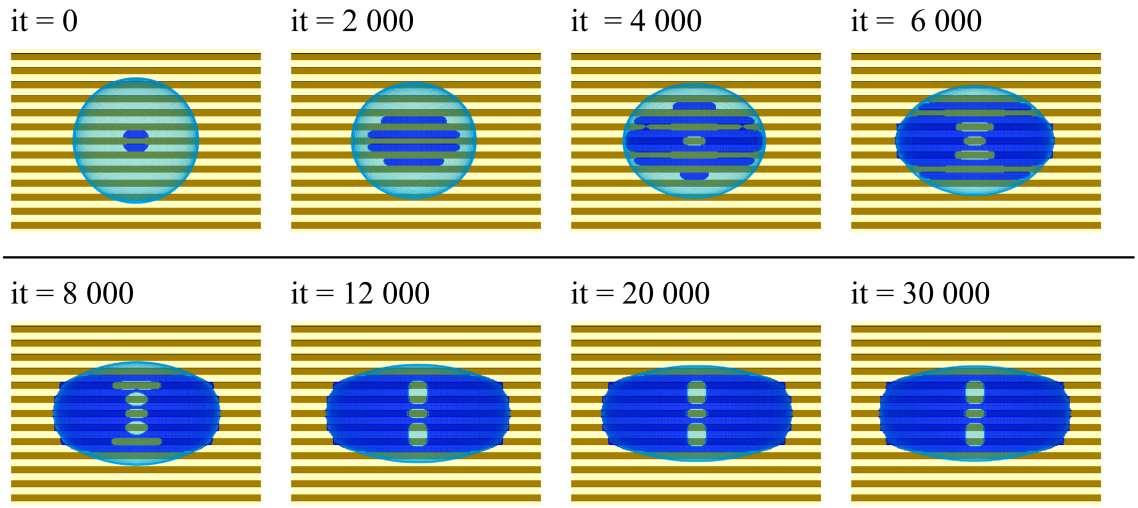

Figure 5.17 : Historique d'étalement de la goutte vue de dessus pour la surface B-8-4, montrant l'évolution du contact liquide-solide jusqu'à l'état d'équilibre.

- Dans un premier temps, la goutte s'étale en surface suivant les deux directions, avec un étalement favorisé dans la direction longitudinale.
- Dans un second temps, la goutte commence à imprégner les textures situées sous la goutte. Cette imprégnation semble avoir lieu en bordure de la goutte, vers les lignes triples externes. De plus, ce phénomène d'imprégnation en parallèle de l'étalement piège de grandes quantités d'air sous la goutte. Le délai entre le début de l'étalement et de l'imprégnation est supposé être dû à l'angle à l'amorce de la cavité ; pour ces surfaces cet angle vaut 90°. Pour rappel, l'angle à l'amorce de la cavité correspond à l'angle au sommet des plots. Il est également possible de supposer que plus l'angle d'amorce est petit plus le délai entre l'étalement et l'imprégnation est grand, à condition que l'imprégnation soit possible.
- Ensuite, chacune des poches d'air prend la forme d'une bulle d'air centrée au milieu d'une rainure.
- Enfin, l'étalement suivant la direction longitudinale continue jusqu'à atteindre l'équilibre final de la goutte. Comme le montre la figure 5.17, pour la surface B-8-4, l'état d'équilibre est atteint avant la 20 000ième itération.

Ces différentes étapes, dues à la compétition entre l'étalement et l'imprégnation du liquide, sont généralisables à l'ensemble des surfaces à bandes avec une texturation topographique réalisée durant cette étude.

5.2.2.2 Comportement statique sur les textures chimiques

En suivant la même démarche mise en œuvre dans la section précédente (Section 5.2.2.1), le comportement des gouttes en équilibre statique, pour les surfaces modèles texturées chimiquement, est également étudié en fonction du type de motifs et de l'espacement.

Premièrement, il est possible d'observer qualitativement la forme des gouttes à l'équilibre. Les vues de dessus des états équilibres sur les différentes surfaces sont présentées dans la figure 5.18.
D'après la figure 5.18, pour les surfaces à bandes, les gouttes à l'état d'équilibre montrent une très faible anisotropie. Cette observation est surprenante au vu de la nature extrêmement anisotrope des motifs à bandes. De plus, pour les surfaces avec les espacements E_p les plus importants, soit B-16-C et B-20-C, il semble que l'étalement transversal à l'équilibre soit légèrement plus important que dans la direction longitudinale.

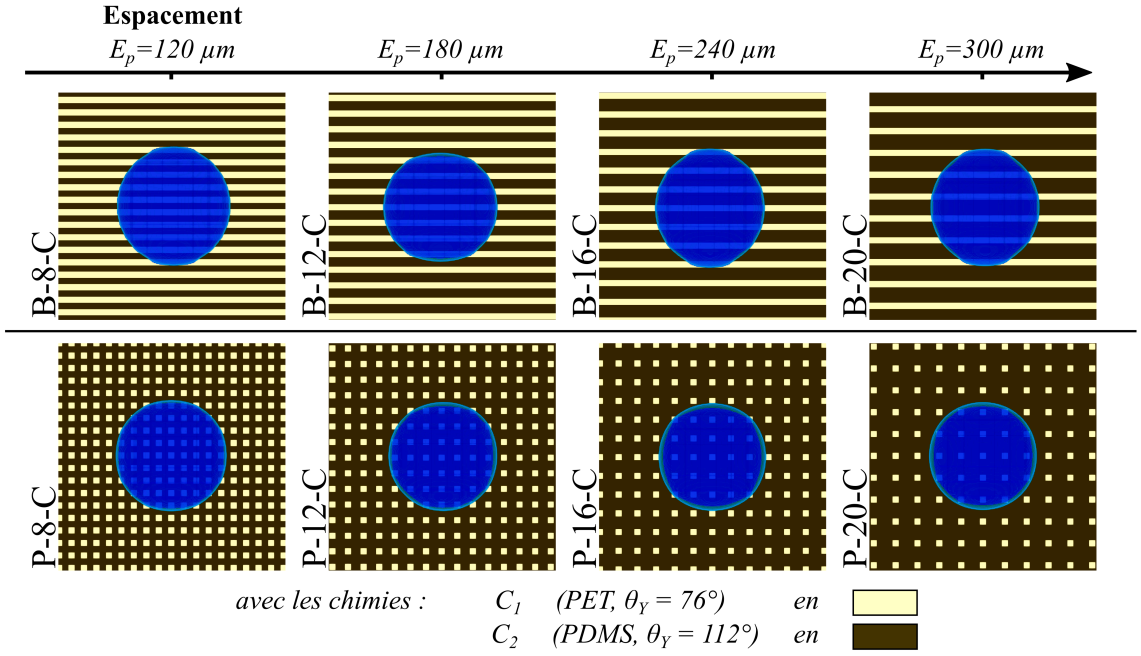

Figure 5.18 : Vue de dessus de l'état d'équilibre des gouttes sur les surfaces modèles texturées chimiquement.

D'un autre côté, pour les surfaces modèles à plots, les vues de dessus montrent des gouttes très peu déformées avec un contact liquide-solide de forme presque parfaitement circulaire. En observant attentivement l'étalement suivant les diagonales du réseau carré de plots, il est possible de constater que l'étalement y est légèrement supérieur, notamment pour les espacements les plus importants. Le comportement quasi-isotrope des gouttes pour les surfaces modèles texturées chimiquement peut également être aisément constaté avec les visualisations 3D de l'état d'équilibre, comme le montre la figure 5.19.

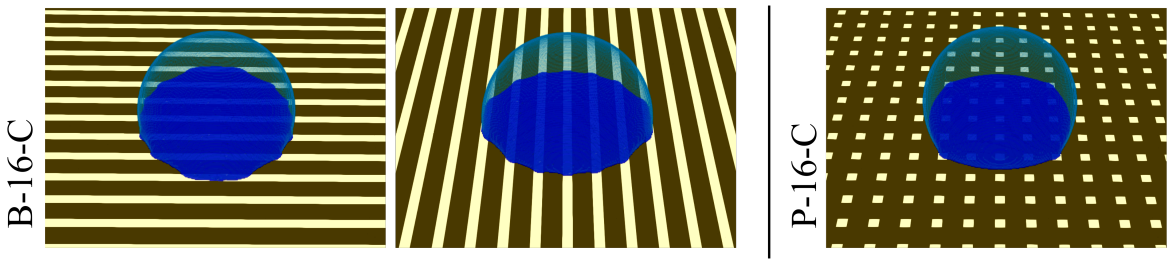

Figure 5.19 : Visualisation 3D de l'état d'équilibre des simulations pour les surfaces B-16-C et P-16-C.

Dans un deuxième temps, les angles de contact macroscopiques post-traités sont comparés en fonction de la surface modèle et des directions principales d'étalement. L'ensemble des angles de contact obtenus par les simulations pour les surfaces texturées chimiquement est regroupé dans le tableau 5.6 et la figure 5.20.

Surface	B-8-C	B-12-C	B-16-C	B-20-C	P-8-C	P-12-C	P-16-C	P-20-C
θ_T [°]	90	105	90	94	101	105	108	110
θ_L [°]	91	91	92	90	100	105	109	108
θ_{CB} [°]	94	97	100	101	103	106	108	109

Tableau 5.6 : Valeurs d'angles de contact numériques et théoriques en fonction des paramètres de la surface modèle, pour une texturation chimique en PDMS.

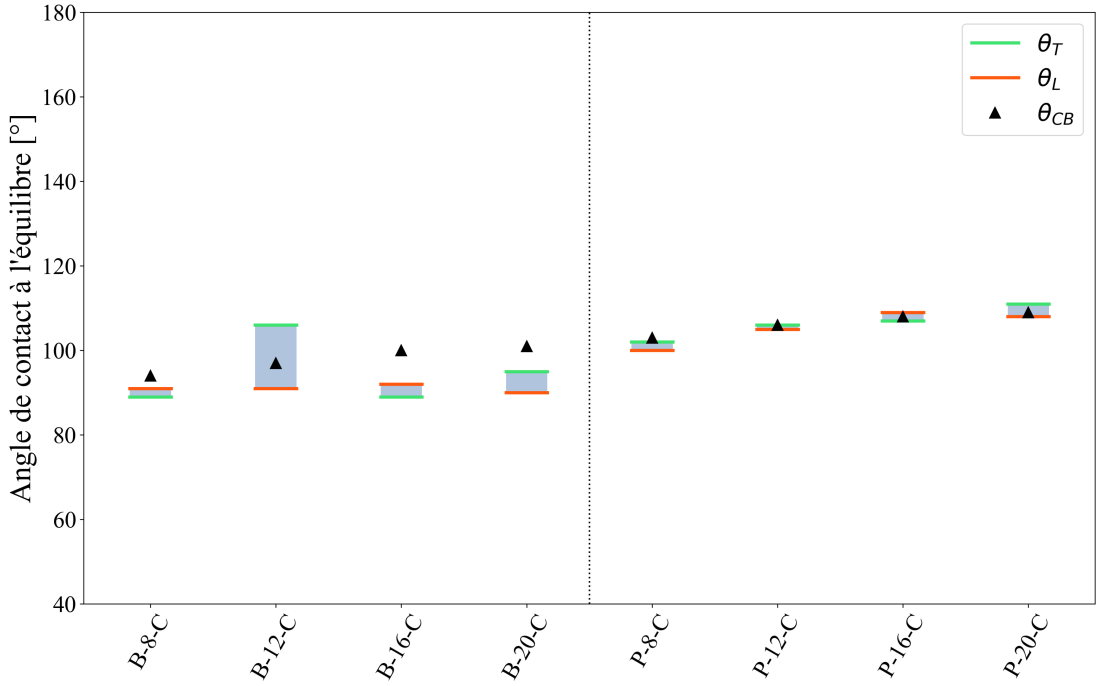

Figure 5.20 : Représentation graphique des angles de contact à l'équilibre pour les surfaces modèles texturées chimiquement. (issue du tableau 5.6)

En ce référent aux valeurs d'angle post-traités, l'absence d'anisotropie du comportement de mouillabilité est confirmée pour l'état d'équilibre des surfaces à bandes. En effet, hormis pour le cas B-12-C où $\theta_T = 105° > \theta_L = 91°$, les angles dans les deux directions sont environs égaux. De manière similaire, aucune anisotropie du comportement de mouillabilité entre les directions transversale et longitudinale n'est observée pour les surfaces à plots. De plus, en comparant les valeurs d'angle de contact entre les deux types de motifs, il est possible de constater que les angles pour les surfaces à plots sont toujours supérieurs aux valeurs des angles pour les surfaces à bandes. Ceci peut s'expliquer par le fait que la fraction surfacique de PDMS est toujours supérieure, avec un même espacement, pour les surfaces à plots.

Pour compléter cette analyse, il est possible de comparer les valeurs d'angle post-traitées avec les valeurs théoriques du modèle de Cassie-Baxter θ_{CB}, directement calculées par une loi des mélanges entre les deux chimies et leurs fractions surfaciques. Dans le cas des surfaces à plots, où la dynamique d'étalement est relativement homogène suivant toutes les directions, les angles issus des simulations numériques sont environs égaux aux angles théoriques. Cependant, pour les surfaces à bandes, il existe une différence d'environ 5°.

Enfin, dans le but de comprendre l'absence d'anisotropie d'étalement de l'état d'équilibre pour les surfaces à bandes texturées chimiquement, il est crucial de s'intéresser à l'évolution du contact liquide-solide durant l'étalement. Pour illustrer la dynamique de l'étalement pour ces configurations, il est possible de prendre en exemple le cas de la surface B-8-C, dont l'historique d'étalement vu de dessus est présenté dans la figure 5.21. Contrairement aux surfaces texturées topographiquement, où l'imprégnation joue également un rôle important, pour les texturations chimiques, l'état d'équilibre est uniquement le résultat de la compétition entre l'étalement suivant les différentes directions. Dans l'exemple de la surface B-8-C, plusieurs étapes peuvent être différenciées :

- Dans un premier temps, la goutte s'étale en surface suivant les deux directions, avec un étalement quasi-isotrope.
- Dans un second temps, la goutte s'ancre sur une bande hydrophobe dans la direction transversale.
- Une fois l'étalement transversal fixé, la goutte continue de s'étaler dans la direction longitudinale, jusqu'à atteindre un maximum.
- Enfin, sous l'effet de l'élasticité de la ligne triple, l'étalement oscille en diminuant puis en augmentant la taille du contact liquide-solide suivant la direction longitudinale. Pour finir, la goutte se stabilise à une position intermédiaire inférieure à l'étalement maximal. Comme le montre la figure 5.21, pour la surface B-8-C, l'oscillation de la ligne triple suivant la direction longitudinale se produit dès la 6 000ième itération, mais la goutte atteint son état d'équilibre final uniquement après la 12 000ième itération.

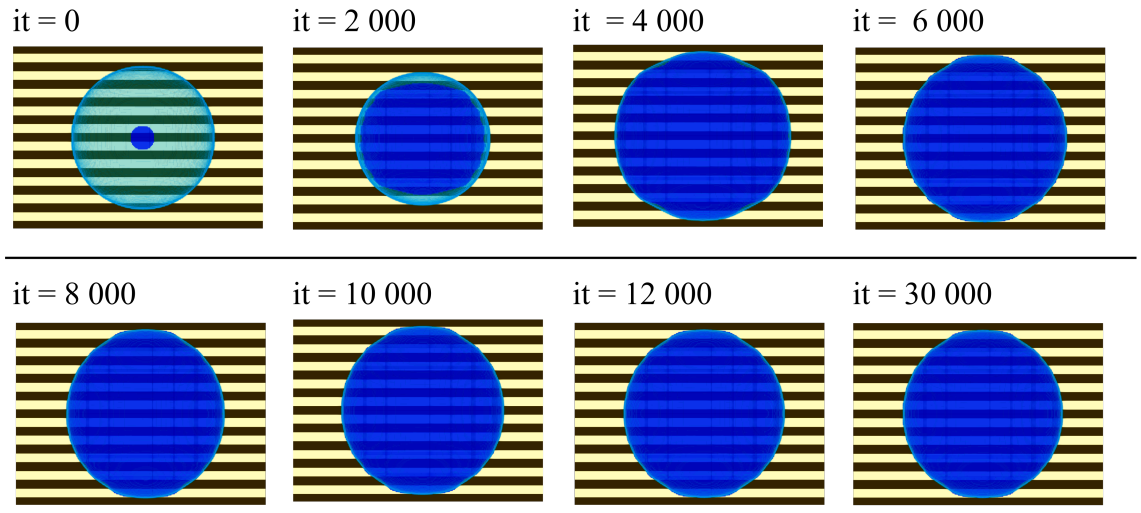

Figure 5.21 : Historique d'étalement de la goutte vue de dessus pour la surface B-8-C, montrant l'évolution du contact liquide-solide jusqu'à l'état d'équilibre.

Ces différentes étapes, dues à la compétition entre l'étalement transversal et longitudinal, sont généralisables à l'ensemble des surfaces à bandes avec une texturation chimique réalisée durant cette étude.

En ce qui concerne ces différentes étapes, l'observation d'un étalement quasi-isotrope est inattendue. Cela implique qu'en moyenne, la vitesse de la triple ligne est similaire dans les deux directions, mais en raison de la texturation par bandes, il est évident que la triple ligne ne se comporte pas de la même manière durant l'étalement. Dans la direction transversale, le front d'avancement de la triple ligne subit une alternance d'accélération et de décélération, en fonction de la chimie de la bande. Dans le sens longitudinal, en revanche, le front d'avancement de la triple ligne est en contact avec les deux chimies en même temps, durant l'ensemble de l'étalement.

Néanmoins, cette différence majeure dans la dynamique d'étalement a un impact important sur l'état d'équilibre final. En pratique, lorsqu'une goutte est déposée sur une surface, la dynamique d'étalement implique un dépassement de l'état d'équilibre, ce qui entraîne une phase d'oscillation de la goutte autour de sa position d'équilibre. Cependant, dans le cas de surfaces modèles avec des bandes de chimies différentes, le phénomène d'ancrage de la triple ligne à la jonction entre une bande hydrophile et une bande hydrophobe empêche la goutte de se résorber dans la direction transversale. Ainsi, avant d'atteindre l'équilibre, la goutte n'oscille que dans la direction longitudinale, où le front d'avancement de la triple ligne se situe simultanément sur les bandes hydrophiles et hydrophobes. Cela explique pourquoi, malgré la géométrie anisotrope des motifs, la goutte s'équilibre dans un état de mouillage quasi-isotrope.

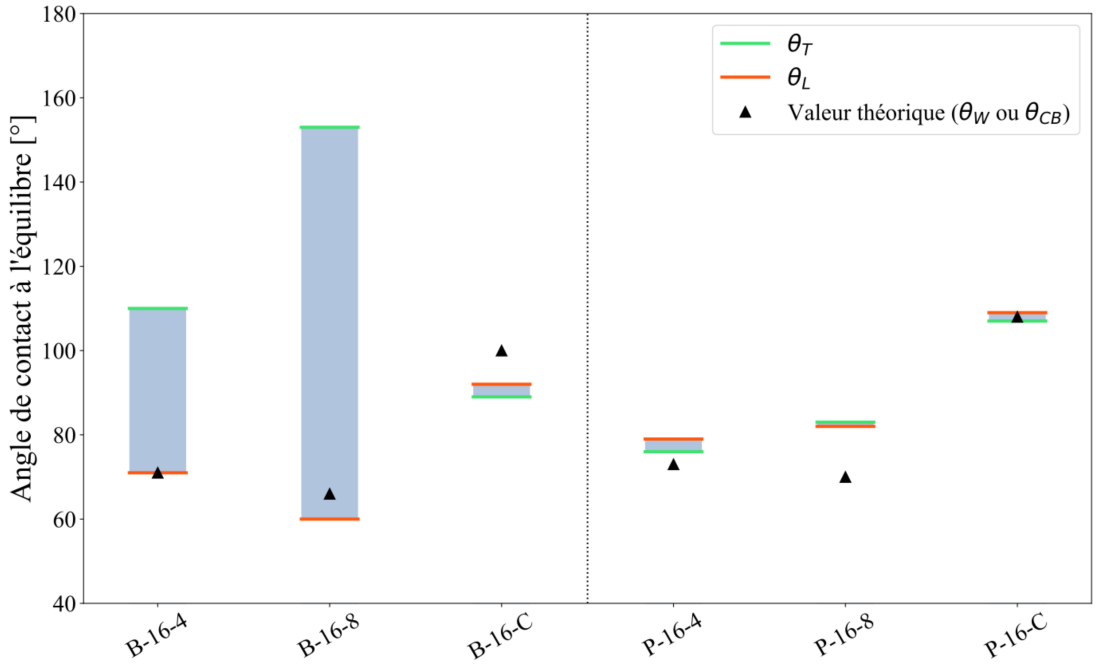

Figure 5.22 : Représentation des angles de contact à l'équilibre dans la direction transversale et longitudinale en fonction du type de surface modèle.

D'autre part, il est possible de comparer ces résultats pour les surfaces chimiques avec le comportement observé pour les surfaces topographiquement texturées (Section 5.2.2.1). Contrairement aux résultats obtenus pour la texturation topographique, la position de la ligne triple est sujette à des ossilations importantes avant d'atteindre l'équilibre. La principale différence entre les configurations étant la capacité du liquide à imprégner la surface selon l'axe z pour la texturation topographique, il est possible de supposer qu'une fois les textures franchies selon x ou y, l'imprégnation limite les déplacements de la triple ligne. Par extension, il est possible de supposer que plus la profondeur de texturation est importante, plus l'ancrage est important. Ainsi, cette hypothèse sera à vérifier en comparant les valeurs d'angle d'avancée et de reculée en fonction de la profondeur. Pour valider l'hypothèse il faudra que les angles de décrochage soit supérieurs quand la profondeur est la plus grande. Pour répondre à ce postulat, la section suivante est consacrée aux tests d'inclinaison sur des surfaces modèles.

