



# THÈSE

En vue de l'obtention du

## DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace

---

**Présentée et soutenue par :**

**Julien LALLEMENT**

**le** vendredi 8 février 2019

**Titre :**

Modélisation et simulation numérique d'écoulements de films minces  
avec effet de mouillage partiel

---

**École doctorale et discipline ou spécialité :**

ED MEGeP : Dynamique des fluides

**Unité de recherche :**

Équipe d'accueil ISAE-ONERA EDyF

**Directeur(s) de Thèse :**

M. Philippe VILLEDIEU (directeur de thèse)

M. Pierre TRONTIN (co-directeur de thèse)

**Jury :**

M. Laurent LIMAT Directeur de recherche laboratoire MSC - Président, Rapporteur  
M. Philippe VILLEDIEU Directeur de recherche ONERA Toulouse - Directeur de thèse  
M. Pierre TRONTIN Ingénieur de recherche ONERA Toulouse - Co-directeur de thèse  
M. Christian RUYER-QUIL Professeur Université de Chambéry - Rapporteur  
M. Philippe BELTRAME Maître de conférences Université d'Avignon et Pays du Vaucluse  
Mme Claire LAURENT Ingénieure de recherche ONERA Toulouse



Modélisation et simulation numérique d'écoulements de films  
minces avec effet de mouillage partiel

Julien LALLEMENT

À Papi Erwin, mon modèle pour la vie.

# Résumé

## Français

L'accrétion de givre sur les surfaces rencontrées en aéronautique (ailes, entrées d'air moteur, sonde) est considérée comme un risque majeur pour la sécurité aérienne. Les conséquences observées sont la dégradation des performances aérodynamiques pouvant conduire au décrochage, des perturbations dans les moteurs pouvant aller jusqu'à son extinction ou le colmatage des sondes. C'est pourquoi les avionneurs développent des systèmes de protection thermiques contre le givre. L'eau accumulée sur les surfaces reste ainsi à l'état liquide et forme un film mince. Les propriétés dynamiques (hauteur, vitesse et étalement) et thermiques (température, taux d'évaporation) du film en présence d'un écoulement d'air cisailé permettent de prédire un éventuel regel du film d'eau en dehors des zones protégées (« runback ice »). Comme les essais en vols ou en soufflerie sont souvent complexes à mettre en oeuvre et onéreux, la simulation numérique est devenue un outil efficace et complémentaire pour dimensionner ces systèmes. L'objet principal de cette thèse est le développement de modèles intégrés dans un outil numérique permettant de prédire le transport d'eau liquide sur une surface sous forme de film ou de ruisselets ou de gouttes. Une approche intégrale de type Saint Venant est adoptée ce qui permet de décrire la dynamique macroscopique d'un film 3D pour des configurations et des temps de calcul raisonnables par rapport à un calcul DNS. Une formulation augmentée du second ordre en espace pour le traitement des termes de courbure est proposée, ce qui autorise l'utilisation de maillages surfaciques non structurés généraux. Contrairement aux modèles disponibles dans la littérature, celui proposé dans ce manuscrit présente l'avantage de tenir compte des phénomènes capillaires et de mouillage sans limite de validité en termes d'angle de contact statique. Une équation de conservation de l'énergie garantissant la consistance thermodynamique des solutions calculées est dérivée du système augmenté régissant la dynamique du fluide. Une discrétisation de type Volumes Finis du système d'équation est proposée. Des simulations numériques valident le modèle pour des configurations académiques de mouillage statiques et dynamiques. La transition d'un film continu en ruisselets est également simulée.

## Anglais

The ice accretion on surfaces encountered in aeronautics (wings, nacelle lips, sensors) is considered as a major risk for aviation safety. The consequences observed are the degradation of the aerodynamic performances that can lead to the aircraft stall, disturbances in the engines that can lead to flame out or clogging of the sensors. That is why aircraft manufacturers are developing thermal protection systems against icing. The water accumulated on the surfaces thus remains in the liquid state and forms a thin film. The dynamic properties (thickness, velocity and spreading) and thermal properties (temperature, evaporation rate) of the film in the presence of a sheared air flow make it possible a potential refreezing of the water film on unprotected surfaces ("runback ice" phenomena). Since flight or wind tunnel tests are generally expensive and difficult to set up, numerical simulation has become an effective and complementary tool to design these systems. The main purpose of this thesis is to develop a model integrated in a numerical tool to predict the transport of liquid water on a surface which might take the form of a film, a rivulet or a droplet. An integral approach based on a shallow water type model is adopted. It makes it possible to describe the macroscopic dynamics of a three-dimensional liquid film on realistic configurations and within reasonable computing times compared to a full Navier-Stokes computation. An extended formulation is proposed, it corresponds to a second order differential system and thus allows to use arbitrary surface meshes. Contrary to models available in the literature, the one proposed in this manuscript has the advantage of taking into account capillary and wetting phenomena without validity limit in term of static contact angle. An energy conservation equation ensuring the thermodynamic consistency of the calculated solutions is derived from the extended model governing fluid dynamics. A Finite Volume discretization of the system is proposed. Numerical simulations validate the model for both static and dynamic academical wetting configurations. The transition of a continuous film into rivulets is also simulated.

# Remerciements

Je souhaite remercier amicalement les personnes qui m'ont accompagné dans ces travaux, et en premier lieu mes encadrants Philippe Villedieu, Pierre Trontin et Claire Laurent pour leurs conseils et les échanges que nous avons eu sur les problématiques de films et de givrage.

