Résumé en français :

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.

Titre en français :

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

Mots clés en français :

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

Résumé en anglais :

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.

Titre en anglais :

Lattice-Boltzmann numerical simulation of wettability properties of textured surfaces

Mots clés en anglais :

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