Enfin, pour l'ensemble des surfaces modèles, texturées topographiquement ou chimiquement, aucun impact significatif de l'espacement E_p n'a été observé sur le comportement à l'équilibre. Ainsi, il est possible de regrouper l'ensemble des comportements observés et présentés précédemment en fonction du type de textures, comme illustré dans pa figure 5.22 à travers les résultats pour $E_p = 16$ LU, soit 240 µm. Cette représentation graphique permet également de mettre en avant les comportements fortement anisotropes observés uniquement pour les surfaces à bandes texturées topographiquement tout en montrant l'augmentation de l'anisotropie en lien avec l'augmentation de la profondeur.

5.2.3 Décrochement dynamique par inclinaison

Une fois l'état d'équilibre étudié pour les différentes surfaces modèles, il est possible d'étudier les phénomènes de décrochage des gouttes sessiles, lors d'une inclinaison, en fonction des paramètres géométriques des surfaces modèles. Les simulations sont réalisées en utilisant les états d'équilibre atteints à l'itération 30 000, comme état initial avant inclinaison. À partir des états d'équilibre, la surface est inclinée suivant une direction, à une vitesse d'inclinaison de 0,001 degré par itération, soit une mise à jour de l'orientation de la gravité de 2° toutes les 2 000 itérations. Pour atteindre une inclinaison de 90°, les simulations sont exécutées sur 90 000 itérations, soit jusqu'à la 120 000ième itération en comptant les 30 000 itérations nécessaires pour obtenir l'état d'équilibre.

Pour les surfaces à plots, l'inclinaison est réalisée suivant la direction transversale. En revanche, pour les surfaces à bandes, les comportements étant très dépendants de la direction étudiée, il est attendu que les inclinaisons dans la direction transversale et longitudinale donnent des résultats extrêmement différents. Pour ces surfaces, il a donc été décidé de réaliser deux inclinaisons, une suivant la direction transversale désignée par B_T et l'autre dans la direction longitudinale, notée B_L.

Pour chacune des simulations d'inclinaison réalisée, la vitesse de la ligne triple suivant la direction de l'inclinaison est post-traitée. Quand la ligne triple décroche, la vitesse cesse d'être nulle et il est possible de déterminer à quelle itération le décrochage a lieu. À partir de l'itération, il est également possible de remonter à l'angle d'inclinaison de la surface α pour laquelle la ligne triple décroche. De plus, la vitesse de la ligne triple à l'amont et à l'aval de l'inclinaison est calculée indépendamment, ce qui permet d'observer quelle ligne triple décroche en premier.

Enfin, pour les itérations où les lignes triples décrochent, l'angle d'avancée θ_a et l'angle de reculée θ_r sont mesurés, permettant de déterminer l'hystérèse d'angle de contact $\Delta\theta = |\theta_a - \theta_r|$. Cependant, il est possible qu'une seule des deux lignes triples, voire qu'aucune ne décroche durant l'inclinaison. S'il n'existe pas de décrochage dans une simulation, l'angle à l'amont et l'angle à l'aval de la goutte sont mesurés pour l'inclinaison maximale $\alpha = 90°$. Pour l'ensemble des résultats présentés par la suite, l'angle à l'amont est noté θ_{Am} et l'angle à l'aval est noté θ_{Av}. Deplus, dans ces cas sans décrochage, l'hystérèse d'angle de contact $\Delta\theta$ ne peut pas être calculée.

5.2.3.1 Comportement dynamique sur les textures topographiques

Cette partie est dédiée aux résultats des simulations d'inclinaison pour les surfaces modèles texturées topographiquement. L'objectif est de montrer la différence de comportement en fonction de la direction d'inclinaison, le type de motifs et l'espacement des motifs.

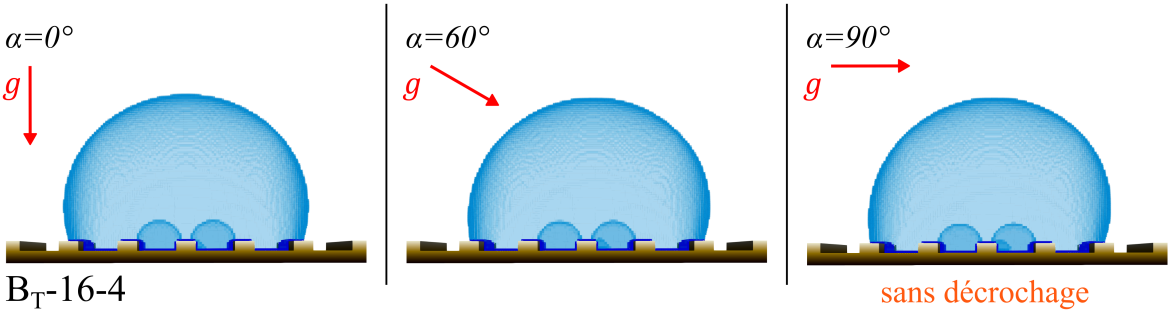

Figure 5.23 : Visualisation de la déformation de la goutte durant l'inclinaison dans le cas de la simulation B_T-16-4, où la goutte ne décroche pas de sa position d'ancrage à l'équilibre.

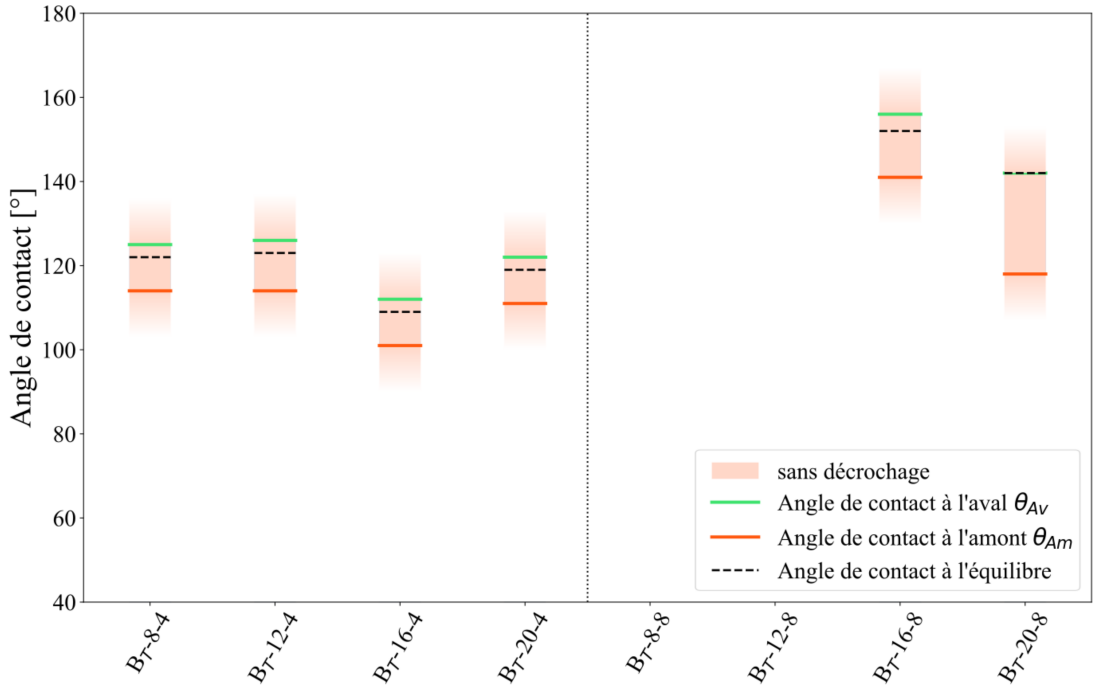

Figure 5.24 : Angles de contact mesurés lors des simulations d'inclinaison transversale pour les surfaces à bandes texturées topographiquement (issue du tableau 5.7).

Surface	B_T-8-4	B_T-12-4	B_T-16-4	B_T-20-4	B_T-8-8	B_T-12-8	B_T-16-8	B_T-20-8
θ_{Av} [°]	125	126	112	122	-	-	156	142
θ_{Am} [°]	114	114	101	111	-	-	141	118
$\Delta\theta$ [°]	-	-	-	-	-	-	-	-
α_a [°]	-	-	-	-	-	-	-	-
α_r [°]	-	-	-	-	-	-	-	-

Tableau 5.7 : Résultats des simulations d'inclinaison pour les surfaces texturées topographiquement avec des bandes, où l'inclinaison est orientée suivant la direction transversale.

Pour commencer, il est possible d'analyser les résultats des simulations d'inclinaison, dans la direction transversale, pour les surfaces à bandes. Le premier résultat à constater est l'absence de décrochage de la goutte durant l'inclinaison quels que soient les paramètres d'espacement ou de profondeur des textures, comme l'illustre la figure 5.23 dans le cas de la simulation B_T-16-4. En effet, comme le montre le tableau 5.7 et la figure 5.24, aucune goutte ne décroche de la surface, quelle que soit la profondeur de la texturation Z_p. De plus, les valeurs des angles à l'aval θ_{Av} sont très proches des valeurs de θ_T obtenues à l'équilibre (Section 5.2.2.1). Cependant, les valeurs de l'angle à l'amont θ_{Am} sont également élevées avec environ 11° de moins que l'état d'équilibre. Ce qui implique que les texturations topographiques limitent fortement la déformation de la goutte.

Au contraire, les résultats présents dans le tableau 5.8 et la figure 5.25 montrent une hystérèse ≤ 1, voir nulle, lorsque l'inclinaison est orientée dans la direction longitudinale pour les surfaces à bandes. Ce résultat était prévisible, de manière analogue aux simulations de validation de l'inclinaison du chapitre précédent (Section 4.4.4), dans le sens longitudinal, il n'existe aucune texturation qui s'oppose au déplacement de la goutte. Il est donc cohérent de retrouver une hystérèse d'angle de contact $\Delta\theta$ nulle. De plus, pour l'ensemble de ces simulations, les lignes triples se déplacent en même temps pour la reculée et l'avancée, dès le début de l'inclinaison, avec $\alpha_a = \alpha_r = 2°$.

Surface	B_L-8-4	B_L-12-4	B_L-16-4	B_L-20-4	B_L-8-8	B_L-12-8	B_L-16-8	B_L-20-8
θ_a [°]	67	70	71	69	-	-	61	62
θ_r [°]	67	70	71	69	-	-	62	62
$\Delta\theta$ [°]	< 1	< 1	< 1	< 1	-	-	1	< 1
α_a [°]	2	2	2	2	-	-	2	2
α_r [°]	2	2	2	2	-	-	2	2

Tableau 5.8 : Résultats des simulations d'inclinaison pour les surfaces texturées topographiquement avec des bandes, où l'inclinaison est orientée suivant la direction longitudinale.

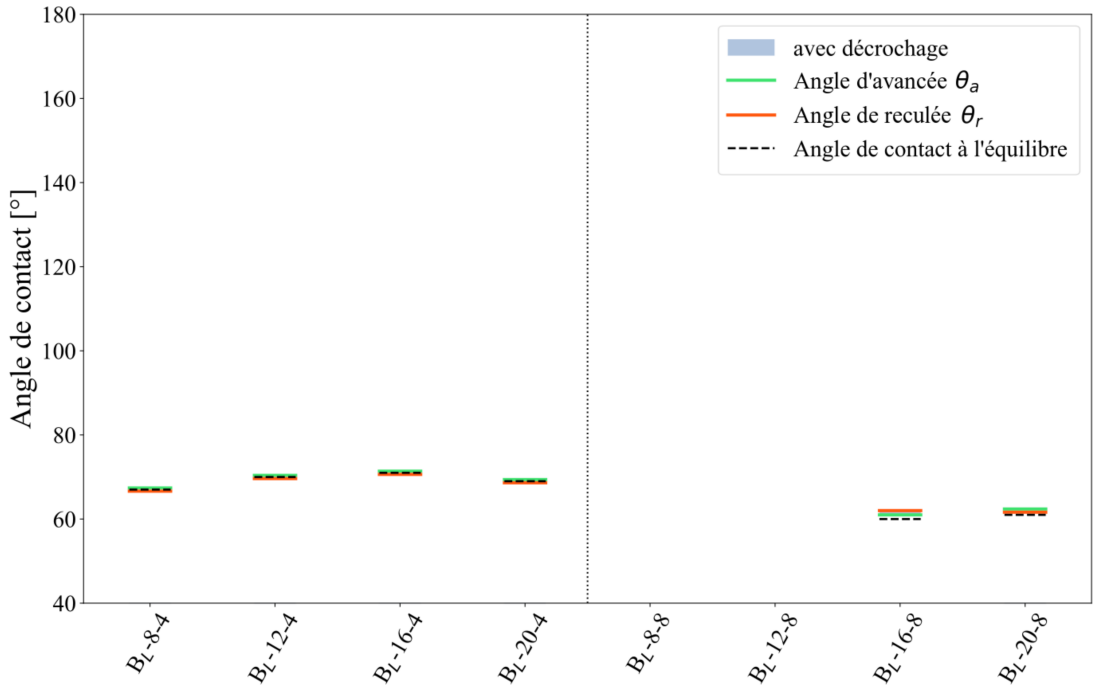

Figure 5.25 : Angles de contact mesurés lors des simulations d'inclinaison longitudinale pour les surfaces à bandes texturées topographiquement (issue du tableau 5.8).

Pour les surfaces à plots, les résultats regroupés dans le tableau 5.9 et la figure 5.26, montrent des tendances similaires aux résultats pour les surfaces à bandes avec une inclinaison dans le sens transversal. En effet, l'ensemble des gouttes reste accroché à la surface. De manière similaire, les angles de contact à l'aval θ_{Av}, sont très proches des valeurs de θ_T à l'équilibre. De plus, dans la majorité des cas, la goutte se déforme très peu, avec des valeurs de θ_{Am} en moyenne, inférieures à l'angle d'équilibre de seulement 12°. Cependant, à la différence des résultats pour les surfaces à bandes, dans certaines simulations, il est possible d'observer un décrochage de la ligne triple à l'amont de la goutte. Il est intéressant de constater que la reculée a lieu uniquement quand la ligne triple est, à l'équilibre, positionnée dans le creux entre deux plots. Dans ce cas de figure, la reculée correspond donc au saut jusqu'au prochain plot. Une fois la ligne triple à l'amont de la goutte ancrée au sommet d'un plot, la ligne triple cesse de se déplacer.

Surface	P-8-4	P-12-4	P-16-4	P-20-4	P-8-8	P-12-8	P-16-8	P-20-8
θ_{Av} [°]	88	78	84	81	101	77	83	84
θ_{Am} / si * θ_r [°]	79	69	75*	45*	88	61	74	76*
$\Delta\theta$ [°]	-	-	-	-	-	-	-	-
α_a [°]	-	-	-	-	-	-	-	-
α_r [°]	-	-	28	74	-	-	-	16

Tableau 5.9 : Résultats des simulations d'inclinaison pour les surfaces texturées topographiquement avec des plots.

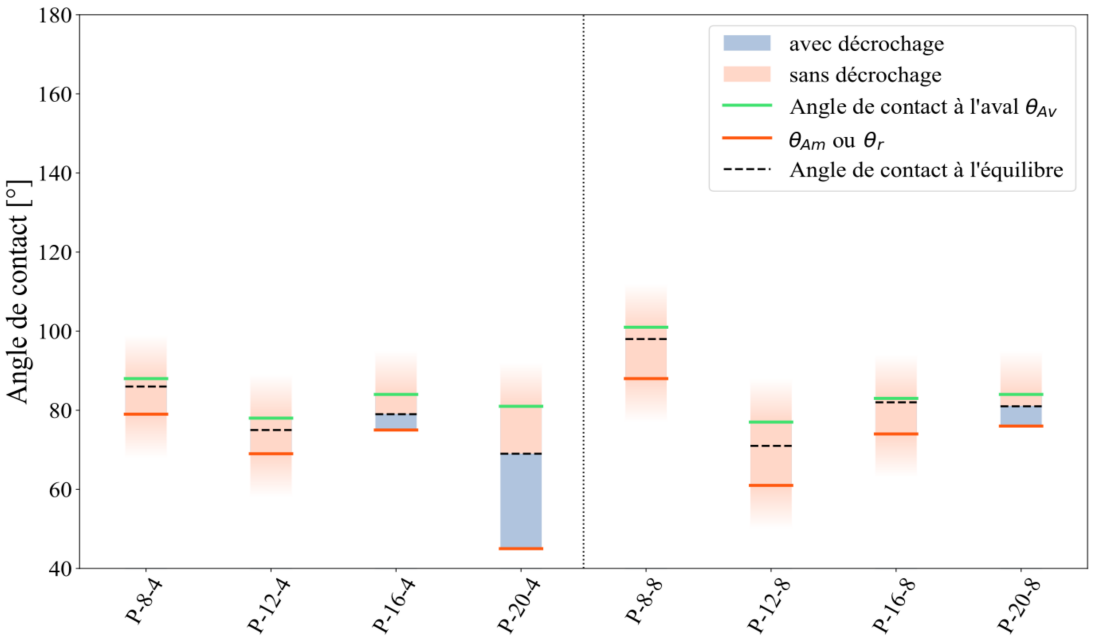

Figure 5.26 : Angles de contact mesurés lors des simulations d'inclinaison pour les surfaces à plots texturées topographiquement (issue du tableau 5.9).

De plus, les résultats d'inclinaison pour les surfaces à bandes avec une inclinaison transversale et les surfaces à plots montrent que les valeurs d'angles observées sont supérieures lorsque la profondeur est supérieure (tableaux 5.7 et 5.9). Ceci valide l'hypothèse selon laquelle l'un des effets de l'imprégnation est de favoriser l'ancrage de la triple ligne comme exprimée précédemment (Section 5.2.2.2).

Enfin, à l'instar des résultats pour les simulations statiques de l'état d'équilibre, aucune différence significative de comportement liée à la variation d'espacement E_p n'est observée. En effet, le comportement sur les surfaces modèles texturées topographiquement est principalement dépendant du type de motifs et de la direction d'inclinaison.

5.2.3.2 Comportement dynamique sur les textures chimiques

Pour finir, cette partie est consacrée aux résultats des simulations d'inclinaison pour les surfaces modèles texturées chimiquement. Encore une fois, ces simulations ont pour rôles d'expliquer la différence de comportement dynamique en fonction de la direction d'inclinaison, du type de motifs et de l'espacement des motifs.

Premièrement, pour les surfaces à bandes avec une inclinaison dans la direction transversale, les résultats issus du tableau 5.10 montrent que l'ensemble des gouttes décrochent de leur position d'équilibre. En effet, quelle que soit la valeur de l'espacement E_p, les gouttes décrochent avec un angle d'avancée $\theta_a \approx 109°$ et un angle de reculée $\theta_r \approx 81°$. Une représentation graphique de ces résultats de mouillabilité est également présent dans la figure 5.27. Pour une texturation en forme de bande composée de PET et de PDMS, l'hystérèse d'angle de contact vaut environ 28°, pour une inclinaison suivant la direction transversale. Bien que les valeurs de θ_a, θ_r et $\Delta\theta$ soit identiques, d'après les résultats présentés dans le tableau 5.10, l'angle d'inclinaison est très variable en fonction de l'espacement des motifs. Cependant, aucune tendance ne semble se dégager pour expliquer la différence entre α_a et α_r en fonction de E_p. En complément de cette analyse quantitative des résultats, il est possible d'observer la déformation de la goutte durant l'inclinaison, comme le montre la figure 5.28 dans le cas de la simulation B_T-20-C.

Surface	B_T-8-C	B_T-12-C	B_T-16-C	B_T-20-C
θ_a [°]	107	109	110	109
θ_r [°]	80	81	81	80
$\Delta\theta$ [°]	27	28	29	29
α_a [°]	54	74	62	30
α_r [°]	58	68	64	22

Tableau 5.10 : Résultats des simulations d'inclinaison pour les surfaces texturées chimiquement avec des bandes, où l'inclinaison est orientée suivant la direction transversale.

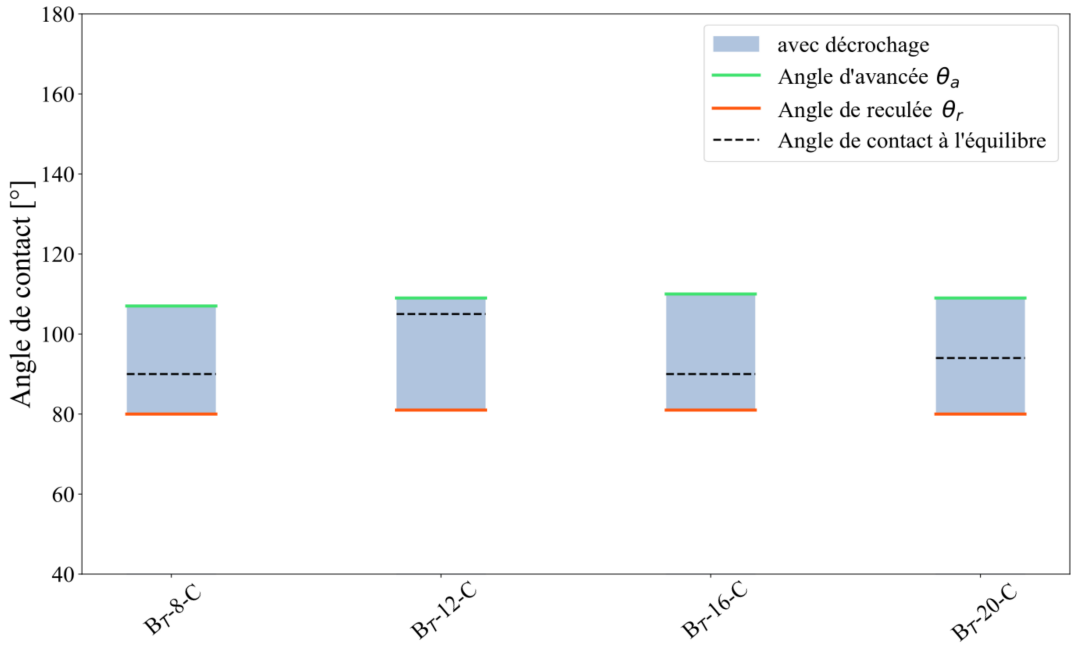

Figure 5.27 : Angles de contact mesurés lors des simulations d'inclinaison transversale pour les surfaces à bandes texturées chimiquement (issue du tableau 5.10).