Je remercie Christian Ruyer-Quil d'avoir accepté de rapporter ce manuscrit de thèse, Laurent Limat d'avoir présidé le jury, Philippe Beltrame d'avoir accepté d'en faire partie et Jean-Paul Vila d'être intervenu en tant que membre invité. Je les remercie tous grandement pour leur participation au jury, leur expertise et leurs retours constructifs sur mon travail.

Je tiens également à remercier tout l'environnement du DMPE, et en particulier Pierre Millan, Pierre Gajan, Philippe Reulet et Gilian Leplat qui m'ont accueilli et encadré lors de mon stage de fin d'études à l'ONERA et qui m'ont donné l'envie de poursuivre mes études en thèse.

Je remercie également toutes les personnes ayant partagé avec moi ces trois années. Swann mon partenaire de bureau, Baptise mon alter ego (Simu/Expé) de travail, Loïc mon partenaire de natation, Pierre Lavoie et Anne-Marie mes partenaires de l'Amour est dans le Près, et Alexis et Louise mes premiers partenaires de coinche en stage. J'ai également beaucoup apprécié l'ambiance générale de travail et je remercie ainsi l'ensemble des doctorants et des stagiaires que j'ai pu côtoyer : les Maximes, les Pierres, les Thibauts, Charlotte, Isabelle, Anna, François, Florian, Sylvain, Vincent, Jeff, Anthony.

Enfin, j'ai pu compter sur le soutien de ma compagne, de ma famille et de mes amis que je remercie chaleureusement.



# Table des matières

<b>Table des figures</b>	<b>9</b>
<b>Liste des tableaux</b>	<b>19</b>
<b>Introduction</b>	<b>23</b>
<b>I Etat de l'art sur la modélisation des écoulements de films minces</b>	<b>27</b>
<b>1 Capillarité et mouillage des films liquides</b>	<b>29</b>
1.1 Les phénomènes capillaires . . . . .	29
1.1.1 Tension de surface . . . . .	29
1.1.2 Pression de Laplace . . . . .	31
1.2 Les phénomènes de mouillage . . . . .	32
1.2.1 Origine du mouillage . . . . .	32
1.2.2 Angle de contact statique . . . . .	33
1.2.3 Profil statique d'une goutte en mouillage partiel . . . . .	35
1.2.4 Angle de contact dynamique . . . . .	36
1.2.5 Hystérésis de l'angle de contact . . . . .	37
1.3 Conclusion . . . . .	38
<b>2 Modèles réduits pour la dynamique d'un film</b>	<b>39</b>
2.1 Modèles sans ligne triple . . . . .	39
2.1.1 Contexte . . . . .	40
2.1.2 Introduction aux instabilités en "Roll-Waves" . . . . .	40
2.1.3 Equation de lubrification de Benney . . . . .	42
2.1.4 Modèle Saint Venant de Shkadov . . . . .	47
2.2 Modèles avec ligne triple . . . . .	49
2.2.1 Contexte . . . . .	49
2.2.2 Introduction aux instabilités en "Ruisselets" . . . . .	49
2.2.3 Equation de lubrification . . . . .	54
2.2.4 Modélisation de l'angle de contact statique . . . . .	55
2.2.5 Lois d'angle de contact dynamique . . . . .	63
2.2.6 Condition aux limites à la paroi . . . . .	66
2.2.7 Prédiction et simulation numérique de la formation de ruisselets . . . . .	68
2.3 Conclusion . . . . .	74

<b>II</b>	<b>Modélisation bidimensionnelle</b>	<b>77</b>
<b>3</b>	<b>Etablissement des équations du modèle continu</b>	<b>79</b>
3.1	Dérivation de l'équation de lubrification . . . . .	80
3.1.1	Hypothèses du problème . . . . .	80
3.1.2	Conditions aux limites . . . . .	82
3.1.3	Equation de conservation de la masse . . . . .	83
3.1.4	Modèle de fermeture . . . . .	85
3.2	Formulation équivalente de type Saint Venant . . . . .	87
3.2.1	Equation de conservation de la quantité de mouvement . . . . .	88
3.2.2	Equivalence avec l'équation de lubrification . . . . .	91
3.2.3	Système augmenté . . . . .	91
3.2.4	Définition de la densité surfacique d'énergie d'un film . . . . .	92
3.2.5	Mise sous forme conservative du bilan de quantité de mouvement . . . . .	93
3.3	Equation d'énergie associée . . . . .	96
3.3.1	Réécriture du système à l'aide des variables "entropiques" . . . . .	97
3.3.2	Equation de conservation de l'énergie . . . . .	97
3.4	Prise en compte des phénomènes de mouillage . . . . .	99
3.4.1	Présentation de la démarche . . . . .	99
3.4.2	Construction de la densité surfacique d'énergie de disjonction . . . . .	99
3.4.3	Vérification de la relation de Young-Dupré à l'échelle macroscopique pour un film statique . . . . .	104
3.4.4	Vérification du bon comportement du modèle pour des situations de mouillage dynamique . . . . .	105
3.5	Analyse de stabilité linéaire . . . . .	107
3.5.1	Linéarisation du système autour d'un état d'équilibre . . . . .	107
3.5.2	Relation de dispersion . . . . .	108
3.5.3	Stabilité d'un film dans différentes configurations . . . . .	110
3.5.4	Remarques sur la partie réelle de la célérité des ondes . . . . .	113
3.6	Hyperbolicité . . . . .	114
3.6.1	Calcul des valeurs propres du système linéarisé du premier ordre . . . . .	114
3.6.2	Analyse de l'hyperbolicité du système . . . . .	116
3.7	Conclusion du chapitre . . . . .	117
<b>4</b>	<b>Schéma de discrétisation numérique</b>	<b>119</b>
4.1	Discrétisation spatiale . . . . .	119
4.1.1	Intégration par la méthode des Volume Finis . . . . .	119
4.1.2	Schéma de discrétisation proposé . . . . .	121
4.2	Discrétisation temporelle . . . . .	121
4.3	Stabilité du schéma de discrétisation . . . . .	122
4.3.1	Critère de stabilité non-linéaire . . . . .	122
4.3.2	Bilan d'énergie discret . . . . .	122
4.3.3	Conclusion du bilan énergétique discret . . . . .	126
4.4	Mise en oeuvre du calcul et des conditions aux limites . . . . .	126
4.4.1	Définition des cellules fantômes . . . . .	126
4.4.2	Initialisation de la variable conservative $p$ dans le domaine physique . . . . .	127
4.4.3	Conditions aux bords du domaine . . . . .	127
4.4.4	Définition et évaluation du point triple macroscopique . . . . .	128

<b>5</b>	<b>Validations</b>	<b>129</b>
5.1	Position d'équilibre statique d'un film bidimensionnel . . . . .	130
5.1.1	Film liquide soumis à la gravité . . . . .	130
5.1.2	Film liquide en micro-gravité . . . . .	137
5.2	Etude en dynamique de l'étalement d'un film 2D . . . . .	141
5.2.1	Cas d'un film totalement mouillant . . . . .	141
5.2.2	Cas d'un film partiellement mouillant . . . . .	147
5.2.3	Discussion des résultats . . . . .	150
5.3	Film liquide injecté sur un plan incliné . . . . .	150
5.3.1	Intérêt de l'étude . . . . .	150
5.3.2	Données numériques et expérimentales . . . . .	151
5.3.3	Cas totalement mouillant . . . . .	152
5.3.4	Cas partiellement mouillant . . . . .	154
5.3.5	Discussion des résultats . . . . .	158
5.4	Comparaison Simulation/LSA 2D . . . . .	158
5.5	Conclusion du chapitre . . . . .	160
<b>III</b>	<b>Modélisation tridimensionnelle</b>	<b>163</b>
<b>6</b>	<b>Extension 3D des équations du modèle continu</b>	<b>165</b>
6.1	Etablissement du modèle continu . . . . .	166
6.1.1	Hypothèses du problème et conditions aux limites . . . . .	166
6.1.2	Dérivation de l'équation de lubrification . . . . .	167
6.1.3	Dérivation du système équivalent de type Saint Venant . . . . .	168
6.1.4	Système augmenté . . . . .	169
6.1.5	Mise sous forme conservative du bilan de quantité de mouvement . . . . .	170
6.1.6	Equation de conservation de l'énergie . . . . .	172
6.2	Analyse de stabilité linéaire - Transition en ruisselets . . . . .	173
6.2.1	Etablissement des équations et adimensionnement . . . . .	174
6.2.2	Linéarisation du système autour d'un état d'équilibre . . . . .	175
6.2.3	Relation de dispersion . . . . .	177
6.2.4	Résolution analytique . . . . .	177
6.2.5	Conclusion et discussion . . . . .	178
6.3	Schéma de discrétisation numérique . . . . .	178
6.3.1	Notations . . . . .	179
6.3.2	Méthode de calcul des gradients discrets . . . . .	181
6.3.3	Méthode d'interpolation en un point . . . . .	184
6.3.4	Intégration par la méthode des Volume Finis . . . . .	186
6.3.5	Schéma de discrétisation spatiale . . . . .	187
6.3.6	Schéma de discrétisation temporel . . . . .	190
6.3.7	Condition sur le pas de temps de simulation . . . . .	191
6.4	Conditions aux limites . . . . .	192
6.5	Résultats de validations élémentaires . . . . .	192
6.5.1	Calcul imprécis de la variable $\mathbf{p}$ . . . . .	192
6.5.2	Solutions envisagées . . . . .	192
6.5.3	Solution temporaire adoptée . . . . .	193
6.6	Conclusion du chapitre . . . . .	194

<b>7 Simulations numériques</b>	<b>195</b>
7.1 Pincement stationnaire d'un film tombant . . . . .	195
7.1.1 Présentation de l'étude . . . . .	195
7.1.2 Etude préliminaire : Influence des paramètres de mouillage et de la résolution du maillage sur la solution calculée . . . . .	196
7.1.3 Résultats . . . . .	200
7.2 Transition en ruisselets d'un film tombant . . . . .	205
7.2.1 Présentation de l'étude . . . . .	205
7.2.2 Choix des paramètres numériques . . . . .	206
7.2.3 Résultats . . . . .	209
7.2.4 Discussion . . . . .	218
7.3 Pincement instationnaire d'un film tombant . . . . .	219
7.3.1 Présentation de l'étude . . . . .	219
7.3.2 Prédiction de la stabilité du film . . . . .	220
7.3.3 Résultats . . . . .	221
7.4 Transition en ruisselets d'un film cisailé . . . . .	223
7.4.1 Présentation de l'étude . . . . .	223
7.4.2 Simulations numériques . . . . .	224
7.5 Conclusion du chapitre . . . . .	228
<b>Conclusion générale et Perspectives</b>	<b>229</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>233</b>
<b>Annexes</b>	<b>241</b>
<b>A Estimation des nombres adimensionnés</b>	<b>243</b>
<b>B Discrétisation temporelle du modèle 2D</b>	<b>247</b>
<b>C Analyse de stabilité linéaire 3D</b>	<b>251</b>
<b>D Décomposition de Hodge</b>	<b>261</b>
<b>E Influence des paramètres <math>h_*</math> et <math>\Delta_\Omega</math> sur le pincement</b>	<b>263</b>
<b>F Comparaison Simulation/LSA 3D</b>	<b>267</b>