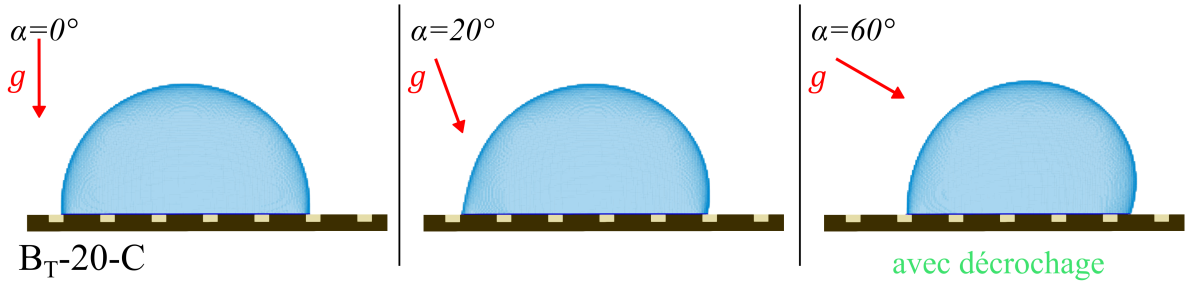

Figure 5.28 : Visualisation de la déformation de la goutte durant l'inclinaison dans le cas de la simulation B_T-20-C, jusqu'au déchrochement de la goutte.

De manière analogue aux texturations topographiques, lorsque l'inclinaison est orientée dans le même sens que les bandes, l'hystérèse est inférieure ou égale à 1. De plus, les gouttes décrochent directement après l'inclinaison, dès $\alpha_a = \alpha_r = 2°$. Comme le montre le tableau 5.11 et la figure 5.29, les valeurs de θ_a et θ_r post-traitées à partir des simulations dynamiques sont environ égales aux valeurs de θ_L issues des simulations de l'état d'équilibre, soit en moyenne $\theta_L \approx 91°$.

Surface	B_L-8-C	B_L-12-C	B_L-16-C	B_L-20-C
θ_a [°]	91	91	92	91
θ_r [°]	91	91	92	90
$\Delta\theta$ [°]	< 1	< 1	< 1	1
α_a [°]	2	2	2	2
α_r [°]	2	2	2	2

Tableau 5.11 : Résultats des simulations d'inclinaison pour les surfaces texturées chimiquement avec des bandes, où l'inclinaison est orientée suivant la direction longitudinale.

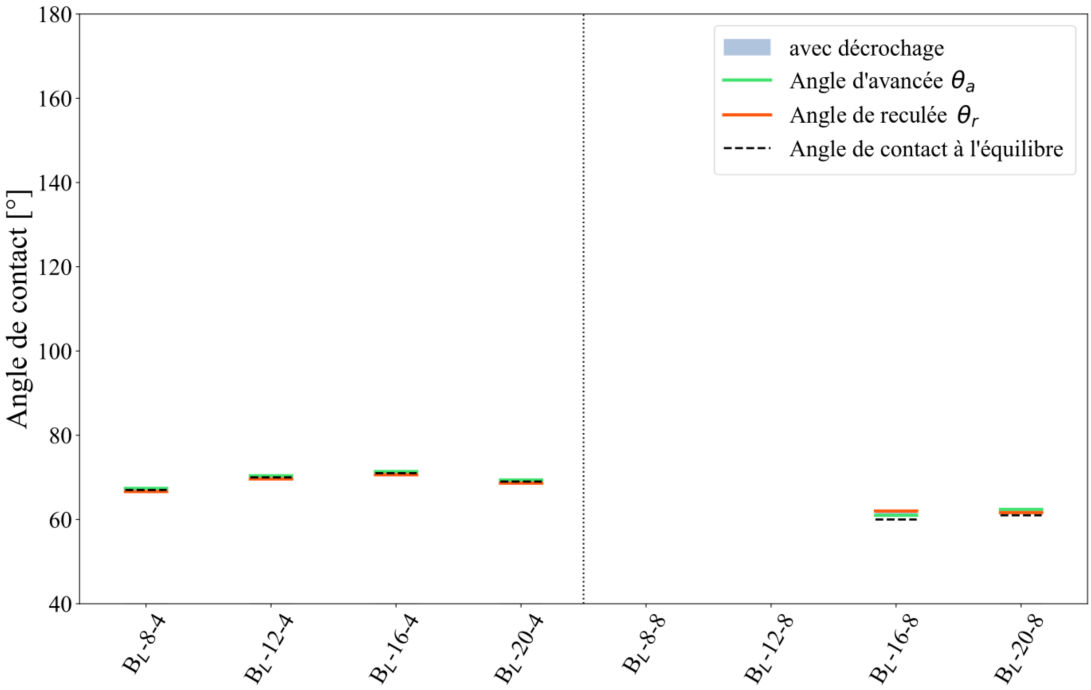

Figure 5.29 : Angles de contact mesurés lors des simulations d'inclinaison longitudinale pour les surfaces à bandes texturées chimiquement (issue du tableau 5.11).

Enfin, les résultats des simulations d'inclinaison pour les surfaces à plots texturées chimiquement sont regroupés dans le tableau 5.12 et la figure 5.30. Comme le montrent les résultats, indépendamment de l'espacement, les simulations pour les texturations chimiques des surfaces à plots ont des valeurs d'angle d'avancée θ_a environs égales à 109°. Pour l'angle à la reculée, θ_r vaut environ 92°, hormis pour la surface P-20-C où $\theta_r = 85°$. En moyenne, l'hystérèse pour les surfaces à plots vaut 19°, ce qui est significativement inférieur à $\Delta\theta = 28°$, calculée pour les surfaces à bandes dans la direction transversale. De la même façon, en moyenne, pour les surfaces à plots l'angle d'inclinaison nécessaire au décrochage de la goutte est inférieur.

Surface	P-8-C	P-12-C	P-16-C	P-20-C
θ_a [°]	108	108	110	110
θ_r [°]	90	92	93	85
$\Delta\theta$ [°]	18	16	17	25
α_a [°]	32	28	46	46
α_r [°]	28	26	38	36

Tableau 5.12 : Résultats des simulations d'inclinaison pour les surfaces texturées chimiquement avec des plots.

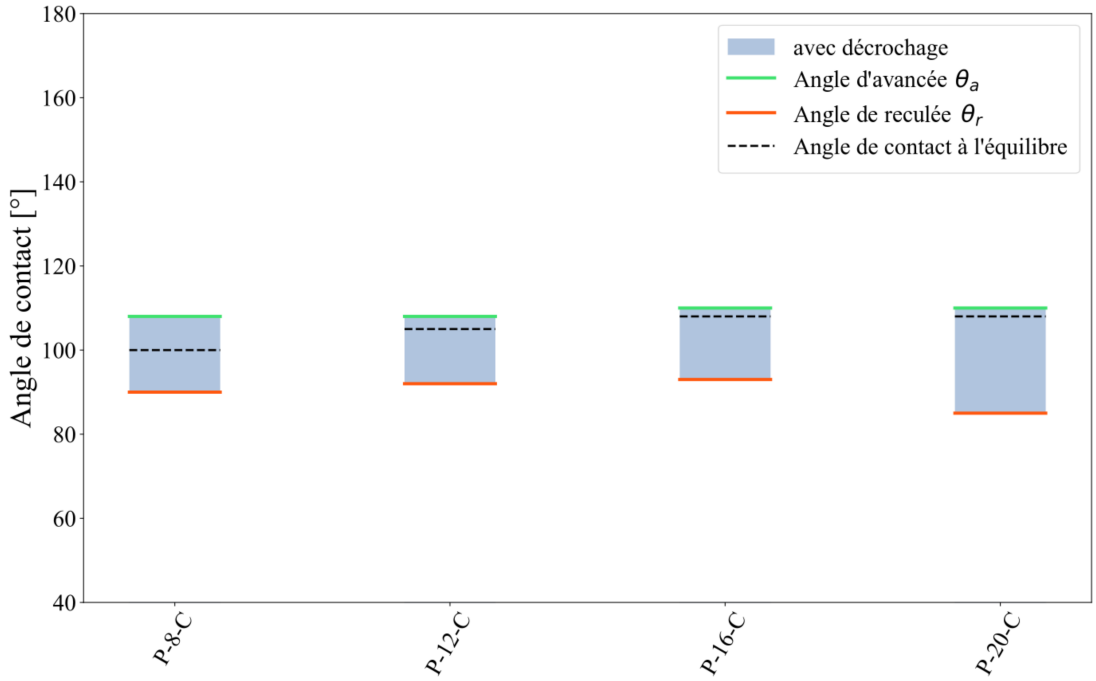

Figure 5.30 : Angles de contact mesurés lors des simulations d'inclinaison pour les surfaces à plots texturées chimiquement (issue du tableau 5.12).

De plus, $\alpha_a > \alpha_r$, ce qui signifie que le phénomène de reculée provient avant l'avancée. Il est possible d'expliquer cette différence en supposant qu'à la reculée, il suffit à la ligne triple de décrocher de quelques petits îlots en PET. En revanche, pour l'avancée, la goutte doit créer de l'interface liquide-solide avec une large zone de PDMS, qui est hydrophobe, jusqu'à atteindre les prochains plots en PET. Ainsi, la reculée est favorisée par rapport à l'avancée. Il est donc possible de supposer que les effets d'élasticité de l'interface, générés par la reculée, apportent suffisamment d'énergie à la goutte pour dépasser la condition d'avancée.
Par la même occasion, cette explication justifie de trouver des valeurs d'hystérèse supérieures pour les surfaces à bandes. En effet, la ligne triple étant en contact avec un bande complétement composée de PET, la condition de décrochage à la reculée requiert plus d'énergie. Cette différence des conditions nécessaires au décrochage de la ligne triple peux être caractérisée à l'aide des fractions chimiques linéiques au niveau de la ligne triple ϕ_{L_T}, comme illustré dans la figure 5.31.

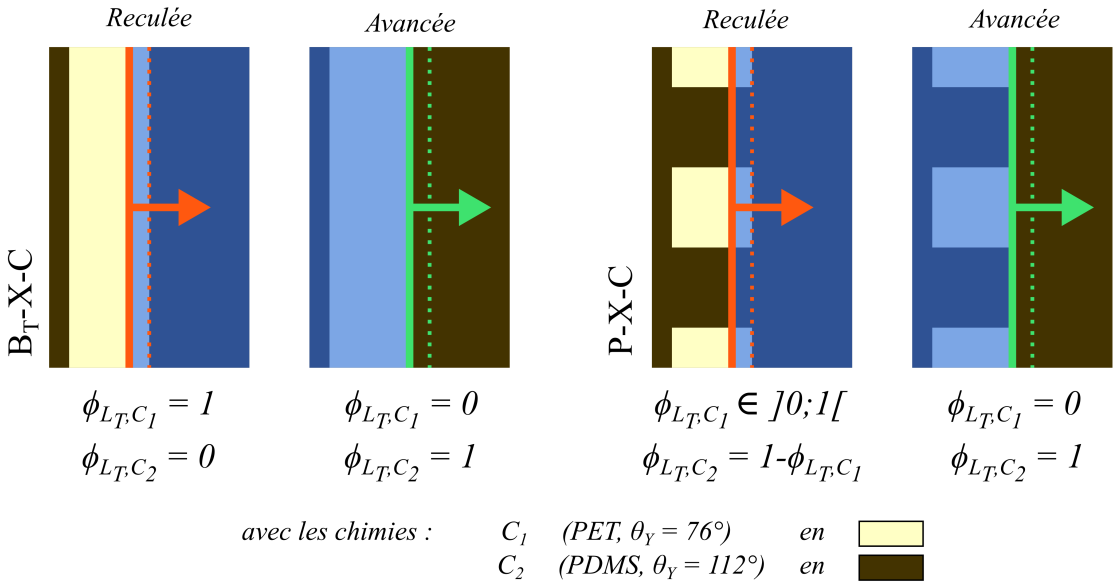

Figure 5.31 : Illustration des fractions chimiques linéiques au niveau de la ligne triple dans les différentes configurations d'avancée et de reculée.

Enfin, comme pour l'ensemble des résultats présentés dans cette étude, la variation d'espacement E_p n'affecte pas significativement les comportements observés. Dans le cadre de ces travaux, un nombre limité de motifs est présent sous la goutte ce qui explique en partie la faible dépendance des résultats en fonction de E_p. Pour compléter les observations faites dans cette étude, il serait également nécessaire de simuler différentes chimies et une plus grande gamme d'espacement. De manière analogue aux résultats à l'équilibre, il est possible de récapituler l'ensemble des comportements de mouillabilité durant les essais d'inclinaison en fonction des types de texturations à travers les résultats pour $E_p = 16$ LU. Ainsi, la figure 5.32, permet de mettre en avant les trois comportements observables parmi les simulations :

- Les gouttes très adhésives qui ne décrochent pas durant la simulation. Ces cas sont portés part une texturation topographique qui s'oppose au glissement de la goutte.
- Les gouttes peu adhésives qui décrochent au cours de l'inclinaison. Parmi les surfaces modèles testées, les surfaces texturées chimiquement expriment ce type de comportement.
- Les gouttes qui décrochent instantanément avec une hystérèse d'angle de contact $\Delta\theta$ nulle. Parmi les simulations, ce comportement très spécifique est observable uniquement pour les surfaces à bandes quand l'inclinaison est parallèle aux bandes. Dans ce cas de figure, aucune texturation ne s'oppose au glissement de la goutte.

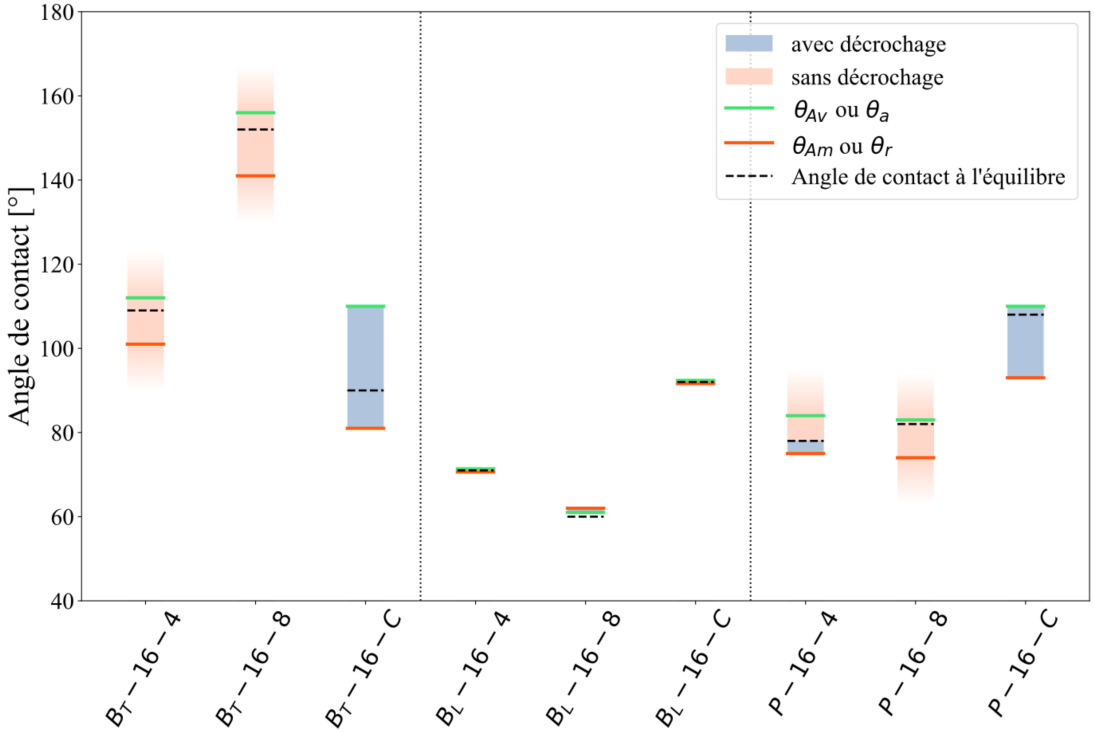

Figure 5.32 : Représentation des valeurs d'angles de contact à l'amont et à l'aval, ou d'avancée et de reculée dans les cas avec décrochage de la goutte, en fonction du type de surface modèle.

Chapitre 6

Optimisation de la forme des textures pour la fonctionnalisation de surfaces

« We impose order on the chaos of organic evolution. You exist because we allow it. And you will end because we demand it. »

Sovereign, *Mass effect*

Sommaire

6.1 Couplage méthode Lattice-Boltzmann et algorithme génétique 144
6.1.1 Choix des opérateurs de l'algorithme génétique 144
6.1.2 Définition des paramètres géométriques des texturations 145
6.1.3 Critères d'optimisation 148
6.1.3.1 Critères de mouillabilité 148
6.1.3.2 Test des critères 148
6.1.3.3 Choix du critère de performance 150
6.2 Optimisation des motifs pour la super-hydrophobie 151
6.2.1 Optimisation pour une chimie hydrophile 151
6.2.1.1 Paramètres de l'étude 151
6.2.1.2 Convergence et diversité 152
6.2.1.3 Résultats de l'optimisation 152
6.2.2 Stabilité pour un essai d'inclinaison 156
6.2.2.1 Paramètres des simulations d'inclinaison 156
6.2.2.2 Résultats pour les individus les plus aptes 156

Ce dernier chapitre a pour objectif de conclure le manuscrit de thèse, en proposant une approche numérique d'aide au design de surface dans le cadre du mouillage. En effet, ce chapitre traite de l'optimisation de forme de texture, dans le but de fonctionnaliser une surface. Dans un premier temps, l'approche couplant les simulations Lattice-Boltzmann et un algorithme génétique proposé pour répondre au besoin d'optimisation des texturations est présentée à travers le choix des paramètres et du critère d'optimisation. Puis, dans un second temps, cette méthode est appliquée au cas de la fonctionnalisation d'une surface à la chimie hydrophobe pour lui procurer, par la texturation topographique, un comportement super-hydrophobe. Les résultats sont discutés d'une part via l'optimisation par algorithme génétique et d'autre part via le prisme des théories du mouillage.

6.1 Couplage méthode Lattice-Boltzmann et algorithme génétique

Dans cette partie, il est proposé de coupler les simulations numériques du mouillage basées sur la méthode Lattice-Boltzmann (LBM) avec un algorithme génétique (GA) dans le but d'optimiser la forme des texturations. Cette approche, entièrement numérique, permet d'étudier la fonctionalisation de surfaces dans le cadre des problèmes de mouillabilité.

Comme énoncé dans le chapitre 3 traitant de la bibliographie de la bio-inspiration (Section 3.3.1), les GA sont très adaptés pour l'optimisation de formes ou de strutures. Des approches similaires, couplant simulation numérique et GA, ont déjà fait leur preuve pour l'optimisation de texturations en science des matériaux [143]. De plus, en 2019, une autre équipe s'est intéressée à l'optimisation des motifs en forme de T, réentrant et doublement réentrant, en couplant des simulations LBM à énergie libre et un GA [172]. Leurs travaux ont notamment permis d'étudier les angles d'avancée et de reculée en fonction des paramètres géométriques des motifs. D'autre part, cette approche a permis d'analyser la dynamique des mécanismes de transition du régime de mouillage pour ces motifs complexes.

Les travaux initiés durant cette thèse proposent au contraire de ne pas restreindre la forme des motifs en proposant une méthode de définition généraliste des motifs, capable de produire des géométries complexes semblables aux surfaces observables dans la nature. De plus, les simulations d'étalement de la goutte sont réalisées à l'échelle d'une goutte complète déposée sur la surface texturée.

6.1.1 Choix des opérateurs de l'algorithme génétique

L'algorithme génétique utilisé a été développé, en python, spécifiquement dans le cadre de cette étude. Il est donc impératif de présenter la méthode d'implémentation du GA telle que présentée dans le chapitre 3 (Section 3.3.2).

Pour rappel, un algorithme génétique entretient une population, un ensemble de solutions possibles, sur plusieurs itérations, ou générations, dans le but de trouver la solution optimale. À chaque génération, toutes les solutions, ou individus, de la population sont évalués à travers une fonction de performance. Les individus les plus performants sont combinés pour proposer d'autres solutions potentiellement plus adaptées. Il existe une grande liberté d'implémentation des algorithmes génétiques qui résulte en un large choix de méthodes pour combiner les solutions et en proposer de nouvelles à chaque génération. Ces méthodes sont désignées opérateurs

génétiques. Dans le cadre de ces travaux, les simulations numériques et les valeurs post-traitées associées servent de fonction de performance à l'algorithme d'optimisation.

Par nature, la qualité de l'optimisation d'un GA dépend d'un compromis entre la vitesse de convergence de l'algorithme et la diversité des individus. Conserver une bonne diversité, parmi les individus, assure d'étudier globalement le domaine paramétrique du système, sans piéger l'algorithme autour d'un optimal local. Cette étude étant une première approche, il a été choisi d'implémenter des opérateurs génétiques simples et couramment utilisés. De plus, les gènes, c'est-à-dire les paramètres à optimiser, sont encodés sous forme de flottants.