# Table des figures

2	Illustration d'un ETIPS (source FMLC <a href="http://www.fmlc.nl/">http://www.fmlc.nl/</a> ) . . . . .	23
3	Ecoulement en ruisselets d'un film liquide cisailé sur un profil d'aile. L'écoulement est dirigé de droite à gauche. . . . .	24
4	Structure générale d'un code de givrage [84]. . . . .	25
1.1	Représentation schématique 2D des interactions moléculaires au voisinage d'une interface <i>liquide/gaz</i> . L'interface est caractérisée par une épaisseur $\delta_{int}$ et une surface $S_{int}$ . . . . .	30
1.2	Représentation des forces de tension de surface agissants sur une portion de surface d'une interface. . . . .	31
1.3	Représentation d'un substrat sec, d'un substrat mouillé, et de la configuration étudiée. On désigne respectivement par $L$ , $A$ et $A'$ la surface (par unité de longueur) de la phase solide, celle de l'interface <i>solide/liquide</i> et celle de l'interface <i>liquide/gaz</i> . . . . .	32
1.4	Représentation de Potash et Wayner [44] de la ligne triple à différentes échelles d'un liquide partiellement mouillant. . . . .	34
1.5	Vue de côté d'une goutte à l'équilibre sur un substrat horizontal formant un angle de contact statique $\theta_s = 46^\circ$ avec le substrat [22]. . . . .	34
1.6	Équilibre des forces de tension de surface au point triple illustrant la relation de Young-Dupré. . . . .	34
1.7	Représentation d'une goutte à l'équilibre sur une surface hydrophile et hydrophobe. . . . .	35
1.8	Forme à l'équilibre d'une goutte 2D sur un plan horizontal en fonction de son rayon $r$ par rapport à la longueur capillaire $l_c$ . . . . .	36
1.9	Vues de côté d'une goutte d'huile s'écoulant à vitesse croissante sur un plan incliné. Expérience réalisée par Le Grand [22]. . . . .	36
1.10	Évolution de l'angle de contact dynamique $\theta_d$ en fonction de la vitesse de la ligne triple $V_{LT}$ d'après le modèle de Cox-Voïnov [16]. . . . .	36
1.11	Bilan de force d'une goutte sur un substrat dans l'hypothèse d'un angle de contact statique unique prédit par la loi de Young. . . . .	37
1.12	Bilan de force d'une goutte sur un substrat incliné dans l'hypothèse d'un phénomène d'hystérésis de l'angle de contact. . . . .	38
1.13	Évolution de $\theta_d$ en fonction de $V_{LT}$ avec le phénomène d'hystérésis qui induit une discontinuité par rapport au modèle de Cox-Voïnov. . . . .	38
2.1	Instabilités de type "Roll-Waves" apparaissant dans la rivière de Grunnbach, Allemagne. Source : Wikimedia Commons. . . . .	40

2.2	Evolution des ondes à l'interface d'un film liquide s'écoulant (de gauche à droite) sur un plan vertical à $Re = 32.7$ . Expérience réalisée par Park et Nosoko [103]. . . . .	41
2.3	Amplification d'une petite perturbation à l'injection d'un liquide sur un plan vertical. . . . .	41
2.4	Film2D . . . . .	42
2.5	Instabilités de type "Roll-Waves" à la surface d'un film liquide cisailé par un gaz. Comparaison des simulations obtenus avec le modèle de Skhadov et par DNS (en pointillé) avec OpenFOAM. Les données du calcul sont détaillées dans [11]. . . . .	48
2.6	Exemples de formation de ruisselets dans des situations du quotidien. . . .	49
2.7	Dispositif expérimental utilisé par Huppert [26] sur un plan incliné d'un angle $\beta$ . . . . .	50
2.8	Formation de ruisselets régulièrement espacés d'une distance $d$ à la ligne triple d'un liquide injecté avec un volume constant sur un plan incliné. Expérience réalisée par Huppert [26]. . . . .	51
2.9	A gauche : profil transversale d'un ruisselet pour différentes inclinaisons du substrat. A droite : profil longitudinal d'un ruisselet pour différents Reynolds d'injection du liquide. Visualisations obtenues par Johnson [31]. . . .	52
2.10	Espacement entre les ruisselets en fonction du Reynolds d'injection de liquide et de l'inclinaison du plan. Les conditions expérimentales sont décrites dans [31]. . . . .	52
2.11	Représentation simplifiée du dispositif expérimental de Zhang [116]. . . . .	53
2.12	Evolution temporelle d'un film liquide se déplaçant sur un profil NACA0012 cisailé par un gaz. Expérience réalisée par Zhang et al. [116] . . . . .	54
2.13	Tracé typique de la pression de disjonction $\Pi_d(h)$ pour le cas d'un mouillage total, partiel et pseudo-partiel [15]. . . . .	57
2.14	Représentation de Potash et Wayner [44] de la ligne triple à différentes échelles d'un liquide pseudo-partiellement mouillant. . . . .	57
2.15	Tracé de la pression de disjonction $\Pi_d(h)$ introduite par Dejarguin [37]. La pression est adimensionnée par $B$ et l'épaisseur $h$ du film par $h_*$ . . . . .	58
2.16	Représentation de Potash et Wayner [44] du point triple. Le point $A$ se situe dans la macro-région $h \gg h_*$ et le point $B$ dans la région du film précurseur $h = h_*$ . . . . .	59
2.17	Evolution d'un film liquide plat d'épaisseur $h_o$ auquel on applique une perturbation. $\mathfrak{R}$ désigne le rayon d'action moléculaire. . . . .	61
2.18	Démouillage spinodal d'un film de polystyrène d'épaisseur $40,5 \text{ nm}$ sur une plaque de silicium [74]. . . . .	62
2.19	Diagramme de stabilité d'un film liquide infini d'épaisseur $h_o$ obtenu par Kondic [72]. La pression de disjonction s'exprime par (2.38) et l'angle de contact statique $\theta_s$ est fixé à $50^\circ$ . Une échelle logarithmique est utilisée. . .	63
2.20	Vision macroscopique d'un point triple formant un dièdre avec le substrat proposée par De Gennes [67]. . . . .	64
2.21	Vision à deux échelles d'un point triple proposée par Cox et Voïnov [66]. . .	65
2.22	Représentation du profil de vitesse longitudinal $u(z)$ en fonction de la condition aux limites à la paroi. . . . .	67