Le premier opérateur génétique à définir est l'opérateur de sélection. Il s'agit de la méthode de détermination des parents, utilisée pour générer les individus de la génération suivante. Dans le cadre de cette étude, il a été choisi d'incorporer une sélection par rang. Pour rappel, dans cette méthode, l'ensemble des individus est classé du plus apte au moins apte, vis-à-vis de la fonction de performance Q_i. Pour la phase de sélection, chaque individu a une probabilité P_i d'être sélectionné qui dépend de leur rang $O(i)$ dans le classement, où les plus performants ont plus de chance d'être choisis [152]. Par construction, la probabilité P_i est dépendante de la taille de la population N_{pop} et est définie suivant l'expression suivante :

$$P_i = \frac{O(i)}{N_{pop} \cdot (N_{pop} - 1)} \tag{6.1}$$

Ensuite, il est nécessaire de définir l'opérateur de croisement. Cet opérateur exprime la méthode employée pour combiner le génotype des deux parents et générer les enfants. Pour favoriser la diversité et l'exploration du domaine d'étude, il a été décidé d'utiliser l'opérateur heuristique de Wright [153, 154], tel que défini dans le chapitre 3 (Section 3.3.2.3).

Pour l'opérateur de mutation, la méthode implémentée consiste à faire muter aléatoirement les enfants avec une probabilité $P_{mut} = 1/L_{ch}$, où L_{ch} correspond à la longueur du chromosome, soit le nombre de gènes. Si l'individu doit subir une mutation, un gène choisi aléatoirement parmi l'ensemble des gènes du chromosome voit son allèle être modifié en prenant une autre valeur possible au sein de la gamme de l'allèle associée à ce gène. Il a également état décidé de garder un taux de mutation fixe pour toutes les générations.

L'optimisation est initialisé avec N_{pop} individus, puis ce nombre d'individus au sein de la population reste fixe entre les générations. En effet, à chaque générations N_{pop}/2 parents sont sélectionnés et N_{pop}/2 enfants sont créés, parmi lesquels certains enfants ont été mutés. Enfin, il a été décidé de définir deux conditions de fin, la première correspond à un nombre maximal de générations, noté K_{gen}. La seconde condition de fin est définie par un nombre de générations successives sans modification de l'individu le plus performant. Pour les travaux réalisés durant cette thèse, cette seconde condition est notée K_{series}.

6.1.2 Définition des paramètres géométriques des texturations

Une fois les opérateurs génétiques et les différents paramètres du GA présenté, il est nécessaire de se questionner sur la méthode à employer pour définir les texturations. La méthode de définition des texturations à optimiser doit pouvoir générer des surfaces complexes, pouvant par exemple arborer des réentrances, de manière similaire aux surfaces naturelles. Cependant, pour des raisons de limitation sur la résolution des motifs dans les unités du lattice (LU), il a été décidé que les surfaces générées ne comportent pas de texturation multi-échelle, contrairement à de nombreuses surfaces naturelles.

De plus, pour que la démarche d'optimisation soit la plus efficace possible, le nombre de paramètres géométriques pour définir les motifs doit être le plus restreint possible. Ainsi, le choix des paramètres de texturation répond à un compromis entre le nombre de paramètres à optimiser et la capacité de produire des surfaces complexes.

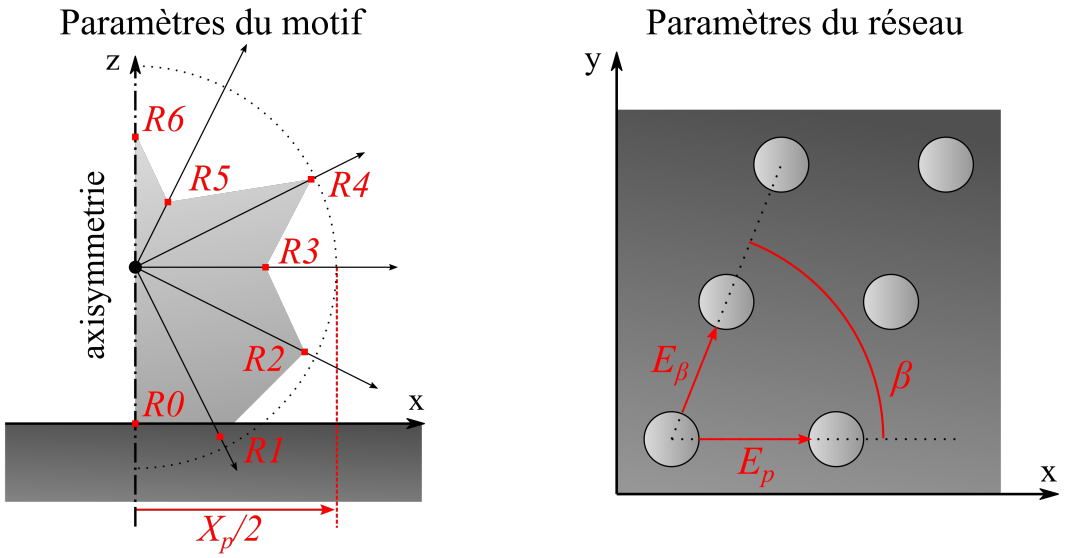

Figure 6.1 : Réprésentation schématique des paramètres géométriques pour décrire les texturations à optimiser dans l'algorithme génétique.

Dans le cadre des travaux présentés dans cette thèse, la solution retenue consiste à définir une surface texturée à travers dix paramètres géométriques, comme illustré dans la figure 6.1.

D'un côté, il est proposé de décrire un motif avec sept paramètres. En effet, sept paramètres correspondant à sept rayons, inscrits dans le plans xz, sont utilisés pour définir le profil d'un motif. Ensuite, le motif en 3D est obtenu en réalisant une révolution du profil avec l'axe z comme axe d'axisymétrie. De cette manière, il est possible de définir des motifs ayant différentes pentes locales en fonction de la profondeur d'imprégnation et permettant la création de motifs réentrants.

D'un autre côté, le motif peut être répété à travers un réseau spécifique sur l'ensemble de la surface. Pour définir le réseau, il a été décidé d'ajouter trois autres paramètres. L'espacements E_p entre les motifs définis suivant l'axe x, l'angle d'orientation du réseau noté β et l'espacement entres les motifs dans la direction de l'angle β, ce second espacement est désigné E_β.

Ainsi, les surfaces texturées sont définies par 10 paramètres. Pour l'algorithme génétique, chacun de ces dix paramètres correspond à un gène qui peut exprimer différents allèles. Hormis l'angle β, il a été choisi de définir l'ensemble des paramètres géométriques proportionnellement à l'épaisseur du motif X_p. De cette manière, à chaque étude, il est suffi de choisir une valeur de X_p pour définir la résolution des motifs par rapport au nombre de LU disponibles pour discrétiser la texturation. Le choix de la valeur de X_p revient donc également à choisir un rapport d'aspect entre la taille de la goutte et la taille des motifs.

Le chromosome type d'un individu ch_i peut donc s'écrire sous la forme d'un vecteur, tel que :

$$ch_i = \begin{pmatrix} R0 \\ R1 \\ R2 \\ R3 \\ R4 \\ R5 \\ R6 \\ E_p \\ \beta \\ E_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{R0} \cdot X_p \\ a_{R1} \cdot X_p \\ a_{R2} \cdot X_p \\ a_{R3} \cdot X_p \\ a_{R4} \cdot X_p \\ a_{R5} \cdot X_p \\ a_{R6} \cdot X_p \\ a_{E_p} \cdot X_p \\ a_\beta \\ a_{E_\beta} \cdot X_p \end{pmatrix} \tag{6.2}$$

Enfin, le tableau 6.1 récapitule, pour l'ensemble des gènes, les intervalles de valeurs parmi lesquelles les allèles sont compris. En raison de la limitation en mémoire de calcul et donc de la résolution des motifs, il a été choisi de définir les allèles de manière discontinue au sein de leur intervalle, avec un pas noté Δa. Au vu du nombre de gènes et du nombre d'allèles possible pour chaque gène, la méthode proposée permet de définir au total plus de 123 725 900 000 texturations différentes.

Paramètre géométrique	Allèle	Intervale	Pas Δa	Nombre de possibilités
Rayon R0	a_{R0}	[0,1 ; 0,9]	0,05	17
Rayon R1	a_{R1}	[0,1 ; 1]	0,05	19
Rayon R2	a_{R2}	[0,1 ; 0,6]	0,05	11
Rayon R3	a_{R3}	[0,1 ; 0,5]	0,05	9
Rayon R4	a_{R4}	[0,1 ; 0,6]	0,05	11
Rayon R5	a_{R5}	[0,1 ; 1]	0,05	19
Rayon R6	a_{R6}	[0,1 ; 0,9]	0,05	17
Espacement E_p	a_{E_p}	[0 ; 1]	0,1	11
Angle β	a_β	[45 ; 90]	5	9
Espacement E_β	a_{E_β}	[0 ; 1]	0,1	11

Tableau 6.1 : Intervalles possible pour les allèles des différents gènes.

Cependant, cette méthode comporte certains inconvénients majeurs. Tout d'abord, il est attendu que les pentes locales jouent un rôle majeur sur l'état d'équilibre des gouttes sur les surfaces texturées. Or, avec cette méthode, les pentes sont définies indirectement à l'aide de deux rayons consécutifs. De plus, une grande partie des motifs générés est difficile voire impossible à réaliser, en termes de processus de fabrication ou de résistance mécanique. Bien que la faisabilité des motifs pour une surface réelle ne soit pas considérée dans cette première approche numérique, il est important de garder cette notion en considération.

6.1.3 Critères d'optimisation

Pour finaliser la présentation du couplage LBM-GA, il faut aborder le choix de la fonction de performance. Dans le cadre de ces travaux, il a été décidé d'utiliser les simulations LBM pour déterminer la performance des individus, mais il est primordial de définir quel critère d'optimisation utiliser. En effet, l'approche numérique donne accès à un large choix de propriétés de mouillabilité qu'il est possible de déterminer en post-traitant les résultats des simulations. Cette partie est donc dédiée au choix du critère de mouillabilité à optimiser.

6.1.3.1 Critères de mouillabilité

D'un point de vue de l'étude du mouillage, il est possible d'envisager plusieurs comportements à favoriser pour fonctionnaliser une surface. Les plus pertinents sont de rendre une surface très adhésive ou au contraire très peu adhésive, ou encore de privilégier un étalement important de la goutte. Dans cette thèse, l'étude se focalise sur une très faible adhésion de la goutte sur la surface, dans le but d'obtenir un comportement déperlant. Or, cette propriété s'exprime à travers la super-hydrophobie, soit un angle de contact statique θ_e élevé combiné à une hystérèse d'angle de contact $\Delta\theta$ très faible.

Numériquement, grâce au code de simulation développé durant cette thèse, il est possible d'évaluer à la fois l'angle de contact statique à l'équilibre et l'hystérèse d'angle de contact lors du décrochage de la goutte. Il est donc techniquement possible de chercher à maximiser l'angle θ_e tout en minimisant $\Delta\theta$. Cependant, l'obtention de l'hystérèse d'angle de contact nécessite des simulations d'inclinaison qui sont très coûteuses en temps de calcul. Étant donné que le GA nécessite un grand nombre d'individus pour être pertinent, il est proposé d'estimer à priori la nature déperlante uniquement à travers des paramètres de mouillabilité accessibles à l'état d'équilibre. Ainsi, l'utilisation de simulation d'équilibre permet de limiter les ressources nécessaires pour déterminer la performance de chaque individu.

Par nature, maximiser l'angle de contact à l'équilibre n'est pas suffisant pour définir un comportement super-hydrophobe. En effet, la notion de faible hystérèse est requise pour assurer la déperlance et garantir que la goutte ne soit pas dans un cas similaire à l'effet pétale de rose, où l'angle de contact est élevé, mais l'adhésion est très forte. En revanche, il est possible d'assumer, pour des texturations topographiques, que la déperlance est synonyme d'une goutte suspendue dans un état de Cassie-Baxter, ou mixte, mais avec une faible imprégnation. De plus, les états suspendus peuvent être caractérisés par un faible contact liquide-solide. Ainsi, deux critères sont à tester : minimiser la longueur de ligne triple totale L_T ou minimiser l'aire de contact liquide-solide A_{wet}.

6.1.3.2 Test des critères

Pour tester ces deux critères, il est proposé de calculer la performance d'une petite population d'individus et de comparer les résultats. Pour ces tests, la même population est utilisée entre les deux critères. En ce qui concerne sa composition, la population test est créée à partir de huit motifs. Puis la population est complétée pour atteindre un total de 40 individus. Les nouveaux individus sont générés aléatoirement en combinant les huit motifs prédéfinis. Les huit motifs prédéfinis ont été choisis arbitrairement, pour représenter un large spectre de possibilité, dont des surfaces réentrantes. L'ensemble des huit profils des motifs prédéfinis est illustré dans la figure 6.2. De plus, pour des raisons de simplicité, chaque surface est définie avec les mêmes paramètres de réseau. C'est-à-dire que les différentes surfaces se distinguent uniquement par la valeur des rayons définissant le profil du motif.

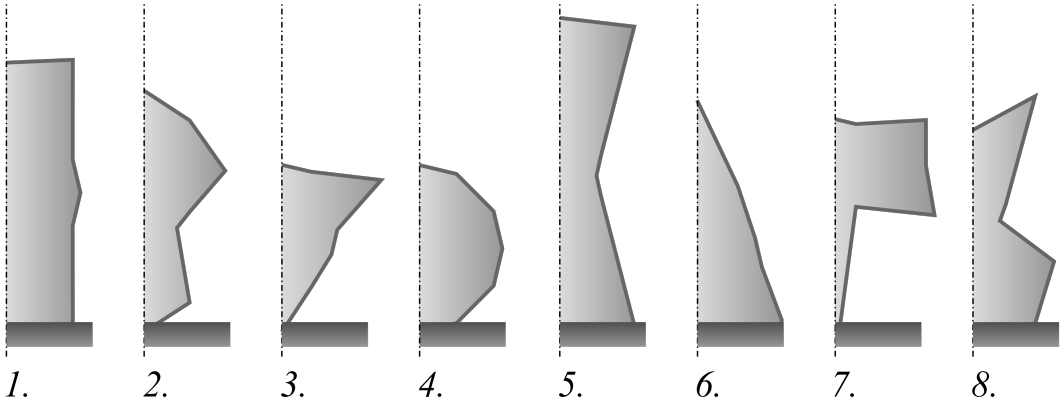

Figure 6.2 : Réprésentation schématique des huit profils choisis arbitrairement pour construire la population test.

Pour les simulations LBM réalisées pour tester les critères d'optimisations, les lattices sont définis avec 350×350 LU de coté et 275 LU de haut. L'épaisseur de motif X_p est fixée et vaut 35 LU. De plus, les gouttes sont initialisées tangentes à la surface et centrées dans l'espacement entre quatre motifs, avec un rayon initial égal à 87 LU. Concernant la chimie de surface, il a été décidé d'utiliser un matériau hydrophile, tel que le PET avec un angle de contact intrinsèque θ_Y= 76°. Comme pour les autres simulations de l'état d'équilibre présentées durant cette thèse, le nombre total d'itérations est fixé à 30 000.

Critère d'optimisation	Propriété de mouillabilité		
	θ_e [°]	L_T [LU]	A_{wet} [LU^2]
Minimisation de L_T	92	1 758	30 343
Minimisation de A_{wet}	83	2 102	16 642

Tableau 6.2 : Comparaison des propriétés de mouillabilité des individus les plus performants en fonction du critère d'optimisation.

Avec la population test, pour comparer les deux critères d'optimisation, il suffit de comparer l'individu le plus performant en fonction du critère utilisé. Le tableau 6.2 présente la différence des propriétés de mouillabilité entre les deux surfaces les plus adaptées selon chacun des deux critères. Ces résultats montrent que pour les deux surfaces l'angle de contact à l'équilibre θ_e est supérieur à θ_Y l'angle intrinsèque du PET pour une surface parfaitement plane, mais l'écart n'est pas significatif. De plus, en comparant les valeurs de L_T et A_{wet} entre elles, les résultats mettent en évidence que les valeurs de L_T sont du même ordre de grandeur alors que les valeurs de A_{wet} sont très différentes. En effet, la valeur de A_{wet} est environ deux fois plus grande lorsque le critère est la minimisation de la longueur totale de ligne triple. À partir de cette observation, il est possible de supposer que la longueur de ligne triple totale est un critère plus restrictif pour estimer la présence d'un régime de mouillage suspendu.
D'autre part, comme le montre la figure 6.3, pour les deux critères d'optimisation testés, les motifs présentent des géométries réentrantes. Or, parmi les surfaces naturelles, les texturations réentrantes sont une solution couramment rencontrée comme alternative aux texturations multi-échelles pour assurer la super-hydrophobie d'une surface. Ces premiers résultats semblent donc

valider en partie la démarche de couplage LBM-GA.

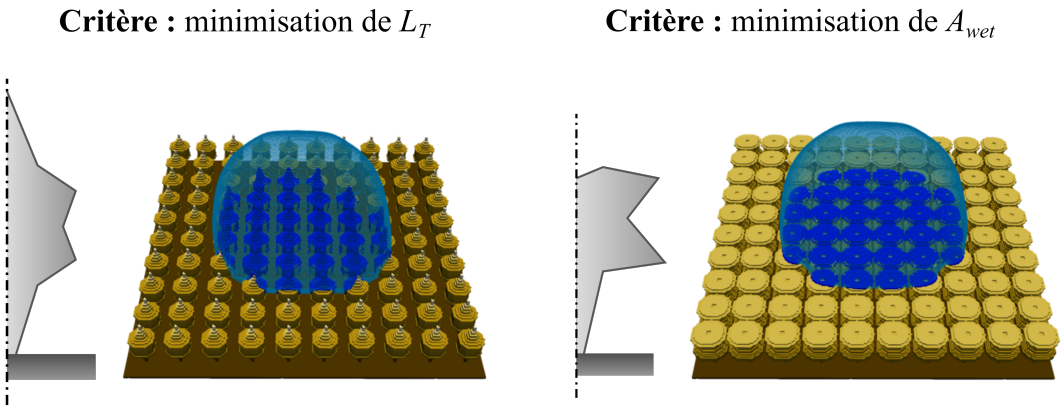

Figure 6.3 : Visualisation de la forme des motifs et des états d'équilibre pour les deux surfaces les plus performantes dépendant du critère d'optimisation.

6.1.3.3 Choix du critère de performance

Comme expliqué précédement, chercher à maximiser l'angle de contact à l'équilibre n'est pas suffisant pour définir un critère capable d'estimer le comportement super-hydrophobe d'une surface. La solution proposée consiste à chercher à minimiser le contact liquide-solide afin d'assurer un état Cassie-Baxter, qui tend à apporter un comportement déperlant. Dans ce but, la comparaison des critères de minimisation de la longueur de ligne triple totale L_T ou de minimisation de l'aire de contact liquide-solide A_{wet}, semble montrer qu'il est plus intéressant de minimiser L_T. Cependant, en ignorant complètement l'aire de contact liquide-solide A_{wet}, il est possible d'imaginer des surfaces ayant les mêmes performances, du point de vue de la minimisation de L_T, qui ont pourtant aucune chance d'avoir les mêmes comportements dynamiques. Les deux surfaces représentées en 2D sur la figure 6.4 illustre cette possibilité. En effet, les deux surfaces ont la même longueur de ligne triple mais avec des aires de contact mouillé A_{wet} différentes. La surface avec des protubérances supplémentaires sous la goutte présente une aire de contact liquide-solide A_{wet} supérieure. Or, il peut être admis que la présence des protubérances va limiter la capacité de déperlance.

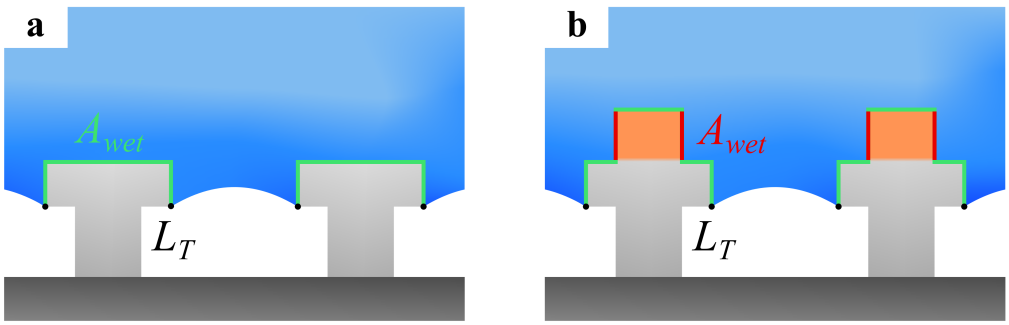

Figure 6.4 : Représentation en 2D de deux surfaces présentant une même valeur de L_T pour des valeurs différentes de A_{wet}. (a) Surface sans protubérances ; (b) Surface avec protubérances.

Pour ces différentes raisons, il a été décidé de créer un critère mixte, noté η. De plus, la création

de ce nouveau critère est en adéquation avec les théories du mouillage en considérant que le comportement macroscopique d'une goutte est lié à la fois à l'adhésion de la surface mouillée et à l'ensemble des déformations locales des lignes triples. Ainsi, il est proposé de définir η, comme le produit de l'aire de la surface mouillée adimensionnée A^*_{Wet} et de la longueur de ligne triple totale adimensionnée L^*_T. Dans l'expression du critère mixte η, il a été décidé de favoriser les effets de ligne triple, tel que :

$$\eta = A^*_{wet} \cdot (L^*_T)^2 \tag{6.3}$$

$$\text{avec} \qquad L^*_T = \frac{L_T}{L} \qquad \text{et} \qquad A^*_{wet} = \frac{A_{wet}}{L^2}$$

Où L est une longueur caractéristique du lattice, correspondant à la longueur d'un côté. Par construction, le nouveau critère d'optimisation correspond donc à la minimisation de la valeur de η.
Dans cette première approche, il a été décidé de mettre au carré la longueur totale de la triple ligne dans l'expression du critère mixte η (6.3). Bien qu'arbitraire, ce choix répond au besoin de pondérer favorablement les effets de la ligne triple sans négliger le terme d'aire de contact mouillée.

Pour certains cas, la goutte peut avoir un comportement extrèmement anisotrope qui mène l'étalement du liquide à franchir les conditions aux limites periodiques dans une direction. Quand cela survient, il est impossible de post-traiter la simulation à la 30 000ième itération et la performance de l'individu n'est pas quantifiable. Il a donc été décidé de pénaliser fortement la probabilité de sélectionner ces individus, comme parents, en les plaçant derniers dans le classement de l'opérateur de sélection par rang.

6.2 Optimisation des motifs pour la super-hydrophobie

Cette partie est dédiée aux résultats d'une étude d'optimisation de la forme des motifs, en appliquant l'approche par couplage LBM-GA, pour rendre une surface super-hydrophobe. Dans un premier temps, l'optimisation par GA est utilisée pour déterminer la texturation optimale pour donner un comportement déperlant à un matériau hydrophile. Puis, la stabilité des résultats pour les surfaces les plus performantes est testée en simulant des essais d'inclinaison. Cette deuxième étape permet de valider le comportement peu adhésif obtenu par la texturation et par la même occasion la méthodologie.

6.2.1 Optimisation pour une chimie hydrophile

6.2.1.1 Paramètres de l'étude

Dans le cadre de cette étude, il a été choisi de chercher à rendre une surface de PET super-hydrophobe à l'aide de texturation topographique. Pour rappel, le PET a un angle de contact intrinsèque θ_Y = 76°.

D'un point de vue des simulations LBM, les mêmes paramètres qui ont été utilisés pour tester les critères d'optimisation sont conservés. C'est-à-dire que la taille des lattices est de 350×350×275 LU. De plus, l'épaisseur des motifs X_p vaut 35 LU permettant de placer jusqu'à dix motifs dans la largeur de la surface, si les espacements entre les motifs sont nuls. À l'initialisation, la goutte est de forme sphérique avec un rayon de 87 LU pour un volume d'eau de 3 µL, ce qui implique

un pas de discrétisation $\Delta x \approx 10$ µm. Dans cette configuration, le nombre de Bond vaut environ 0,1. La goutte est initialisée tangente à la surface solide suivant l'axe z. Dans le plan xy la goutte est centrée entre quatre motifs. Cette initialisation permet de tester la configuration la plus défavorable au maintien d'un état suspendu.

Enfin, pour les paramètres du GA, la population N_{pop} est fixée à 28 individus. Et pour les conditions de fin, il a été choisi d'exécuter l'optimisation pour un maximum de génération $K_{gen} = 50$, avec une condition supplémentaire $K_{series} = 8$.

6.2.1.2 Convergence et diversité

Avant d'étudier les résultats d'un point de vue de la mouillabilité, il est crucial d'analyser les résultats d'un point de vue de l'optimisation par le GA, notamment en termes de convergence et de diversité des individus.

Pour analyser les résultats, il faut s'intéresser à l'évolution du critère d'optimisation mixte η, ainsi qu'aux différents paramètres de mouillabilité au fil des générations, tel que l'angle de contact à l'équilibre θ_e où plus spécifiquement l'angle d'équilibre minimum $\theta_{e,min}$. Il est également important d'étudier l'évolution de l'interface liquide-solide à travers la longueur totale de ligne triple L_T et l'aire de contact liquide-solide A_{wet}. La figure 6.5 regroupe le tracé de l'évolution des valeurs de η, $\theta_{e,min}$, L_T et A_{wet} pour la surface optimale de chaque génération et des valeurs moyennes dans chaque génération. Comme le montrent ces résultats, l'optimisation s'arrête prématurément, à la 25ième génération, en ayant atteint la condition de fin secondaire $K_{series} = 8$.

Plusieurs tendances peuvent être dégagées de ces résultats. Premièrement, en cohérence avec le critère d'optimisation, qui consiste à minimiser η, la valeur de η optimal tend vers 0 au fil des générations. De manière analogue, les valeurs de L_T et A_{wet}, avec lesquelles sont calculées η, suivent la même tendance. Par construction, le GA optimise l'ensemble de la population et non uniquement la meilleure solution. Ainsi, il est également cohérent d'observer que les valeurs moyennes de η, L_T et A_{wet} tendent également à être minimisées. De plus, en observant l'évolution de l'angle de contact à l'équilibre, il est possible de constater que les valeurs moyennes de θ_e, mais également la valeur associée à l'individu le plus performant, augmente durant l'optimisation. En effet, parmi la population initiale la valeur moyenne de $\theta_{e,min}$ vaut environ θ_Y. Puis en moyenne, après seulement quelques générations, $\theta_{e,min} > \theta_Y$. Or, avec le critère choisi, aucune condition sur l'angle de contact n'est définie. Ce premier résultat est très important et semble valider partiellement le choix du critère d'optimisation.
Cependant, la convergence est rapide, avec l'individu le plus performant trouvé dès la 17ième génération. Au vu du nombre total de générations, seulement 364 individus différents ont été testés. Il est donc probable que l'individu le plus performant de cette étude ne représente qu'un optimum local.

6.2.1.3 Résultats de l'optimisation

Avant de s'intéresser à la surface optimale résultante de cette étude d'optimisation, il faut vérifier la diversité des individus parmi les dernières populations. Comme présenté dans la section précédente, figure 6.5, les valeurs moyennes et optimales du critère mixte η atteignent un plateau à partir de la 15ième génération jusqu'à la dernière génération. Il a donc été décidé d'étudier la diversité des individus parmi les dix dernières générations. Parmi l'ensemble des individus, il est possible de regrouper les individus en fonction de similarité dans leur génotype,

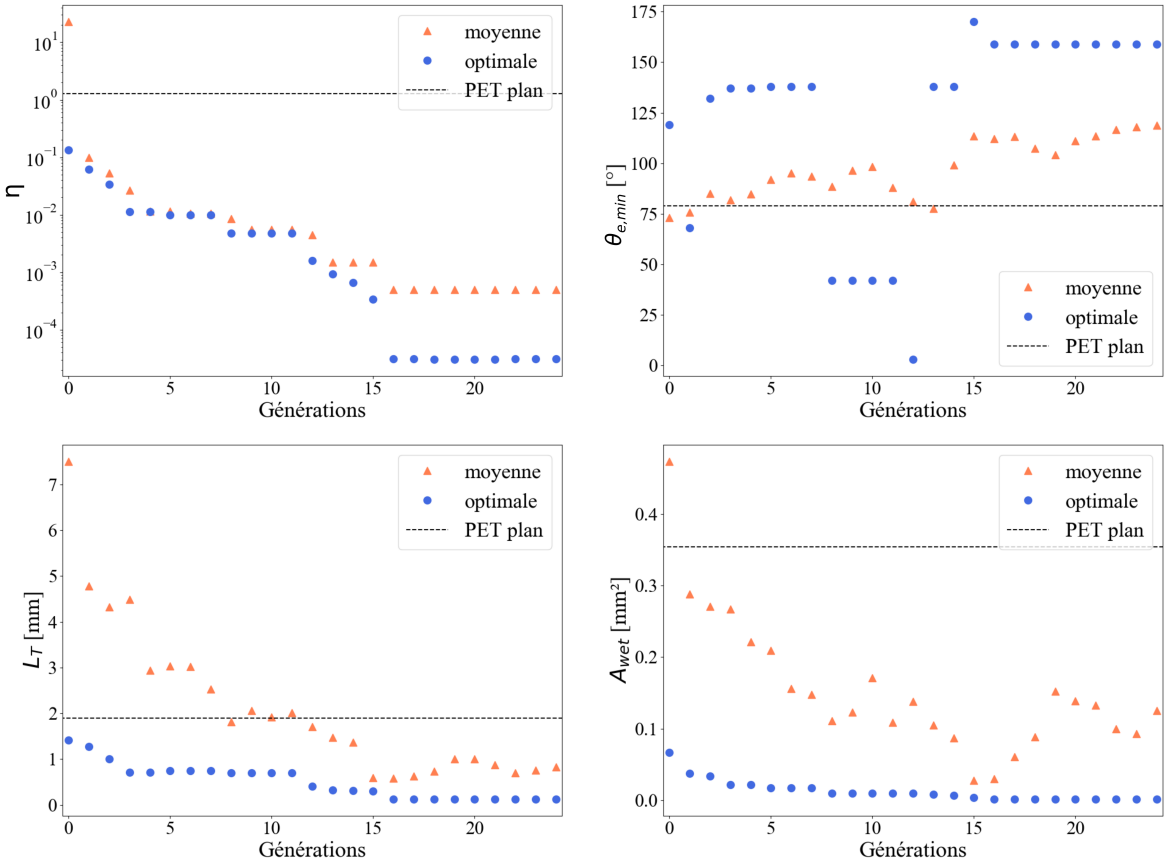

Figure 6.5 : Evolutions des valeurs de performance suivant le critère η et des valeurs des propriétés de mouillabilité $\theta_{e,min}$, L_T et A_{wet} au cours de l'optimisation.

qui se traduisent par des similarités de leur phénotype soit des géométries semblables. De cette manière, en concentrant la classification sur les gènes liés à la forme du motif, les individus peuvent être regroupés selon 4 grandes familles, comme illustrées dans la figure 6.6 :

- Les motifs en forme de plot (P).
- Les motifs en forme de plot épaulé (PE).
- Les motifs en forme de plot réentrant (PR).
- Les motifs en forme de plot épaulé réentrant (PER).

Les individus qui ne partagent aucune similitude de phénotype avec les autres individus ne peuvent pas être classés parmi ces quatre familles. Ces individus sont comptabilisés dans une cinquième catégorie qui regroupe les individus aux géométries uniques ou très peu représentées.

En étudiant la répartition des individus des dernières générations suivant les différentes familles, telles que définies, il est possible d'évaluer la diversité de chaque population. Comme le montrent les résultats de répartition dans la figure 6.6, dans les dernières générations ou uniquement la dernière génération, la majorité d'individus appartient à la famille PE, respectivement 61,5% et 68,8%. Le faible nombre de famille identifiable et la sur-représentation d'une unique famille confirment une faible diversité des individus. Au vu de cette faible diversité et de la convergence rapide, il est judicieux de supposer que cette étude d'optimisation a abouti à un extremum local.

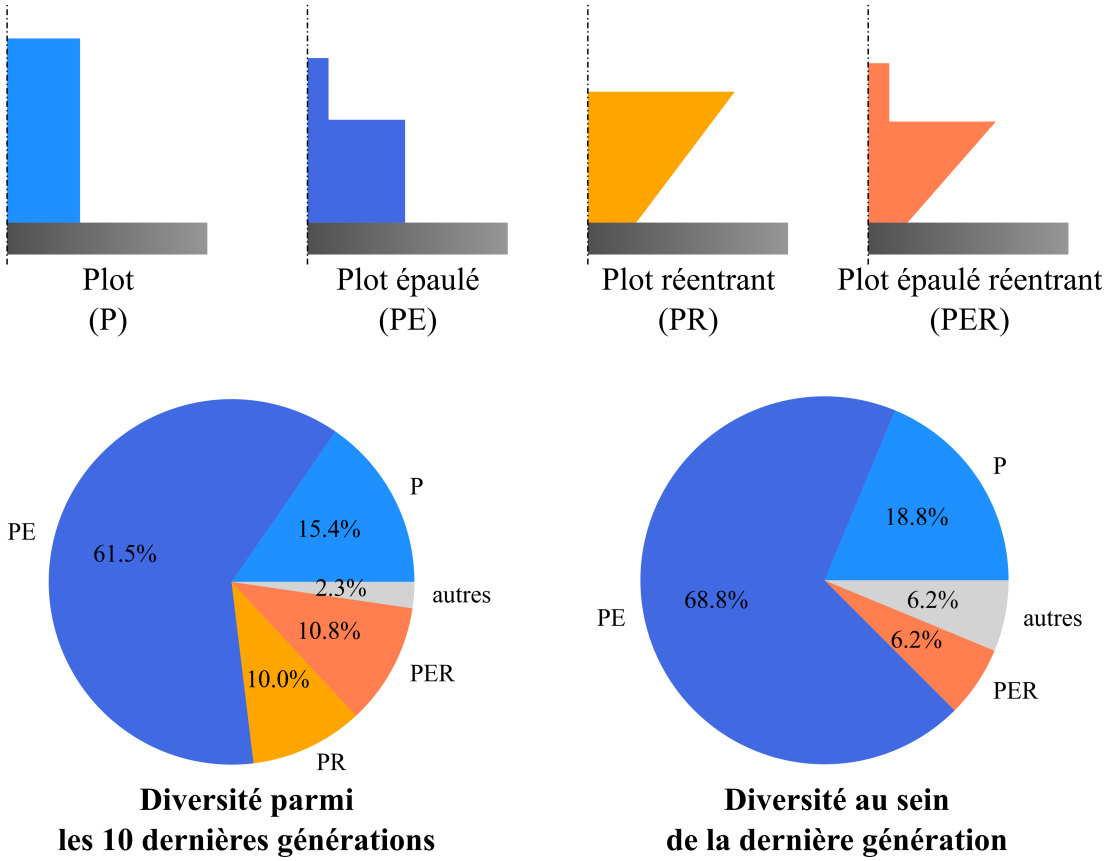

Figure 6.6 : Représentation schématique des profils des familles de motifs les plus récurrents parmi les individus, complétée par les graphiques de la diversité au sein des dernières générations.

Il est toutefois important d'étudier cet optimum local pour comprendre la géométrie de la surface optimisée, désigné PE^{Opti}, mais également pour discuter des paramètres utilisés dans cette étude.
La figure 6.7 montre l'état d'équilibre de la goutte à travers deux points de vue latéraux et une vue de dessus. Ces observations permettent de constater que la goutte est en équilibre en suspension sur un faible nombre de motifs texturés. De plus, la goutte conserve une forme quasi-sphérique avec très peu d'étalement, ce qui est attendu d'une goutte en équilibre dans un état Cassie-Baxter ou un état mixte avec une faible imprégnation. Pour déterminer $\theta_{e,min}$, plusieurs mesures de l'angle de contact macroscopique sont réalisées suivant différentes directions, réparties de manière homogène autour de la goutte. Sur l'ensemble des angles mesurés pour cette surface, $\theta_{e,min} = 159°$ et $\theta_{e,max} = 165°$. Les valeurs d'angle de contact macroscopique à l'équilibre confirment que la goutte à un comportement de mouillabilité isotrope avec $|\theta_{e,max} - \theta_{e,min}| = 6°$. Encore une fois, sans critère sur l'angle de contact, la minimisation de η mène à un système optimal où la goutte à une valeur de $\theta_e > 150°$. Ceci répondant à la première condition de la super-hydrophobie.

Cependant, la géométrie de l'individu PE^{Opti} est questionnable. En effet, comme présenté dans le chapitre 1 (Section 1.3.5), la condition de stabilité de l'état Cassie-Baxter défini par Bormashenko implique que l'angle d'amorce de la texturation ϕ_p soit à minima inférieur à θ_Y [37, 38]. Dans le cas d'une chimie de surface hydrophile avec $\theta_Y = 76$ °, cette condition requiert que le motif soit réentrant. Or PE^{Opti}, à la forme d'un plot sans réentrance et avec un faible épaulement, comme illustré dans la figure 6.8. De plus, la résolution des motifs étant très limitée en

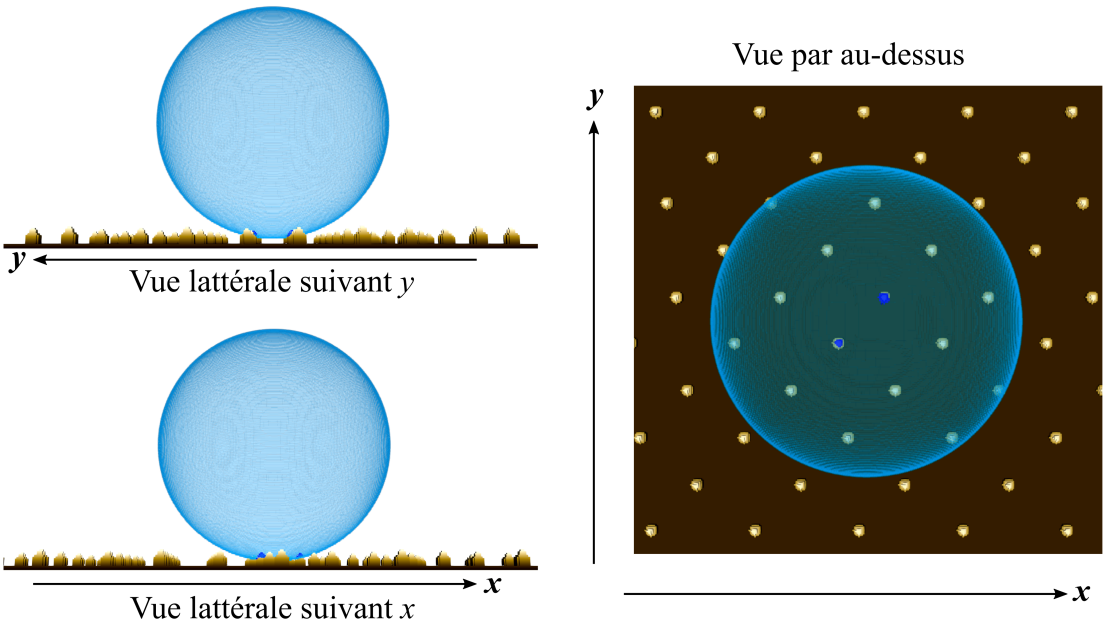

Figure 6.7 : Visualisation de l'état d'équilibre de la goutte pour l'individu PE^{Opti}, surface la plus performante suivant le critère de minimisation de η.

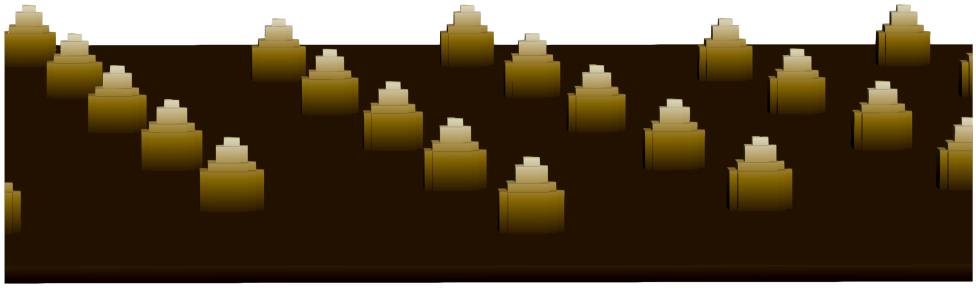

Figure 6.8 : Visualisation de la forme discrétisée des motifs composant la surfaces de l'individu PE^{Opti}.

termes de nombre de nœuds, la dicrétisation du motif est très simplifiée.

Néanmoins, il est nécessaire de comprendre pourquoi la goutte conserve un état suspendu pour PE^{Opti}. La première explication peut provenir de la dynamique de dépôt numérique. En effet, bien que la simulation soit soumise à la gravité, la goutte est initialisée légèrement en contact avec la surface, il n'y a donc aucune dynamique d'impact de la goutte sur la texturation. Sans cette dynamique due à la chute libre de la goutte, il peut manquer à la goutte l'énergie nécessaire pour décrocher la ligne triple du point d'amorce de la texturation, ce qui empêche d'imprégner le coté des motifs.

Deuxièmement, contrairement à ce qui est prévu, la goutte à l'initialisation n'est pas positionnée au point le plus défavorable à un état suspendu. En effet, comme le montre la figure 6.9, il existe un défaut dans la méthode de positionnement utilisée. En considérant M_1 le premier motif du réseau, M_2 est positionné par l'espacement suivant x définit par E_p. Ensuite, M_3 est positionné en fonction de l'angle β et de l'espacement suivant cet angle E_β. Dans tous les cas, le code positionne la goutte à l'initialisation, au point C, au centre du segment entre M_1 et M_3, soit

centré sur le réseau formé par M_1, M_2, M_3 et M_4. Or pour le réseau de la surface PE^{Opti}, le positionnement initial devrait être placé au centre du réseau défini par M_1, M_2, M_3 et M_5, car $E_p > E_\beta$. Pour la même surface, mais avec une goutte initialisée au point C' au lieu de C, comme illustré dans la figure 6.9, la simulation atteint un état Wenzel, car géométriquement, la goutte touche le fond de la surface dès l'initialisation. Ce qui confirme l'importance du positionnement initial dans cette étude d'optimisation.

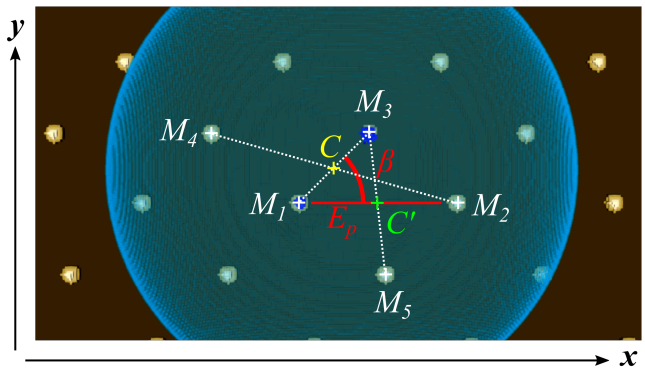

Figure 6.9 : Schéma représentant le défaut de positionnement initial de la goutte au point le plus défavorable à un état suspendu.

6.2.2 Stabilité pour un essai d'inclinaison

Le manque de résolution des motifs additionné au problème de positionnement des motifs limite l'analyse des comportements de mouillabilité en fonction des motifs et du réseau. Cependant, il est intéressant de tester la stabilité des solutions soumises à un essai d'inclinaison dans le but de valider la démarche du couplage LBM-GA et le choix du critère d'optimisation η.

6.2.2.1 Paramètres des simulations d'inclinaison

Les essais d'inclinaison ont pour objectif d'étudier le comportement déperlant des surfaces issues du couplage LBM-GA. De plus, le comportement déperlant étant lié à la notion de super-hydrophobie, ces simulations d'inclinaison sont utilisées pour quantifier l'hystérèse d'angle de contact des surfaces optimisées.