2.23 Représentation profil de vitesse longitudinal  $u(z)$  dans le cas d'une ligne triple en contact avec un substrat sec et un substrat "pré-mouillé". . . . . 68

2.24 Représentation d'un film s'écoulant à débit constant uniformément dans la direction transversale  $y$ . . . . . 69

2.25 Diagramme de stabilité  $\omega = f(k)$ . La solution en trait continu est obtenu par résolution numérique de (2.69) et celle en pointillé est obtenu analytiquement par calcul de (2.70). Les détails sur la configuration étudiée sont donnés dans [107]. . . . . 70

2.26 Evolution de l'espacement entre les ruisselets en fonction de l'inclinaison  $\beta$  du plan à débit volumique fixé dans le cas du fluide B partiellement mouillant [31]. Les losanges sont les espacements expérimentaux, la solution en trait pointillé est obtenu par analyse de stabilité linéaire, et celle en trait continu est une loi extrapolée des résultats de simulations numériques. Les détails sur la configuration étudiée sont donnés dans [117]. . . . . 71

2.27 Influence de l'inclinaison  $\beta$  du plan sur le profil en onde progressive  $h_o(\xi)$  et sa stabilité. Les détails du calcul sont donnés dans [97]. . . . . 72

2.28 Influence de l'inclinaison  $\beta$  du plan sur le développement des ruisselets. Les résultats sont pris au même instant  $t$ , traduisant un développement plus rapide des ruisselets quand le substrat est incliné. Simulation numérique obtenue par Slade [117]. . . . . 72

2.29 Influence de l'angle de contact statique  $\theta_s$  sur le profil en onde progressive  $h_o(\xi)$  et sa stabilité. Les détails du calcul sont donnés dans [117]. . . . . 73

2.30 Influence de l'angle de contact  $\theta_s$  sur l'évolution temporelle des ruisselets. Simulation numérique obtenue par Slade [117]. . . . . 73

2.31 Influence de la longueur de glissement  $b$  (adimensionnée par  $h^{Nu}$ ) sur le profil en onde progressive  $h_o(\xi)$  et sa stabilité. Les valeurs des points ont été extrapolées depuis les courbes de [86]. . . . . 74

3.1 Représentation 2D d'un film liquide sécouant sur un plan incliné d'un angle  $\beta$  et soumis à un cisaillement gazeux  $\tau_i^x$ . . . . . 81

3.2 Représentation 2D d'un film liquide sécouant sur un plan incliné d'un angle  $\beta$ . L'angle  $\theta_d$  représente l'angle apparent à l'échelle macroscopique que fait l'interface *liquide/gaz* avec le substrat. . . . . 83

3.3 Représentation d'une tranche infinitésimale de film 2D sécouant sur un plan incliné. . . . . 92

3.4 Représentation de la ligne triple à différentes échelles d'un liquide partiellement mouillant dans l'hypothèse  $\lim_{h \rightarrow 0} h_x = 0$ . . . . . 100

3.5 Représentation schématique de l'évolution de la densité d'énergie libre d'une tranche infinitésimale de film liquide en fonction de son épaisseur  $h$ . . . . . 101

3.6 Tracé de la densité d'énergie de disjonction  $e_{disj}(h)$ , de la force linéique  $F^d(h)$  et de la pression de disjonction  $\Pi^d(h)$ . . . . . 102

3.7 Tracé du gradient de force linéique  $\partial F^d / \partial x$  au voisinage d'une ligne triple en forme de dièdre donnée par  $h(x) = a x$ . . . . . 103