Concernant les paramètres des simulations d'inclinaison, les mêmes paramètres appliqués dans le chapitre 5 (Section 5.2.3) sont réutilisés. Ainsi, les simulations d'inclinaisons sont effectuées à partir des états d'équilibre obtenus à la 30 000ième itération. La vitesse d'inclinaison est de 0.001 degré par itération, soit une mise à jour de l'inclinaison de 2° toutes les 2 000 itérations. Et l'inclinaison maximale égale à 90° est atteinte à la 120 000ième itération.

Enfin, pour l'ensemble des simulations, il a été choisi d'orienter l'inclinaison dans la même direction, soit suivant l'axe x.

6.2.2.2 Résultats pour les individus les plus aptes

Au vu du temps de simulations, il a été choisi d'effectuer des simulations d'inclinaison uniquement pour les surfaces les plus performantes. Ainsi, trois surfaces optimisées ont été sélectionnées parmi les dernières générations du GA. Évidement, la première surface sélectionnée est la surface optimale parmi toutes les surfaces testées, soit l'individu étudié précédemment,

désigné PE^{Opti}. Ensuite, les deux autres individus ne sont pas choisis directement en prenant le second et le troisième individu le plus performant. Au contraire, il a été décidé de sélectionner l'individu le plus performant de chacune des quatre différentes familles définies dans l'étude de la diversité (Section 6.2.1.3), hormis l'individu de la famille à plot simple (P). En effet, il est attendu que la réentrance puisse apporter de la stabilité à l'état suspendu même soumis à une inclinaison, ce qui n'est pas le cas pour les motifs en forme de plot simple. Ainsi, les trois surfaces soumises à des essais d'inclinaison sont les individus PE^{Opti}, PR^{Opti} et PER^{Opti}, désignés en fonction de la famille à laquelle ils appartiennent.

Pour les trois surfaces, les résultats des simulations en statique et des simulations d'inclinaison sont présentés ensemble dans le tableau 6.3. Pour chacun des individus, les résultats en statique présentent les valeurs du critère η, ainsi que la valeur de l'angle de contact à l'équilibre minimum $\theta_{e,min}$. Auxquelles s'ajoutent les valeurs de $\theta_{e,x}$, qui correspondent aux valeurs de l'angle de contact à l'équilibre suivant la direction d'inclinaison x. D'un point de vue de la minimisation de η, les surfaces peuvent être ordonnées de la plus performante à la moins performante telles que : PE^{Opti} >PR^{Opti} >PER^{Opti}. Cependant, il n'existe pas de proportionnalité entre les valeurs de η et de $\theta_{e,x}$. En effet, PE^{Opti} présente une valeur de $\theta_{e,x} = 163°$ ce qui est inférieur à la valeur pour PR^{Opti} (173°) mais supérieur à la valeur obtenue pour PER^{Opti} (149°).

Surface	PE^{Opti}	PR^{Opti}	PER^{Opti}
η	3,10 $\cdot 10^{-5}$	3,39 $\cdot 10^{-4}$	8,42 $\cdot 10^{-4}$
L_T^*	1,29 $\cdot 10^{-1}$	3,00 $\cdot 10^{-1}$	3,63 $\cdot 10^{-1}$
A_{wet}^*	1,88 $\cdot 10^{-3}$	3,77 $\cdot 10^{-3}$	6,40 $\cdot 10^{-3}$
$\theta_{e,min}$ [°]	159	170	148
$\theta_{e,x}$ [°]	163	173	149
θ_a [°]	173	178	170
θ_r [°]	144	112	115
$\Delta\theta$ [°]	29	66	55
α_a [°]	40	50	66
α_r [°]	50	84	52

Tableau 6.3 : Résultats des simulations d'inclinaison pour les surfaces les plus performantes issues des familles de motifs PE, PR et PER, où l'inclinaison est orientée suivant la direction de l'axe x.

Le tableau 6.3 regroupe également les résultats des comportements de décrochage de la goutte post-traités à partir des simulations d'inclinaison. En effet, chacune des surfaces peut être comparée en fonction de l'angle d'avancée θ_a, l'angle de reculée θ_r, l'hystérèse d'angle de contact $\Delta\theta$ et les angles d'inclinaison associés α_a et α_r. Pour les trois surfaces, la valeur de l'angle d'avancée est très élevée avec $\theta_a > 170°$. La nécessité d'atteindre des valeurs élevées de θ_a pour permettre l'avancée de la ligne triple n'est pas très surprenante. En effet, la goutte étant à l'équilibre dans un régime de mouillage en suspension sur le haut des texturations, l'avancée est limitée par la mise en contact de l'interface liquide-gaz avec le prochain motif. Concernant l'angle de reculée θ_r, deux comportements sont observables en fonction de la surface. Pour la surface PE^{Opti}, l'angle de reculée est important avec $\theta_r = 144°$, soit une valeur proche de

150°. En revanche, pour les surfaces PR^{Opti} et PER^{Opti}, les angles de reculée sont plus faibles avec des valeurs de l'ordre de 110°. Ces valeurs plus faibles sont supposément dues à une plus forte accroche de la ligne triple sur les motifs, qui peut être justifiée par des valeurs plus élevées de L_T^*. De plus, cette hypothèse est appuyée par l'observation des fortes déformations de l'interface liquide-gaz dû aux effets d'accroche et d'élasticité de la ligne triple durant la reculée, comme l'illustre la figure 6.10.

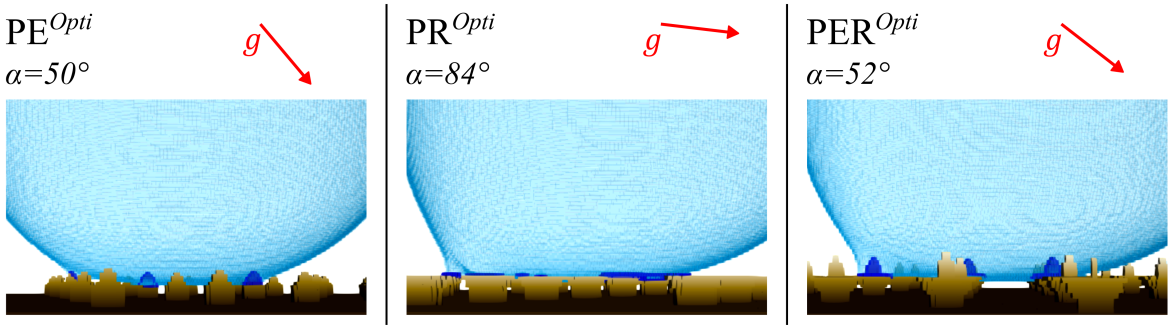

Figure 6.10 : Visualisation des effets de déformation élastique de la ligne triple sur l'interface liquide-gaz durant la reculée pour une goutte en suspension.

À partir des résultats post-traités pour les angles d'avancée et les angles de reculée, il est possible d'exprimer l'hystérèse d'angle de contact $\Delta\theta$ pour chacune des surfaces. Dû à la différence de comportement observé au niveau des angles de reculée, les surfaces exhibent des hystérèses d'angle de contact différentes. En effet, les surfaces PR^{Opti} et PER^{Opti} ont une forte hystérèse, respectivement, égale à 66° et 55°. Pour la surface PE^{Opti}, la surface la plus performante au vu du critère d'optimisation, l'hystérèse d'angle de contact est plus faible. Cependant $\Delta\theta = 29° > 10°$, ce qui n'est pas suffisant pour que la surface soit considérée comme superhydrophobe. En accord avec les valeurs d'hystérèse, les valeurs d'angles d'inclinaison pour lesquelles ont lieu l'avancée et la reculée de la goutte confirment que PE^{Opti} est l'individu le plus performant. En effet, la goutte décroche complétement de sa position initial après $\alpha = 50°$, alors qu'il faut attendre 84°et 66°d'inclinaison, respectivement, pour PR^{Opti} et PER^{Opti}. De plus, pour la surface PE^{Opti}, la goutte atteint la condition aux limites périodiques avant la 120 000ième itération, ce qui indique que suivant la direction x la goutte est bien déperlante, malgré une hystérèse supérieure à 10°, comme le montre la figure 6.11.

Ces résultats, liés à la stabilité de l'état suspendu et à la caractérisation numérique de l'hystérèse d'angle de contact des individus, permettent de discuter de la pertinence du critère η. En effet, la minimisation de η à l'état d'équilibre semble suffisante pour assurer des états d'équilibre au sommet des motifs avec peu d'imprégnation. En revanche, il n'a pas été possible de relier proportionnellement une diminution de η avec une augmentation de l'angle de contact d'équilibre ou de l'hystérèse d'angle de contact. Pour développer cette approche de couplage LBM-GA, il est possible de réaliser l'optimisation pour des études multi-critères. Par exemple, il serait envisageable d'ajouter la minimisation de la profondeur d'ancrage comme deuxième critère d'optimisation. Dans tous les cas à partir de simulation de l'état d'équilibre, il est illusoire de pouvoir estimer avec précision le comportement dynamique. Cependant, il est possible d'exprimer des critères pour tendre vers des solutions ayant de fortes probabilités d'avoir une faible hystérèse, ou une très forte hystérèse suivant la fonction recherchée.

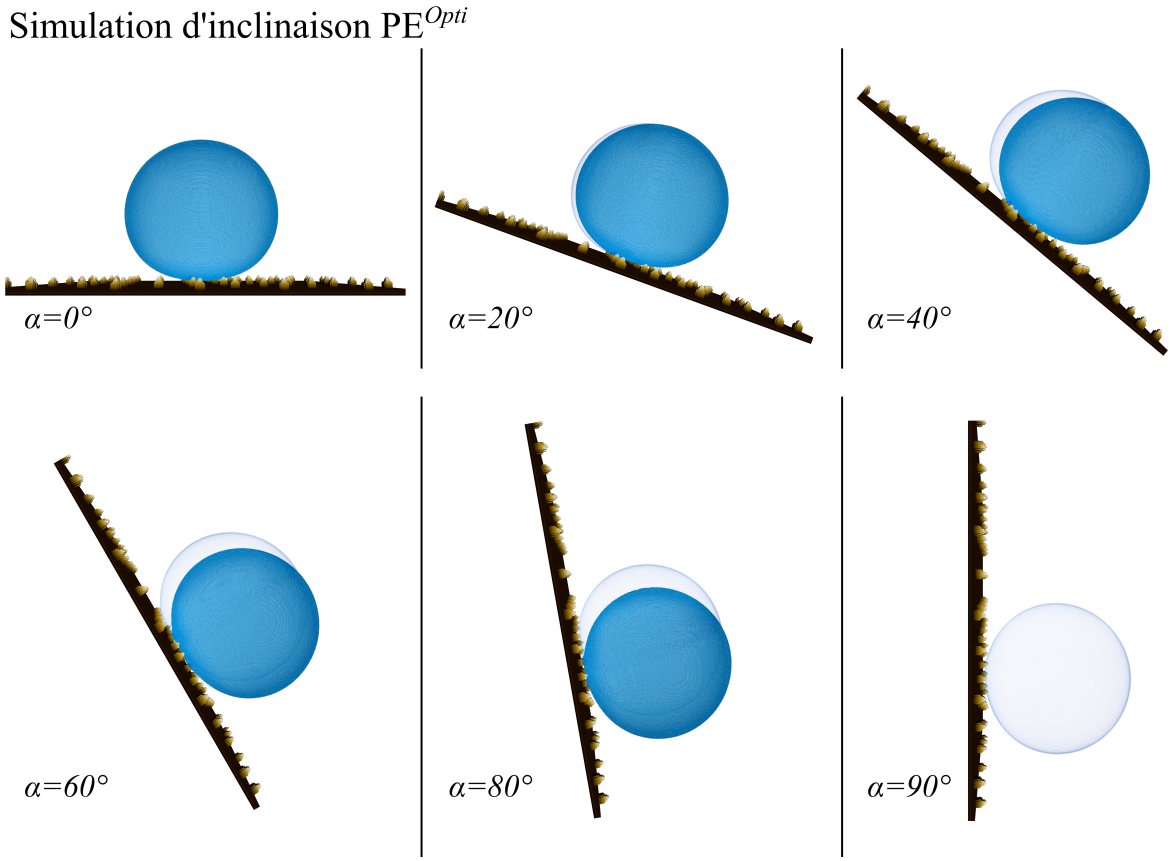

Figure 6.11 : Visualisation du comportement déperlant de la surface PE^{Opti} pour une inclinaison orientée suivant l'axe x, avec la trace de la goutte à l'image précedente en transparent.

Pour conclure, bien qu'améliorable, l'approche de couplage entre LBM et GA proposée, permet de designer des texturations complexes, dans le but d'atteindre un comportement proche de la super-hydrophobie. En effet, même si la condition $\Delta\theta < 10°$ n'est pas respectée, la solution optimale respecte la condition $\theta_e > 150°$ et montre une faible adhésion de la goutte à la surface lorsque le système est soumis à une inclinaison. Cependant, l'une des limitations majeures à la qualité des résultats, est le manque de résolution des motifs texturés. Afin de lever cette limitation et pour compléter ces travaux, il est nécessaire de pouvoir augmenter le nombre de nœuds utilisés pour définir la géométrie des texturations. Dans cette optique, deux solutions pourraient être appliquées. Premièrement, d'un point de vue du maillage, il est possible d'incorporer une méthode de maillage en *octree*. Cette solution permettrait d'augmenter localement la résolution proche du solide, tout en réduisant la résolution du maillage au niveau du gaz, autour de la goutte, là où une résolution plus fine n'est pas requise. Deuxièmement, concernant l'architecture du code, il est possible de modifier le code pour pouvoir effectuer les calculs sur plusieurs cartes graphiques en parallèle. En effet, pour l'instant, le code tourne uniquement sur une unique carte graphique. Le passage à plusieurs cartes graphiques permettra d'augmenter la mémoire maximum disponible et donc de repousser les limites en nombre de nœuds.

Conclusion générale

Les travaux réalisés dans le cadre de cette thèse, et présentés dans ce manuscrit, ont pour objectif d'approfondir l'étude du mouillage par une approche numérique basée sur la méthode Lattice-Boltzmann. À l'échelle macroscopique, le mouillage est un phénomène complexe à caractériser en raison de la non-unicité d'angle de contact, ou hystérèse, induite par les hétérogénéités de surfaces. De plus, dans le cadre de surface texturée, notamment pour les texturations topographiques, les différentes interfaces de la goutte sont difficilement observables durant les essais expérimentaux. Là où l'approche expérimentale est limitée, le développement d'une approche numérique robuste et généralisable à une grande variété d'études liées à la mouillabilité est une solution pour compléter et remplacer des campagnes expérimentales coûteuses. En effet, à condition de justifier la validité des résultats numériques, la simulation par la méthode Lattice-Boltzmann du mouillage permet un suivi précis des propriétés de mouillabilité. La simulation numérique permet d'accéder aux évolutions temporelles de l'ensemble des interfaces composant la goutte, et plus spécifiquement de l'interface liquide-solide et de l'ensemble des lignes triples.

Pour commencer, différentes simulations ont été effectuées pour valider le code numérique et tester l'ensemble des post-traitements automatisés développés dans le cadre de la thèse. Le premier point de validation concernant l'interface fluide-fluide, des simulations de gouttes libres ont été réalisées pour déterminer la valeur du pseudo-potentiel d'interaction entre le liquide et le gaz à utiliser pour assurer la stabilité de l'interface. Ensuite, le modèle des potentiels d'interaction des forces d'adhésion a été validé en retrouvant les angles de contact intrinsèques de différents matériaux pour des surfaces parfaitement planes et homogènes chimiquement. Puis l'adimensionnement du système numérique via le nombre de Bond a été vérifié à travers des comparaisons entre les courbures théoriques des gouttes soumises à la gravité avec les courbures obtenues dans les simulations. Cette dernière étape de validation a permis de justifier des valeurs de gravité appliquées dans le modèle numérique, donnant accès à des études comparatives entre les approches numériques et expérimentales.
De plus, l'ajout de la gravité a également permis de proposer des simulations d'inclinaison, qui ont rendues possible la caractérisation numérique du comportement de décrochage de la goutte sur une surface. Le phénomène d'hystérèse étant en théorie dû aux hétérogénéités de surface, topographiques ou chimiques, des simulations d'inclinaison sur des surfaces planes et parfaitement homogènes ont été réalisées. Comme attendus, ces premiers résultats de simulations n'ont montré aucun phénomène d'hystérèse avec un décrochage de la goutte dès le début de l'inclinaison.

Dans un second temps, les approches numériques et expérimentales ont été mises en parallèle pour le cas spécifique d'une surface texturée topographiquement. Le substrat en PDMS étudié a été obtenu après la réplication négative d'un moule texturé par ablation de matière avec un laser femtoseconde, comportant des géométries en forme de lignes de crêtes. Pour cette surface, les résultats issus des simulations LBM ont corroboré les observations expérimentales, ce qui a

permis une fois de plus de valider l'approche numérique proposée dans ces travaux. En complément, des simulations donnant accès à plus d'information sur le comportement de la goutte, notamment à propos de l'interface liquide-solide, ont été réalisées pour étudier l'impact de la gravité sur l'équilibre de la goutte ainsi que l'influence de la chimie de surface.
Concernant l'étude sur l'impact de la gravité, les résultats ont démontré les effets de la gravité sur le régime d'équilibre. En effet, malgré un nombre de Bond faible, où l'influence de la gravité est négligeable devant les forces capillaires sur la forme de la calotte sphérique, la gravité permet néanmoins à la goutte d'imprégner davantage la texturation avec une profondeur d'ancrage plus importante.
D'un autre côté, l'approche numérique a permis de prédire pour la même surface la différence de comportement en fonction de la chimie de surface. Pour des chimies moins hydrophobes voire hydrophiles, la goutte a atteint des régimes imprégnés ayant des comportements très éloignés du régime suspendu observé avec le PDMS. Contrairement au régime suspendu, les régimes imprégnés exhibent une forte anisotropie du comportement de mouillabilité induite par l'anisotropie structurel des lignes de crêtes. De plus, l'étude numérique systématique de l'interface liquide-solide à permis de mettre en évidence des comportements de piégeage de bulle d'air sous la goutte, qui n'auraient pu être identifiés expérimentalement.

Suite à cette première étude consacrée à une surface réelle, plusieurs séries de simulations, sur des surfaces texturées modèles, ont été effectuées pour analyser l'impact des texturations sur l'étalement de la goutte. Deux configurations de motifs ont été étudiées, des plots carrés et des rainures, avec des pentes verticales, et dont l'espacement des motifs est variable. Ces simulations ont été paramétrées avec une chimie de surface hydrophile, du PET plus précisément, pour atteindre des régimes imprégnés. Les résultats de simulation, vis à vis de l'état d'équilibre n'ont pas permis d'observer les tendances, en fonction de l'espacement, prédites par les modèles théoriques du mouillage. Cependant, une analyse dynamique de l'étalement, jusqu'à l'état d'équilibre, a permis de mettre en évidence les différentes temporalités des dynamiques d'étalement suivant les différentes directions. D'après ces observations dynamiques, le comportement à l'équilibre de la goutte s'explique en fonction de l'historique d'étalement plutôt que par les modèles basés sur la topographie de surfaces sous la goutte. En effet, la texturation qu'elle soit chimique ou topographique influe sur la vitesse d'étalement en fonction des différentes directions, ce qui induit des directions favorisées d'étalement pour la goutte. Localement, les texturations ont un rôle de perturbation de l'étalement, qui par des phénomènes d'accroche limitent l'étalement, lors des changements de chimie ou de pentes. Dans le cas de texturation topographique, l'étalement de la goutte est également mis en compétition avec l'imprégnation de la goutte. Si l'imprégnation est plus lente que l'étalement, cela mène aux piégeages de bulles d'air sous la goutte.
Pour compléter ces observations, des simulations d'inclination, ont été réalisées. Lorsque soumises à une inclinaison, il a été montré que les gouttes en équilibre sur les surfaces modèles ont des comportements très différents en fonctions du type de réseau, auquel s'ajoute une forte dépendance à l'orientation de l'inclinaison pour les surfaces composées de rainures. En effet, si l'inclinaison est effectuée dans l'orientation parallèle aux rainures, l'hystérèse d'angle de contact est nulle de manière similaire au résultat pour une surface plane. En revanche, pour une orientation perpendiculaire aux rainures, la goutte ne décroche jamais complètement de la surface et est encore plus adhésive que pour les réseaux de plots. De plus, comme pour les résultats statiques, aucune différence significative du comportement n'est à noter en fonction de l'espacement.

En parallèle, une approche numérique pour designer des surfaces texturées fonctionnelles dans le cadre de la mouillabilité a été proposée. En effet, une méthode d'optimisation de forme de

motif texturé a été développée en couplant les simulations du mouillage par le code LBM avec un algorithme génétique. Cette nouvelle démarche a été appliquée au cas de la fonctionnalisation d'un substrat hydrophile, en PET, vers un comportement super-hydrophobe.
Dans ce cas d'étude, il a été choisi d'utiliser un critère d'optimisation lié à la minimisation de l'interface liquide-solide, en définissant un critère mixte en fonction de la longueur de ligne triple totale et de l'aire de contact liquide-solide. Les résultats ont montré que malgré l'absence de critère sur l'angle de contact, l'angle de contact à l'équilibre des solutions a tendance à augmenter au cours de l'optimisation. De plus, à partir d'un simple critère sur l'état d'équilibre, il a été montré que les meilleurs individus exhibent un régime de goutte en suspension qui est favorable à une hystérèse faible. Malheureusement, ces premiers travaux, présentés dans ce manuscrit, semblent avoir abouti à un optimum local. Bien que mettant en avant les limites de la méthode, ces premiers résultats ont permis de valider la démarche.
Pour améliorer cette approche, plusieurs points peuvent être discutés. Premièrement, de nouveaux opérateurs génétiques peuvent être incorporés pour favoriser l'exploration du domaine d'étude et la conservation de la diversité parmi les solutions de l'optimisation. Deuxièmement, la méthode de définition de motifs pourrait être repensée pour définir directement les pentes locales en fonction de la hauteur des textures, tout en conservant la possibilité de surfaces complexes et réentrantes. Enfin, le critère d'optimisation peut être complété en ajoutant, à la minimisation de l'interface liquide-solide, la minimisation de la profondeur d'ancrage. À l'avenir, il serait également pertinent de tenir compte de la faisabilité des texturations dans le but de tester les surfaces designées par l'approche LBM-GA expérimentalement.