3.8 Représentation d'un point à l'équilibre à différentes échelles. . . . . 104

3.9 Représentation d'un point triple en mouvement à différentes échelles. . . . . 105

3.10	Limite de stabilité d'un film d'épaisseur $h_o$ à l'équilibre sur un plan horizontal en fonction du paramètre $h_*$ et de l'angle de contact statique $\theta_s$ . Le domaine stable se situe au-dessus de la courbe, et le domaine instable en-dessous. Les épaisseur $h_o$ et $h_*$ sont adimensionnées par la longueur capillaire $l_c$ . La croix correspond à $(h_*/l_c ; h_o/l_c) = (0, 2 ; 0, 4)$ . . . . .	111
3.11	Représentation schématique des zones potentiellement non-hyperboliques du modèle proposé. . . . .	117
4.1	Représentation du domaine spatial discrétisé, des cellules et des interfaces. .	120
4.2	Représentation du domaine spatial discrétisé, des cellules physiques, et des cellules fantômes. . . . .	127
4.3	Profil d'épaisseur d'un film liquide au voisinage du point triple. L'angle $\theta_{num}$ représente l'angle de contact apparent mesuré lors d'une simulation, $x_\theta$ est l'abscisse du point d'inflexion, et $x_{CP}$ est l'abscisse du point triple macroscopique reconstruit linéairement. . . . .	128
5.1	Représentation schématique d'un film liquide à l'équilibre sur un plan horizontal. . . . .	131
5.2	Simulation numérique obtenue avec $\Delta t = 10^{-4} s$ , $\Delta x = 2.22 \times 10^{-5} m$ , $h_* = 1.749 \times 10^{-4} m$ et $b = 10^{-8} m$ . Les profils d'épaisseur sont tracés aux instants $t = 0, 0.05, 0.1, 0.25, 1 s$ . L'épaisseur du film $h$ et l'abscisse $x$ sont respectivement adimensionnés par l'épaisseur $h_{puddle}$ et par l'étalement $W_s$ du profil théorique à l'équilibre. . . . .	131
5.3	Profil à l'équilibre de l'épaisseur $h(x)$ en fonction du paramètre $h_*$ . L'épaisseur du film $h(x)$ et l'abscisse $x$ sont respectivement adimensionnés par l'épaisseur $h_{puddle}$ et par l'étalement $W_s$ du profil théorique à l'équilibre. . . . .	132
5.4	Influence du rayon d'action $h_*$ sur l'étalement et l'angle de contact apparent à l'équilibre. Les données sont regroupées dans le tableau 5.3. . . . .	133
5.5	Vue au voisinage du point triple de la force linéique de disjonction $F^d(x)$ adimensionnée par $\gamma_{lg} [1 - \cos(\theta_s)]$ . . . . .	134
5.6	Evolution de différentes normes $L^2$ en fonction du pas de maillage $\Delta x$ uniforme. Une échelle logarithmique est utilisée. . . . .	135
5.7	Vue au voisinage du point triple du profil à l'équilibre de l'épaisseur $h(x)$ en fonction du pas de maillage $\Delta x$ . L'épaisseur du film $h(x)$ et l'abscisse $x$ sont respectivement adimensionnés par l'épaisseur $h_{puddle}$ et par l'étalement $W_s$ du profil théorique à l'équilibre. . . . .	136
5.8	Simulation numérique du cas $(\theta_i, \theta_s) = (30^\circ, 60^\circ)$ obtenue avec $\Delta t = 2.0 \times 10^{-4} s$ , $\Delta x = 2.5 \times 10^{-5} m$ , $h_* = 3.75 \times 10^{-5} m$ et $b = \times 10^{-6} m$ . L'épaisseur du film $h$ et l'abscisse $x$ sont respectivement adimensionnés par l'épaisseur $h_s(x = 0)$ et par le rayon $R_s$ du profil parabolique théorique à l'équilibre. .	138
5.9	Dépendance du profil à l'équilibre en fonction de la modélisation des termes capillaires. Les courbes rouges désignent les profils obtenus sans approximation des termes capillaires, et les courbes bleus ceux obtenus avec l'approximation (5.9). . . . .	140
5.10	Simulation numérique obtenue avec $\Delta t = 1,5 \times 10^{-6} s$ , $\Delta x = 10^{-6} m$ et $b = 4 \times 10^{-6} m$ . Les profils d'épaisseurs sont tracés aux instants $t = 0, 0.001, 0.01, 0.1, 1, 10 s$ . . . . .	142

5.11 Angle de contact apparent  $\theta_{num}$  en fonction du nombre capillaire  $C_a$  obtenu par simulation numérique de l'étalement symétrique d'un film totalement mouillant pour différentes longueurs de glissement  $b$ . Les lignes en pointillées correspondent aux régressions linéaires dont les données sont regroupées dans le tableau 5.7. . . . . . 143

5.12 Evolution de la constante de proportionnalité  $r$  en fonction de la longueur de glissement  $b$ . Une échelle logarithmique est utilisée pour l'axe des abscisses. La ligne en pointillée rouge est proportionnelle à  $\log(b)$ . . . . . 143

5.13 Evolution temporelle de la hauteur centrale  $h(0,t)$  et de l'étalement  $x_{CP}(t)$  pour différentes longueurs de glissement  $b$ . Une échelle logarithmique est utilisée. . . . . 144

5.14 Angle de contact apparent  $\theta_{num}$  en fonction du nombre capillaire  $C_a$  obtenu par simulation numérique de l'étalement symétrique d'un film totalement mouillant pour différents pas de maillage  $\Delta x$ . Les lignes en pointillées correspondent aux régressions linéaires dont les données sont regroupées dans le tableau 5.8. . . . . 145

5.15 Evolution temporelle de la hauteur centrale  $h(0,t)$  pour différents pas de maillage  $\Delta x$ . Une échelle logarithmique est utilisée. Les données sont regroupées dans le tableau 5.8. . . . . 146

5.16 Evolution du pas de temps de simulation  $\Delta t$  en fonction du pas de maillage  $\Delta x$ . Une échelle logarithmique est utilisée. La ligne en pointillée rouge est proportionnelle à  $\Delta x^{1.093}$ . . . . . 147

5.17 Simulation numérique obtenu avec  $h_* = 6.51 \times 10^{-6} m$ ,  $\Delta x = 10^{-6} m$ ,  $b = 10^{-7} m$  et  $\theta_s = 4^\circ$ . Les profils d'épaisseurs sont tracés aux instants  $t = 0, 0.001, 0.01, 0.1, 1, 10 s$ . L'épaisseur du film  $h$  et l'abscisse  $x$  sont respectivement adimensionnés par l'épaisseur  $h_s(x = 0)$  et par le rayon  $R_s$  du profil parabolique théorique à l'équilibre. . . . . 148