Pour conclure, ce manuscrit de thèse regroupe différentes études numériques du mouillage, toutes ayant été uniquement possibles par le développement d'un outil robuste de simulation. Cependant, il existe encore de nombreuses façons d'améliorer cet outil. Au vu des travaux réalisé dans cette thèse, le plus limitant à l'usage du code, est la limitation en mémoire et donc le manque de résolution des surfaces texturées discrétisées. Une fois cette première limite dépassée, il serait intéressant d'inclure d'autres modèles d'interaction entre les fluides pour augmenter le ratio de masse volumique et de viscosité dans les simulations.

Références

[1] P.-G. de Gennes, F. Brochard-Wyart, and D. Quéré, *Gouttes, bulles, perles et ondes*. Belin, 2005, ISBN: 2-7011-4055-2.

[2] K. L. Mittal, *Contact angle, wettability & adhesion*. VSP publishing, 2003, ISBN: 978-90-6764-391-7.

[3] J. W. Drelich *et al.*, "Contact angles: History of over 200 years of open questions," *Surface innovations*, vol. 8, no. 1-2, pp. 3–27, 2020. DOI: 10.1680/jsuin.19.00007.

[4] A. Marchand, J. H. Weijs, J. H. Snoeijer, and B. Andreotti, "Why is surface tension a force parallel to the interface?" *American journal of physics*, vol. 79, no. 10, pp. 999–1008, 2011. DOI: 10.1119/1.3619866.

[5] J. W. Gibbs, "Equilibrium of Heterogeneous Substances," *Connecticut academy of arts and sciences*, 1874. DOI: 10.5479/sil.421748.39088007099781.

[6] W. D. Harkins and A. Feldman, "Films. The Spreading of Liquids and the Spreading Coefficent," *Journal of the american chemical society*, vol. 44, no. 12, pp. 2665–2685, 1922. DOI: 10.1021/ja01433a001.

[7] S. Ross and P. Becher, "The history of the spreading coefficient," *Journal of colloid and interface science*, vol. 149, no. 2, pp. 575–579, 1992. DOI: 10.1016/0021-9797(92)90445-R.

[8] J. F. Joanny and P. G. de Gennes, "A model for contact angle hysteresis," *The journal of chemical physics*, vol. 81, p. 12, 1984. DOI: 10.1063/1.447337.

[9] H. Y. Erbil, *Surface chemistry of solid and liquid interfaces*. Blackwell Pub, 2006, ISBN: 978-1-4051-1968-9.

[10] H. B. Eral, D. J. C. M. 't Mannetje, and J. M. Oh, "Contact angle hysteresis: A review of fundamentals and applications," *Colloid and polymer science*, vol. 291, no. 2, pp. 247–260, 2013. DOI: 10.1007/s00396-012-2796-6.

[11] C. Extrand and Y. Kumagai, "An Experimental Study of Contact Angle Hysteresis," *Journal of colloid and interface science*, vol. 191, no. 2, pp. 378–383, 1997. DOI: 10.1006/jcis.1997.4935.

[12] H.-J. Butt *et al.*, "Contact angle hysteresis," *Current opinion in colloid & interface science*, vol. 59, p. 101 574, 2022. DOI: 10.1016/j.cocis.2022.101574.

[13] M. Nosonovsky and B. Bhushan, "Superhydrophobic surfaces and emerging applications: Non-adhesion, energy, green engineering," *Current opinion in colloid & interface science*, vol. 14, no. 4, pp. 270–280, 2009. DOI: 10.1016/j.cocis.2009.05.004.

[14] Q. Legrand, S. Benayoun, and S. Valette, "Biomimetic Approach for the Elaboration of Highly Hydrophobic Surfaces: Study of the Links between Morphology and Wettability," *Biomimetics*, vol. 6, no. 2, p. 38, 2021. DOI: 10.3390/biomimetics6020038.

[15] T. Young, "III. An essay on the cohesion of fluids," *Philosophical transactions of the royal society of london*, vol. 95, pp. 65–87, 1805. DOI: 10.1098/rstl.1805.0005.

[16] M. E. Schrader, "Young-Dupre Revisited," *Langmuir*, vol. 11, no. 9, pp. 3585–3589, 1995. DOI: 10.1021/la00009a049.

[17] R. N. Wenzel, "Resistance of solid surfaces to wetting by water," *Industrial & engineering chemistry*, vol. 28, no. 8, pp. 988–994, 1936. DOI: 10.1021/ie50320a024.

[18] A. B. D. Cassie and S. Baxter, "Wettability of porous surfaces," *Transactions of the faraday society*, vol. 40, p. 546, 1944. DOI: 10.1039/tf9444000546.

[19] M. Miwa, A. Nakajima, A. Fujishima, K. Hashimoto, and T. Watanabe, "Effects of the Surface Roughness on Sliding Angles of Water Droplets on Superhydrophobic Surfaces," *Langmuir*, vol. 16, no. 13, pp. 5754–5760, 2000. DOI: 10.1021/la991660o.

[20] A. Marmur, "Wetting on Hydrophobic Rough Surfaces: To Be Heterogeneous or Not To Be?" *Langmuir*, vol. 19, no. 20, pp. 8343–8348, 2003. DOI: 10.1021/la0344682.

[21] D. C. Pease, "The Significance of the Contact Angle in Relation to the Solid Surface," *The journal of physical chemistry*, vol. 49, no. 2, pp. 107–110, 1945. DOI: 10.1021/j150440a007.

[22] F. E. Bartell and J. W Shepard, "Surface roughness as related to hysteresis of contact angles. II. The systems paraffin-3 molar calcium chloride solution-air and paraffin-glycerol-air," *Journal of physical chemistry*, 1953. DOI: 10.1016/0095-8522(53)90040-3.

[23] C. W. Extrand, "Contact Angles and Hysteresis on Surfaces with Chemically Heterogeneous Islands," *Langmuir*, vol. 19, no. 9, pp. 3793–3796, 2003. DOI: 10.1021/la0268350.

[24] L. Gao and T. J. McCarthy, "How Wenzel and Cassie Were Wrong," *Langmuir*, vol. 23, no. 7, pp. 3762–3765, 2007. DOI: 10.1021/la062634a.

[25] G. McHale, "Cassie and Wenzel: Were They Really So Wrong?" *Langmuir*, vol. 23, no. 15, pp. 8200–8205, 2007. DOI: 10.1021/la7011167.

[26] E. Bormashenko, "Why does the Cassie–Baxter equation apply?" *Colloids and surfaces a: physicochemical and engineering aspects*, vol. 324, no. 1-3, pp. 47–50, 2008. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2008.03.025.

[27] A. Marmur and E. Bittoun, "When Wenzel and Cassie Are Right: Reconciling Local and Global Considerations," *Langmuir*, vol. 25, no. 3, pp. 1277–1281, 2009. DOI: 10.1021/la802667b.

[28] E. Bormashenko, "General equation describing wetting of rough surfaces," *Journal of colloid and interface science*, vol. 360, no. 1, pp. 317–319, 2011. DOI: 10.1016/j.jcis.2011.04.051.

[29] H. Y. Erbil, "The debate on the dependence of apparent contact angles on drop contact area or three-phase contact line: A review," *Surface science reports*, vol. 69, no. 4, pp. 325–365, 2014. DOI: 10.1016/j.surfrep.2014.09.001.

[30] R. H. Dettre and R. E. Johnson, *Contact Angle Hysteresis II. Contact Angle Measurements on Rough Surfaces*. American Chemical Society, 1964, vol. 43, ISBN: 978-0-8412-0044-9 978-0-8412-2212-0. DOI: 10.1021/ba-1964-0043.

[31] B. He, N. A. Patankar, and J. Lee, "Multiple Equilibrium Droplet Shapes and Design Criterion for Rough Hydrophobic Surfaces," *Langmuir*, vol. 19, no. 12, pp. 4999–5003, 2003. DOI: 10.1021/la0268348.

[32] N. A. Patankar, "Transition between Superhydrophobic States on Rough Surfaces," *Langmuir*, vol. 20, no. 17, pp. 7097–7102, 2004. DOI: 10.1021/la049329e.

[33] C Ishino, K Okumura, and D Quéré, "Wetting transitions on rough surfaces," *Europhysics letters*, vol. 68, no. 3, pp. 419–425, 2004. DOI: 10.1209/epl/i2004-10206-6.

[34] N. Michael and B. Bhushan, "Hierarchical roughness makes superhydrophobic states stable," *Microelectronic engineering*, vol. 84, no. 3, pp. 382–386, 2007. DOI: 10.1016/j.mee.2006.10.054.

[35] C. W. Extrand, "Model for Contact Angles and Hysteresis on Rough and Ultraphobic Surfaces," *Langmuir*, vol. 18, no. 21, pp. 7991–7999, 2002. DOI: 10.1021/la025769z.

[36] C. W. Extrand, "Criteria for Ultralyophobic Surfaces," *Langmuir*, vol. 20, no. 12, pp. 5013–5018, 2004. DOI: 10.1021/la036481s.

[37] G. Whyman and E. Bormashenko, "How to Make the Cassie Wetting State Stable?" *Langmuir*, vol. 27, no. 13, pp. 8171–8176, 2011. DOI: 10.1021/la2011869.

[38] E. Bormashenko, "Progress in understanding wetting transitions on rough surfaces," *Advances in colloid and interface science*, p. 12, 2015. DOI: 10.1016/j.cis.2014.02.009.

[39] S. Utech, K. Bley, J. Aizenberg, and N. Vogel, "Tailoring re-entrant geometry in inverse colloidal monolayers to control surface wettability," *Journal of materials chemistry a*, vol. 4, no. 18, pp. 6853–6859, 2016. DOI: 10.1039/C5TA08992A.

[40] C. Furmidge, "Studies at phase interfaces. I. The sliding of liquid drops on solid surfaces and a theory for spray retention," *Journal of colloid science*, vol. 17, no. 4, pp. 309–324, 1962. DOI: 10.1016/0095-8522(62)90011-9.

[41] A. L. Dubov, J. Teisseire, and E. Barthel, "Elastic instability and contact angles on hydrophobic surfaces with periodic textures," *Europhysics letters*, vol. 97, no. 2, p. 26 003, 2012. DOI: 10.1209/0295-5075/97/26003.

[42] A. L. Dubov, A. Mourran, M. Möller, and O. I. Vinogradova, "Contact angle hysteresis on superhydrophobic stripes," *The journal of chemical physics*, vol. 141, no. 7, p. 074 710, 2014. DOI: 10.1063/1.4892801.

[43] W. Choi, A. Tuteja, J. M. Mabry, R. E. Cohen, and G. H. McKinley, "A modified Cassie–Baxter relationship to explain contact angle hysteresis and anisotropy on non-wetting textured surfaces," *Journal of colloid and interface science*, vol. 339, no. 1, pp. 208–216, 2009. DOI: 10.1016/j.jcis.2009.07.027.

[44] I. 25178-2, *Geometrical product specifications (GPS) — Surface texture: Areal — Part 2: Terms, definitions and surface texture parameters*, 2021.

[45] E. Gadelmawla, M. Koura, T. Maksoud, I. Elewa, and H. Soliman, "Roughness parameters," *Journal of materials processing technology*, vol. 123, no. 1, pp. 133–145, 2002. DOI: 10.1016/S0924-0136(02)00060-2.

[46] S. A. Kulinich and M. Farzaneh, "How Wetting Hysteresis Influences Ice Adhesion Strength on Superhydrophobic Surfaces," *Langmuir*, vol. 25, no. 16, pp. 8854–8856, 2009. DOI: 10.1021/la901439c.

[47] Y. H. Yeong, E. Loth, J. Sokhey, and A. Lambourne, "Ice Adhesion Strength on Hydrophobic and Superhydrophobic Coatings," in *AIAA Atmospheric and Space Environments Conference*, 2014, ISBN: 978-1-62410-291-2. DOI: 10.2514/6.2014-2063.

[48] M. Bigerelle and A. Iost, "A numerical method to calculate the Abbott parameters: A wear application," *Tribology international*, vol. 40, no. 9, pp. 1319–1334, 2007. DOI: 10.1016/j.triboint.2006.12.007.

[49] K. Kubiak and T. Mathia, "Anisotropic Wetting of Hydrophobic and Hydrophilic Surfaces–Modelling by Lattice Boltzmann Method," *Procedia engineering*, vol. 79, pp. 45–48, 2014. DOI: 10.1016/j.proeng.2014.06.307.

[50] Q. Legrand, S. Benayoun, and S. Valette, "Quantification and modelling of anisotropic wetting of textured surfaces," *Applied surface science*, p. 155 606, 2022. DOI: 10.1016/j.apsusc.2022.155606.

[51] V. Belaud, S. Valette, G. Stremsdoerfer, M. Bigerelle, and S. Benayoun, "Wettability versus roughness: Multi-scales approach," *Tribology international*, vol. 82, pp. 343–349, 2015. DOI: 10.1016/j.triboint.2014.07.002.

[52] T. Krüger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, and E. M. Viggen, *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice*. Springer International Publishing, 2017, ISBN: 978-3-319-44649-3. DOI: 10.1007/978-3-319-44649-3.

[53] K. Wijesooriya, D. Mohotti, C.-K. Lee, and P. Mendis, "A technical review of computational fluid dynamics (CFD) applications on wind design of tall buildings and structures: Past, present and future," *Journal of building engineering*, vol. 74, p. 106 828, 2023. DOI: 10.1016/j.jobe.2023.106828.

[54] A. A. Mohamad, *Lattice Boltzmann method: fundamentals and engineering applications with computer codes*. Springer, 2011, ISBN: 978-0-85729-454-8 978-0-85729-455-5.

[55] L. Kinsler, A. Frey, A. Coppens, and J. Sanders, *Fundamentals of Acoustics*. Wiley, 2000, ISBN: 0-471-84789-5.

[56] N. Maquignon, "Vers un modèle multiphases et multicomposants (MPMC) de type Lattice Boltzmann Method (LBM) pour la simulation dynamique d'un fluide cyogénique dans l'eau," Ph.D. dissertation, Université du Littoral Côte d'Opale, 2017.

[57] S. Chapman and T. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases*. Cambridge Mathematical Library, 1952, ISBN: 0-521-40844-X.

[58] D. Wolf-Gladrow, *Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models*. Springer, 2005, ISBN: 3-540-66973-6.

[59] Y. H Qian, D D'Humières, and P Lallemand, "Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation," *Europhysics letters*, vol. 17, no. 6, pp. 479–484, 1992. DOI: 10.1209/0295-5075/17/6/001.

[60] S. Succi, "Lattice Boltzmann Methods for Multiscale Fluid Problems," in *Handbook of Materials Modeling*, Springer, 2005, p. 12, ISBN: 1-4020-3287-0.

[61] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross, and M. Krook, "A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems," *Physical review*, vol. 94, no. 3, pp. 511–525, 1954. DOI: 10.1103/PhysRev.94.511.

[62] D. d'Humières and I. Ginzburg, "Viscosity independent numerical errors for Lattice Boltzmann models: From recurrence equations to "magic" collision numbers," *Computers & mathematics with applications*, vol. 58, no. 5, pp. 823–840, 2009. DOI: 10.1016/j.camwa.2009.02.008.

[63] G. Silva and V. Semiao, "Truncation errors and the rotational invariance of three-dimensional lattice models in the lattice Boltzmann method," *Journal of computational physics*, vol. 269, pp. 259–279, 2014. DOI: 10.1016/j.jcp.2014.03.027.

[64] D. d'Humières, I. Ginzburg, M. Krafczyk, P. Lallemand, and L.-S. Luo, "Multiple–relaxation–time lattice Boltzmann models in three dimensions," *Philosophical transactions of the royal society of london. series a: mathematical, physical and engineering sciences*, vol. 360, no. 1792, pp. 437–451, 2002. DOI: 10.1098/rsta.2001.0955.

[65] I. Ginzburg, "Equilibrium-type and link-type lattice Boltzmann models for generic advection and anisotropic-dispersion equation," *Advances in water resources*, vol. 28, no. 11, pp. 1171–1195, 2005. DOI: 10.1016/j.advwatres.2005.03.004.

[66] M. Geier, M. Schönherr, A. Pasquali, and M. Krafczyk, "The cumulant lattice Boltzmann equation in three dimensions: Theory and validation," *Computers & mathematics with applications*, vol. 70, no. 4, pp. 507–547, 2015. DOI: 10.1016/j.camwa.2015.05.001.

[67] M. Geier, A. Pasquali, and M. Schönherr, "Parametrization of the cumulant lattice Boltzmann method for fourth order accurate diffusion part I: Derivation and validation," *Journal of computational physics*, vol. 348, pp. 862–888, 2017. DOI: 10.1016/j.jcp.2017.05.040.

[68] M. C. Sukop and D. T. Thorne, *Lattice Boltzmann Modeling: An Introduction for Geoscientists and Engineers*. Springer Berlin Heidelberg, 2006, ISBN: 978-3-540-27981-5 978-3-540-27982-2. DOI: 10.1007/978-3-540-27982-2.

[69] A. J. C. Ladd, "Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 1. Theoretical foundation," *Journal of fluid mechanics*, vol. 271, pp. 285–309, 1994. DOI: 10.1017/S0022112094001771.

[70] M. Junk and Z. Yang, "One-point boundary condition for the lattice Boltzmann method," *Physical review e*, vol. 72, no. 6, p. 066 701, 2005. DOI: 10.1103/PhysRevE.72.066701.

[71] X. Shan and H. Chen, "Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components," *Physical review e*, p. 6, 1993. DOI: 10.1103/PhysRevE.47.1815.

[72] M. R. Swift, W. R. Osborn, and J. M. Yeomans, "Lattice Boltzmann Simulation of Nonideal Fluids," *Physical review letters*, vol. 75, no. 5, p. 5, 1995.

[73] C. Y. Wang and P Cheng, "A multiphase mixture model for multiphase, multicomponent transport in capillary porous media I. Model development," *International journal of heat and mass transfer*, 1996.

[74] L. Chen, "A critical review of the pseudopotential multiphase lattice Boltzmann model: Methods and applications," *International journal of heat and mass transfer*, p. 27, 2014.

[75] L. Amaya-Bower and T. Lee, "Single bubble rising dynamics for moderate Reynolds number using Lattice Boltzmann Method," *Computers & fluids*, vol. 39, no. 7, pp. 1191–1207, 2010. DOI: 10.1016/j.compfluid.2010.03.003.

[76] X. Shan and H. Chen, "Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation," *Physical review e*, p. 8, 1994.

[77] L. Schaefer and J. Bao, "Lattice Boltzmann equation model for multi-component multiphase flow with high density ratios," *Applied mathematical modelling*, p. 12, 2013. DOI: 10.1016/j.apm.2012.04.048.

[78] N. S. Martys and H. Chen, "Simulation of multicomponent fluids in complex three-dimensional geometries by the lattice Boltzmann method," *Physical review e*, vol. 53, no. 1, pp. 743–750, 1996. DOI: 10.1103/PhysRevE.53.743.

[79] M. C. Sukop and D. Or, "Lattice Boltzmann method for modeling liquid-vapor interface configurations in porous media," *Water resources research*, p. 11, 2004. DOI: 10.1029/2003WR002333.

[80] H. Huang, D. T. Thorne, M. G. Schaap, and M. C. Sukop, "Proposed approximation for contact angles in Shan-and-Chen-type multicomponent multiphase lattice Boltzmann models," *Physical review e*, p. 6, 2007. DOI: 10.1103/PhysRevE.76.066701.

[81] H. Huang, Z. Li, S. Liu, and X.-y. Lu, "Shan-and-Chen-type multiphase lattice Boltzmann study of viscous coupling effects for two-phase flow in porous media," *International journal for numerical methods in fluids*, p. 14, 2008. DOI: 10.1002/fld.1972.

[82] V. Neyrand, J.-M. Bergheau, S. Benayoun, and S. Valette, "Numerical simulation of wetting on a chemically textured surface with a large intrinsic contact angle ratio by the Lattice Boltzmann Method," *Experimental and computational multiphase flow*, 2021. DOI: 10.1007/s42757-020-0091-1.

[83] X. Shan and G. Doolen, "Multicomponent lattice-Boltzmann model with interparticle interaction," *Journal of statistical physics*, vol. 81, no. 1-2, pp. 379–393, 1995. DOI: 10.1007/BF02179985.

[84] A. L. Kupershtokh, D. A. Medvedev, and D. I. Karpov, "On equations of state in a lattice Boltzmann method," *Omputers and mathematics with applications*, p. 10, 2009. DOI: 10.1016/j.camwa.2009.02.024.

[85] A. L. Kupershtokh, "A lattice Boltzmann equation method for real fluids with the equation of state known in tabular form only in regions of liquid and vapor phases," *Computers & mathematics with applications*, p. 12, 2011. DOI: 10.1016/j.camwa.2010.06.032.

[86] Z. Guo, C. Zheng, and B. Shi, "Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method," *Physical review e*, p. 6, 2002. DOI: 10.1103/PhysRevE.65.046308.

[87] J. Tölke, G. D. Prisco, and Y. Mu, "A lattice Boltzmann method for immiscible two-phase Stokes flow with a local collision operator," *Computers & mathematics with applications*, vol. 65, no. 6, pp. 864–881, 2013. DOI: 10.1016/j.camwa.2012.05.018.

[88] P. Yuan and L. Schaefer, "Equations of state in a lattice Boltzmann model," *Physics of fluids*, p. 12, 2006. DOI: 10.1063/1.2187070.

[89] M Sbragaglia, R Benzi, L Biferale, S Succi, K Sugiyama, and F Toschi, "Generalized lattice Boltzmann method with multirange pseudopotential," *Physical review e*, p. 13, 2007. DOI: 10.1103/PhysRevE.75.026702.

[90] J. M. Benyus, *Biomimicry: Innovation Inspired by Nature*. Harper Perennial, 2002, ISBN: 0-06-053322-6.

[91] B. Bhushan, "Biomimetics: Lessons from nature–an overview," *Philosophical transactions of the royal society a: mathematical, physical and engineering sciences*, vol. 367, no. 1893, pp. 1445–1486, 2009. DOI: 10.1098/rsta.2009.0011.

[92] P. Nguyen, "Innovation inspired by nature," *Ecos*, 2006.

[93] K. Autumn and N. Gravish, "Gecko adhesion: Evolutionary nanotechnology," *Philosophical transactions of the royal society a: mathematical, physical and engineering sciences*, vol. 366, no. 1870, pp. 1575–1590, 2008. DOI: 10.1098/rsta.2007.2173.

[94] H. Gao, X. Wang, H. Yao, S. Gorb, and E. Arzt, "Mechanics of hierarchical adhesion structures of geckos," *Mechanics of materials*, vol. 37, no. 2-3, pp. 275–285, 2005. DOI: 10.1016/j.mechmat.2004.03.008.

[95] A. Tero *et al.*, "Rules for Biologically Inspired Adaptive Network Design," *Science*, vol. 327, no. 5964, pp. 439–442, 2010. DOI: 10.1126/science.1177894.

[96] S.-J. Kim and J.-H. Lee, "Parametric shape modification and application in a morphological biomimetic design," *Advanced engineering informatics*, vol. 29, no. 1, pp. 76–86, 2015. DOI: 10.1016/j.aei.2014.09.006.

[97] A. Adamatzky and J. Jones, "Road planning with slime mould: If Physarum built motorways it would route M6/M74 through Newcastle," *International journal of bifurcation and chaos*, vol. 20, no. 10, pp. 3065–3084, 2010. DOI: 10.1142/S0218127410027568.

[98] W. Barthlott and C. Neinhuis, "Purity of the sacred lotus, or escape from contamination in biological surfaces," *Planta*, vol. 202, no. 1, pp. 1–8, 1997. DOI: 10.1007/s004250050096.

[99] W. Barthlott, M. Mail, B. Bhushan, and K. Koch, "Plant Surfaces: Structures and Functions for Biomimetic Innovations," *Nano-micro letters*, vol. 9, no. 2, p. 23, 2017. DOI: 10.1007/s40820-016-0125-1.

[100] T. Darmanin and F. Guittard, "Superhydrophobic and superoleophobic properties in nature," *Materials today*, vol. 18, no. 5, pp. 273–285, 2015. DOI: 10.1016/j.mattod.2015.01.001.

[101] D. Ebert and B. Bhushan, "Wear-resistant rose petal-effect surfaces with superhydrophobicity and high droplet adhesion using hydrophobic and hydrophilic nanoparticles," *Journal of colloid and interface science*, vol. 384, no. 1, pp. 182–188, 2012. DOI: 10.1016/j.jcis.2012.06.070.

[102] Q. Legrand, "Modélisation expérimentale et numérique du mouillage sur surfaces texturées - Application au design de surface à propriété de déperlance," Ph.D. dissertation, École Centrale de Lyon, 2022.

[103] X. Gao and L. Jiang, "Water-repellent legs of water striders," *Nature*, vol. 432, no. 7013, pp. 36–36, 2004. DOI: 10.1038/432036a.

[104] B. Bhushan and E. K. Her, "Fabrication of Superhydrophobic Surfaces with High and Low Adhesion Inspired from Rose Petal," *Langmuir*, vol. 26, no. 11, pp. 8207–8217, 2010. DOI: 10.1021/la904585j.

[105] Y. Zheng, X. Gao, and L. Jiang, "Directional adhesion of superhydrophobic butterfly wings," *Soft matter*, vol. 3, no. 2, pp. 178–182, 2007. DOI: 10.1039/B612667G.

[106] H. Zhao *et al.*, "Synthetic Butterfly Scale Surfaces with Compliance-Tailored Anisotropic Drop Adhesion," *Advanced materials*, vol. 31, no. 14, p. 1 807 686, 2019. DOI: 10.1002/adma.201807686.

[107] U. Bauer and W. Federle, "The insect-trapping rim of Nepenthes pitchers: Surface structure and function," *Plant signaling & behavior*, vol. 4, no. 11, pp. 1019–1023, 2009. DOI: 10.4161/psb.4.11.9664.

[108] B. Dean and B. Bhushan, "Shark-skin surfaces for fluid-drag reduction in turbulent flow: A review," *Philosophical transactions of the royal society a: mathematical, physical and engineering sciences*, vol. 368, no. 1929, pp. 4775–4806, 2010. DOI: 10.1098/rsta.2010.0201.

[109] Y. Bami Chatenet and S. Valette, "Mechanical criteria and analytical modeling of mixed-state wetting on multiscale surfaces: Of the importance of nanoscale topography for water-repellency," *Colloids and surfaces a: physicochemical and engineering aspects*, vol. 672, p. 131 752, 2023. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2023.131752.

[110] W. Barthlott *et al.*, "Classification and terminology of plant epicuticular waxes," *Botanical journal of the linnean society*, vol. 126, no. 3, pp. 237–260, 1998. DOI: 10.1111/j.1095-8339.1998.tb02529.x.

[111] R. Jetter and S. Schäffer, "Chemical Composition of the *Prunus laurocerasus* Leaf Surface. Dynamic Changes of the Epicuticular Wax Film during Leaf Development," *Plant physiology*, vol. 126, no. 4, pp. 1725–1737, 2001. DOI: 10.1104/pp.126.4.1725.

[112] U. U. Ghosh, S. Nair, A. Das, R. Mukherjee, and S. DasGupta, "Replicating and resolving wetting and adhesion characteristics of a Rose petal," *Colloids and surfaces a: physicochemical and engineering aspects*, vol. 561, pp. 9–17, 2019. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2018.10.028.

[113] W. Barthlott *et al.*, "The Salvinia Paradox: Superhydrophobic Surfaces with Hydrophilic Pins for Air Retention Under Water," *Advanced materials*, vol. 22, no. 21, pp. 2325–2328, 2010. DOI: 10.1002/adma.200904411.

[114] J. Nickerl, M. Tsurkan, R. Hensel, C. Neinhuis, and C. Werner, "The multi-layered protective cuticle of Collembola: A chemical analysis," *Journal of the royal society interface*, vol. 11, no. 99, p. 20 140 619, 2014. DOI: 10.1098/rsif.2014.0619.

[115] H. Gundersen, H. P. Leinaas, and C. Thaulow, "Surface Structure and Wetting Characteristics of Collembola Cuticles," *Plos one*, vol. 9, no. 2, M. J. Buehler, Ed., e86783, 2014. DOI: 10.1371/journal.pone.0086783.

[116] M. A. Giraldo and D. G. Stavenga, "Brilliant iridescence of Morpho butterfly wing scales is due to both a thin film lower lamina and a multilayered upper lamina," *Journal of comparative physiology a*, vol. 202, no. 5, pp. 381–388, 2016. DOI: 10.1007/s00359-016-1084-1.

[117] B. Bhushan, Y. C. Jung, A. Niemietz, and K. Koch, "Lotus-Like Biomimetic Hierarchical Structures Developed by the Self-Assembly of Tubular Plant Waxes," *Langmuir*, vol. 25, no. 3, pp. 1659–1666, 2009. DOI: 10.1021/la802491k.

[118] Y. Ma, X. Cao, X. Feng, Y. Ma, and H. Zou, "Fabrication of super-hydrophobic film from PMMA with intrinsic water contact angle below 90°," *Polymer*, vol. 48, no. 26, pp. 7455–7460, 2007. DOI: 10.1016/j.polymer.2007.10.038.

[119] J. Choi, W. Jo, S. Y. Lee, Y. S. Jung, S.-H. Kim, and H.-T. Kim, "Flexible and Robust Superomniphobic Surfaces Created by Localized Photofluidization of Azopolymer Pillars," *Acs nano*, vol. 11, no. 8, pp. 7821–7828, 2017. DOI: 10.1021/acsnano.7b01783.

[120] S. Martin, P. S. Brown, and B. Bhushan, "Fabrication techniques for bioinspired, mechanically-durable, superliquiphobic surfaces for water, oil, and surfactant repellency," *Advances in colloid and interface science*, p. 23, 2017. DOI: 10.1016/j.cis.2017.01.004.

[121] E Stratakis, "Laser engineering of biomimetic surfaces," *Materials science*, p. 47, 2020. DOI: 10.1016/j.mser.2020.100562.

[122] C. Darwin, *On the Origin of Species*. John Murray, 1859, ISBN: 0-565-09502-1.

[123] G. Mendel, *Versuche über Pflanzen-Hybriden*. Brünn, 1866.

[124] T. Dobzhansky, *Genetics and the origin of species*. Columbia University Press, 1937, ISBN: 0-231-05475-0.

[125] E. Mayr, *Systematics and the Origin of Species*. Columbia University Press, 1942, ISBN: 0-674-86250-3.

[126] I. Rechenberg, *Evolutionstrategie : Optimierung technischer Systeme nach Prinzipien der biologischen Evolution*. Frommann-Holzboog, 1971, ISBN: 3-7728-1642-8.

[127] H. P. Schwefel, *Evolutionsstrategie und numerische Optimierung*. Birkhäuser, 1976, ISBN: 3-7643-0876-1.

[128] J. H. Holland, *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. Bradford Books, 1975, ISBN: 0-262-58111-6.

[129] D. B. Fogel, *Evolutionary Computation: Toward a New Philosophy of Machine Intelligence*. Wiley-IEEE Press, 1995, ISBN: 0-471-66951-2.

[130] K. D. Jong, "Evolutionary computation," *Wiley interdisciplinary reviews: computational statistics*, vol. 1, no. 1, pp. 52–56, 2009. DOI: 10.1002/wics.5.

[131] W. M. Spears, K. A. D. Jong, T. Bick, D. B. Fogel, and H. de Garis, "An overview of evolutionary computation," *European conference on machine learning*, no. 4, p. 18, 1999. DOI: 10.1007/3-540-56602-3_163.

[132] D. B. Fogel, "What is evolutionary computation?" *Ieee spectrum*, 2000. DOI: 10.1109/6.819926.

[133] G. Yasuda and H. Takai, "Sensor-based path planning and intelligent steering control of nonholonomic mobile robots," in *IEEE Industrial Electronics Society*, vol. 1, 2001, pp. 317–322, ISBN: 978-0-7803-7108-8. DOI: 10.1109/IECON.2001.976501.

[134] A. Madureira, C. Ramos, and S. Do Carmo Silva, "A coordination mechanism for real world scheduling problems using genetic algorithms," in *Congress on Evolutionary Computation*, vol. 1, 2002, pp. 175–180, ISBN: 978-0-7803-7282-5. DOI: 10.1109/CEC.2002.1006229.

[135] K. G. Dhal, S. Ray, A. Das, and S. Das, "A Survey on Nature-Inspired Optimization Algorithms and Their Application in Image Enhancement Domain," *Archives of computational methods in engineering*, vol. 26, no. 5, pp. 1607–1638, 2019. DOI: 10.1007/s11831-018-9289-9.

[136] G. Fuertes, M. Vargas, M. Alfaro, R. Soto-Garrido, J. Sabattin, and M. A. Peralta, "Chaotic genetic algorithm and the effects of entropy in performance optimization," *Chaos: an interdisciplinary journal of nonlinear science*, vol. 29, no. 1, p. 013 132, 2019. DOI: 10.1063/1.5048299.

[137] Y. Peng, Y. F. Mao, B. Wang, and B. Xie, "Study on C–S and P–R EOS in pseudopotential lattice Boltzmann model for two-phase flows," *International journal of modern physics c*, p. 12, 2017.

[138] D. M. D'Addona and R. Teti, "Genetic Algorithm-based Optimization of Cutting Parameters in Turning Processes," *Procedia cirp*, vol. 7, pp. 323–328, 2013. DOI: 10.1016/j.procir.2013.05.055.

[139] S. Genna, O. Giannini, S. Guarino, G. S. Ponticelli, and F. Tagliaferri, "Laser texturing of AISI 304 stainless steel: Experimental analysis and genetic algorithm optimisation to control the surface wettability," *The international journal of advanced manufacturing technology*, vol. 110, no. 11-12, pp. 3005–3022, 2020. DOI: 10.1007/s00170-020-06073-4.

[140] T. Epalle, "Simulation numérique de reformeur autothermique de diesel," Ph.D. dissertation, CentraleSupélec, 2019.

[141] H. Adeli and N. Cheng, "Integrated Genetic Algorithm for Optimization of Space Structures," *Journal of aerospace engineering*, vol. 6, no. 4, pp. 315–328, 1993. DOI: 10.1061/(ASCE)0893-1321(1993)6:4(315).

[142] I. Gupta, A Gupta, and P Khanna, "Genetic algorithm for optimization of water distribution systems," *Environmental modelling & software*, vol. 14, no. 5, pp. 437–446, 1999. DOI: 10.1016/S1364-8152(98)00089-9.

[143] H. Zhang, M. Hua, G.-z. Dong, D.-y. Zhang, W.-j. Chen, and G.-n. Dong, "Optimization of texture shape based on Genetic Algorithm under unidirectional sliding," *Tribology international*, vol. 115, pp. 222–232, 2017. DOI: 10.1016/j.triboint.2017.05.017.

[144] C. Chan, H. Bai, and D. He, "Blade shape optimization of the Savonius wind turbine using a genetic algorithm," *Applied energy*, vol. 213, pp. 148–157, 2018. DOI: 10.1016/j.apenergy.2018.01.029.

[145] E. Kita and H. Tanie, "Shape optimization of continuum structures by genetic algorithm and boundary element method," *Engineering analysis with boundary elements*, vol. 19, no. 2, pp. 129–136, 1997. DOI: 10.1016/S0955-7997(97)00014-3.

[146] W. Annicchiarico and M. Cerrolaza, "Structural shape optimization using genetic algorithms," *Transactions on modelling and simulation*, vol. 18, 1997. DOI: 10.2495/BE970391.

[147] S. Woon, O. Querin, and G. Steven, "Structural application of a shape optimization method based on a genetic algorithm," *Structural and multidisciplinary optimization*, vol. 22, no. 1, pp. 57–64, 2001. DOI: 10.1007/s001580100124.

[148] W Johannsen, "The Genotype Conception of Heredity," *The american naturalist*, no. 531, 1911. DOI: 10.1093/ije/dyu063.

[149] D. De Vienne, "What is a phenotype? History and new developments of the concept," *Genetica*, vol. 150, no. 3-4, pp. 153–158, 2022. DOI: 10.1007/s10709-021-00134-6.

[150] M. Kumar, M. Husain, N. Upreti, and D. Gupta, "Genetic Algorithm: Review and Application," *Ssrn electronic journal*, 2010. DOI: 10.2139/ssrn.3529843.

[151] S. Katoch, S. S. Chauhan, and V. Kumar, "A review on genetic algorithm: Past, present, and future," *Multimedia tools and applications*, vol. 80, no. 5, pp. 8091–8126, 2021. DOI: 10.1007/s11042-020-10139-6.

[152] K. Jebari and M. Madiafi, "Selection Methods for Genetic Algorithms," *International journal of emerging sciences*, 2013.

[153] F. Herrera, M. Lozano, and J. L. Verdegay, "Dynamic and heuristic fuzzy connectives-based crossover operators for controlling the diversity and convergence of real-coded genetic algorithms," *International journal of intelligent systems*, vol. 11, no. 12, pp. 1013–1040, 1998. DOI: 10.1002/(SICI)1098-111X(199612)11:12<1013::AID-INT1>3.0.CO;2-Q.

[154] A. H. Wright, "Genetic Algorithms for Real Parameter Optimization," *Foundations of genetic algorithms*, vol. 1, pp. 205–218, 1991. DOI: 10.1016/B978-0-08-050684-5.50016-1.

[155] T. Back, "Optimal Mutation Rates in Genetic Search," *International conference on genetic algorithms*, p. 7, 1993. DOI: 10.5555/645513.657408.

[156] T. Bäck and M. Schütz, "Intelligent mutation rate control in canonical genetic algorithms," in *Foundations of Intelligent Systems*, vol. 1079, 1996, pp. 158–167, ISBN: 978-3-540-61286-5 978-3-540-68440-4. DOI: 10.1007/3-540-61286-6_141.

[157] J. Smith and T. Fogarty, "Self adaptation of mutation rates in a steady state genetic algorithm," in *IEEE International Conference on Evolutionary Computation*, 1996, pp. 318–323, ISBN: 978-0-7803-2902-7. DOI: 10.1109/ICEC.1996.542382.

[158] B. R. Rajakumar and A. George, "A new adaptive mutation technique for genetic algorithm," in *IEEE International Conference on Computational Intelligence and Computing Research*, 2012, pp. 1–7, ISBN: 978-1-4673-1344-5 978-1-4673-1342-1 978-1-4673-1343-8. DOI: 10.1109/ICCIC.2012.6510293.

[159] M Pelikan, D. E. Goldberg, and E. Cantu-Paz, "Bayesian optimization algorithm, population sizing, and time to convergence," *Genetic and evolutionary computation conference*, 2000. DOI: 10.5555/2933718.2933755.

[160] A. Piszcz and T. Soule, "Genetic programming: Optimal population sizes for varying complexity problems," in *Annual Conference on Genetic and evolutionary computation*, 2006, pp. 953–954, ISBN: 978-1-59593-186-3. DOI: 10.1145/1143997.1144166.

[161] V. Neyrand, "Analyse numérique du mouillage sur surfaces texturées par la méthode Lattice Boltzmann," Ph.D. dissertation, École Centrale de Lyon, 2021.

[162] M. Szilvasi-Nagy and G. Matyasi, "Analysis of STL Files," *Mathematical and computer modelling*, vol. 38, pp. 945–960, 2003. DOI: 10.1016/S0895-7177(03)90079-3.

[163] D. Wang, O. Hassan, K. Morgan, and N. Weatherill, "Enhanced remeshing from STL files with applications to surface grid generation," *Communications in numerical methods in engineering*, vol. 23, no. 3, pp. 227–239, 2006. DOI: 10.1002/cnm.894.

[164] C. W. Extrand, "Uncertainty in contact angle measurements from the tangent method," *Journal of adhesion science and technology*, vol. 30, no. 15, pp. 1597–1601, 2016. DOI: 10.1080/01694243.2016.1142799.

[165] H.-P. Lin and L.-J. Chen, "Direct observation of wetting behavior of water drops on single micro-scale roughness surfaces of rose petal effect," *Journal of colloid and interface science*, vol. 603, pp. 539–549, 2021. DOI: 10.1016/j.jcis.2021.06.132.

[166] D. Zhang, S. Takase, and G. Nagayama, "Measurement of effective wetting area at hydrophobic solid–liquid interface," *Journal of colloid and interface science*, vol. 591, pp. 474–482, 2021. DOI: 10.1016/j.jcis.2021.01.056.

[167] O. Rio and A. Neumann, "Axisymmetric Drop Shape Analysis: Computational Methods for the Measurement of Interfacial Properties from the Shape and Dimensions of Pendant and Sessile Drops," *Journal of colloid and interface science*, vol. 196, no. 2, pp. 136–147, 1997. DOI: 10.1006/jcis.1997.5214.

[168] V. A. Lubarda and K. A. Talke, "Analysis of the Equilibrium Droplet Shape Based on an Ellipsoidal Droplet Model," *Langmuir*, vol. 27, no. 17, pp. 10 705–10 713, 2011. DOI: 10.1021/la202077w.

[169] A. Epalle, M. Catherin, M. Cobian, and S. Valette, "Application of the Lattice-Boltzmann method to wetting on anisotropic textured surfaces: Characterization of the liquid-solid interface," *Journal of colloid and interface science*, S0021979723014649, 2023. DOI: 10.1016/j.jcis.2023.07.207.

[170] V. Belaud, S. Valette, G. Stremsdoerfer, B. Beaugiraud, E. Audouard, and S. Benayoun, "Femtosecond laser ablation of polypropylene: A statistical approach of morphological data: Femtosecond laser ablation of polypropylene," *Scanning*, vol. 36, no. 2, pp. 209–217, 2014. DOI: 10.1002/sca.21090.

[171] E. Delplanque, A. Aymard, D. Dalmas, and J. Scheibert, "Solving curing-protocol-dependent shape errors in PDMS replication," *Journal of micromechanics and microengineering*, p. 11, 2022. DOI: 10.1088/1361-6439/ac56ea.

[172] J. R. Panter, Y. Gizaw, and H. Kusumaatmaja, "Multifaceted design optimization for superomniphobic surfaces," *Science advances*, vol. 5, no. 6, eaav7328, 2019. DOI: 10.1126/sciadv.aav7328.

dernière page de la thèse

AUTORISATION DE SOUTENANCE

Vu les dispositions de l'arrêté du 25 mai 2016 modifié par l'arrêté du 26 août 2022,

Vu la demande du directeur de thèse

Monsieur S. VALETTE

et les rapports de

M. K. KUBIAK
Maître de conférences HDR, University of Leeds Woodhouse Lane, Leeds LS2 9JT, Royaume-Uni

et de

M. S. MERABIA
Directeur de recherche CNRS, Institut Lumière Matière - 10 rue Ada Byron
69622 Villeurbanne CEDEX

Monsieur EPALLE Alexandre

est autorisé à soutenir une thèse pour l'obtention du grade de **DOCTEUR**

Ecole doctorale MATERIAUX

Fait à Ecully, le 29 novembre 2023

Pour le directeur de l'École Centrale de Lyon
Le directeur de la recherche



Christophe CORRE