5.18 Angle de contact apparent  $\theta_{num}$  en fonction du nombre capillaire  $C_a$  obtenu par simulation numérique de l'étalement symétrique d'un film partiellement mouillant pour différents  $h_*$ . Les lignes en pointillées correspondent aux régressions linéaires dont les données sont regroupées dans le tableau 5.9. . . 148

5.19 Evolution temporelle de l'étalement  $x_{CP}(t)$  pour différent rayons d'action  $h_*$ . L'étalement  $x_{CP}(t)$  adimensionné par l'épaisseur par le rayon  $R_s$  du profil théorique à l'équilibre. Une échelle logarithmique est utilisée. . . . . 149

5.20 Evolution temporelle de l'étalement  $x_{CP}(t)$  pour différent angles de contact statique  $\theta_s$ , obtenu avec  $h_* = 6.51 \times 10^{-6} m$ ,  $\Delta x = 10^{-6} m$ , et  $b = 10^{-7} m$ . Une échelle logarithmique est utilisée. . . . . 150

5.21 Représentation d'un film injecté à débit constant uniformément sur un plan incliné d'un angle  $\beta$ . . . . . 151

5.22 Simulation numérique obtenu avec  $\Delta t \simeq 1,5 \times 10^{-6} s$ ,  $\Delta x = 2 \times 10^{-5} m$ ,  $b = 10^{-6} m$ ,  $\theta_s = 38^\circ$  et  $h_* = 1,174 \times 10^{-4} m$ . L'épaisseur du film  $h$  est adimensionnée par l'épaisseur  $h^{Nu}$ . . . . . 152

5.23 Simulation numérique obtenues pour différentes longueurs de glissement  $b$  avec  $\Delta x = 2 \times 10^{-5} m$ ,  $\Delta t \simeq 1,5 \times 10^{-6} s$  et  $\theta_s = 0^\circ$ . Les profils sont tracés à  $t = 1 s$ . . . . . 153

5.24	Evolution de la hauteur de l'écoulement de Nusselt $h^{Nu}$ et de la différence relative $r_b$ entre la hauteur du bourrelet $h^{bulk}$ et la hauteur de l'écoulement de Nusselt en fonction de la longueur de glissement $b$ . Les données sont regroupées dans le tableau 5.11. Une échelle logarithmique est utilisée. La ligne en pointillé violette est proportionnelle à $(b/h^{Nu})^{-0,1703}$ . . . . .	153
5.25	Simulation numérique obtenues pour différentes longueurs de glissement $b$ avec $\Delta x = 2 \times 10^{-5} m$ , $\Delta t \simeq 1,5 \times 10^{-6} s$ et $\theta_s = 38^\circ$ et $h_* = 10^{-4} m$ . Les profils sont tracés à $t = 1 s$ . . . . .	155
5.26	Evolution de la hauteur de l'écoulement de Nusselt $h^{Nu}$ et de la différence relative $r_b$ entre la hauteur du bourrelet $h^{bulk}$ et la hauteur de l'écoulement de Nusselt en fonction de la longueur de glissement $b$ . Les données sont regroupées dans le tableau 5.12. Une échelle logarithmique est utilisée. . . . .	155
5.27	Simulation numérique obtenues pour différents rayons d'actions $h_*$ avec $\Delta x = 2 \times 10^{-5} m$ , $\Delta t = 1,5 \times 10^{-6} s$ , $\theta_s = 38^\circ$ et $b = 10^{-5} m$ . L'épaisseur du film $h$ est adimensionné par l'épaisseur $h^{Nu} = 1,174 \times 10^{-3} m$ . Les profils sont tracés à $t = 1,2s$ . . . . .	156
5.28	Evolution de de la différence relative $r_b$ entre la hauteur du bourrelet $h^{bulk}$ et la hauteur de l'écoulement de Nusselt $h^{Nu}$ en fonction du rayon d'action $h_*$ . Les données sont regroupées dans le tableau 5.13. Une échelle logarithmique est utilisée. La ligne en pointillé verte représente l'interpolation polynômiale des points (en vert) dans la zone $h_* \geq \Delta x$ réalisée avec l'outil "spline interpolation" de matlab. . . . .	157
5.29	Domaine de stabilité d'un film plat d'épaisseur uniforme $h_o$ sur un plan horizontal pour un angle de contact statique $\theta_s = 60^\circ$ . L'épaisseur $h_o$ et le paramètre $h_*$ sont adimensionnés par la longueur capillaire $l_c$ . Les croix correspondent aux cas $(h_*/l_c, h_o/l_c)$ étudiés dans cette section. Une échelle logarithmique est utilisée. . . . .	159
5.30	Evolution temporelle de d'un film d'épaisseur initiale $h_o = 2,633 \times 10^{-4} m$ en fonction du rayon d'action $h_*$ . Les données du calcul sont résumées dans le tableau ?? . . . . .	160
6.1	Film2D . . . . .	166
6.2	Représentation d'un film s'écoulant à débit constant uniformément dans la direction transversale $y$ . . . . .	174
6.3	Représentation de l'apparition d'une instabilité transversale au voisinage du point triple d'un film s'écoulant à débit constant uniformément dans la direction transversale $\tilde{y}$ . . . . .	176
6.4	Notations associées à une cellule $\Omega_i$ et une de ses cellules voisines $\Omega_j$ . . . . .	179
6.5	Définition du voisinage d'une cellule $\Omega_i$ et d'un noeud $P_i$ . . . . .	180
6.6	Définition de la cellule limite $\Omega'_j$ (en pointillée bleu) construite par symétrie de la cellule interne $\Omega_i$ (grisée). . . . .	181
6.7	Identification des points utilisés pour le calcul du gradient discret au centre $\mathbf{G}_i$ d'une cellule $\Omega_i$ par la méthode des moindres carrés. . . . .	183
6.8	Identification des points utilisés pour le calcul du gradient discret au centre $\mathbf{B}_{ij}$ d'une face $\Gamma_{ij}$ par la méthode des moindres carrés. . . . .	184

6.9 Identification des points utilisés pour l'interpolation des valeurs discrètes connues aux centres des cellules vers un sommet  $P_i$  par une méthode des moindres carrés. . . . . 186

6.10 Notations associée à une cellule diamant  $\Omega_{ij}$ . . . . . 189

7.1 Représentation schématique de l'étalement stationnaire d'un film injecté sur une plaque verticale. . . . . 196

7.2 Evolution temporelle d'un film liquide injecté sur un substrat vertical. Le rayon d'action  $h_*$  vaut  $10^{-4} m$ , la longueur de glissement  $b$  vaut  $10^{-8} m$ , la résolution du maillage  $\Delta_\Omega$  vaut  $3 \times 10^{-4} m$  et l'angle de contact statique  $\theta_s$  est égal à  $68^\circ$ . . . . . 197

7.3 Profil d'épaisseur à  $t = 0, 2 s$  d'un film liquide injecté sur un substrat vertical en fonction de l'angle de contact statique  $\theta_s$ . La longueur de pincement est symbolisée par le trait continu blanc. Les données du calcul sont résumées dans le tableau 7.3. . . . . 199

7.4 Profil 2D d'épaisseur du film  $h(x)$  à différentes coordonnées  $y$  et à  $t = 0, 2 s$  du cas  $\theta_s = 68^\circ$ . . . . . 199

7.5 Profil d'épaisseur à  $t = 0, 3 s$  d'un film d'eau injecté sur un substrat vertical en fonction du débit volumique  $Q$ . La longueur de pincement est symbolisée par le trait continu blanc. Les données du calcul sont résumées dans le tableau 7.7. . . . . 202

7.6 Profil d'épaisseur à  $t = 0, 6 s$  d'un mélange eau/glycérine injecté sur un substrat vertical en fonction du débit volumique  $Q$ . La longueur de pincement est symbolisée par le trait continu blanc. Les données du calcul sont résumées dans le tableau 7.7. . . . . 203

7.7 Profil d'épaisseur à  $t = 1 s$  d'un mélange eau/glycérine injecté sur un substrat vertical en fonction du débit volumique  $Q$ . La longueur de pincement est symbolisée par le trait continu blanc. Les données du calcul sont résumées dans le tableau 7.8. . . . . 204

7.8 Clichés expérimentaux obtenus par Johnson dans le cas du fluide B. Les conditions d'injection et l'inclinaison du plan ne sont pas donnés. . . . . 205

7.9 Profil transversal d'un ruisselet.  $d$  représente l'espacement entre deux ruisselets et  $w$  l'étalement du ruisselet. . . . . 206

7.10 Représentation d'un film s'écoulant à débit constant uniformément dans la direction transversale  $y$ . . . . . 207

7.11 Simulations numériques obtenues pour différents pas de maillage  $\Delta x$  du cas  $(Re ; \beta^y) = (0, 52 ; 27, 9^\circ)$  des expériences de Johnson avec le fluide B. Le rayon d'action  $h_*$  vaut  $1, 174 \times 10^{-4} m$  et la longueur de glissement  $b$  vaut  $10^{-8} m$ . Les profils d'épaisseurs, adimensionnés par l'épaisseur  $h^{Nu} = 1, 174 \times 10^{-3} m$ , sont tracés à  $t = 0, 1 s$ , à  $t = 0, 6 s$  et à  $t = 1, 1 s$ . . . . . 208

7.12  $Re = 0, 52$  et  $\beta = 13, 9^\circ$  . . . . . 211

7.13  $Re = 0, 52$  et  $\beta = 27, 9^\circ$  . . . . . 212

7.14  $Re = 0, 52$  et  $\beta = 90^\circ$  . . . . . 213

7.15  $Re = 0, 26$  et  $\beta = 90^\circ$  . . . . . 214

7.16  $Re = 0, 13$  et  $\beta = 13, 9^\circ$  . . . . . 215

7.17  $Re = 0, 13$  et  $\beta = 27, 9^\circ$  . . . . . 216

7.18  $Re = 0, 13$  et  $\beta = 90^\circ$  . . . . . 217

7.19	Clichés expérimentaux du mélange "Eau/Glycérine 80" injecté sur un plaque verticale avec un débit volumique $Q = 1,25 \times 10^{-5} m^3.s^{-1}$ . . . . .	219
7.20	Simulation numérique de l'écoulement 2D du mélange "Eau/Glycérine 80" injecté sur une plaque verticale avec un débit volumique linéaire $q^x = 1,79 \times 10^{-4} m^2.s^{-1}$ . Le rayon d'action $h_*$ vaut $10^{-4} m$ , l'angle de contact statique $\theta_s$ vaut $82,5^\circ$ , la longueur de glissement $b$ vaut $10^{-8} m$ et la pas de maillage $\Delta x$ vaut $3 \times 10^{-4} m$ . L'épaisseur du film est adimensionnée par celle de l'écoulement de Nusselt $h^{Nu}$ . Le facteur d'amplification temporel calculé à partir du profil d'épaisseur vaut $\omega_i = +7,38 \times 10^{-4} \times k^2 s^{-1}$ . . . . .	220
7.21	Répartition aléatoire de l'angle de contact statique $\theta_s$ obtenue à partir de la fonction FORTRAN $rand(0)$ . . . . .	221
7.22	Evolution temporelle de l'épaisseur du film d'un mélange eau/glycérine injecté sur un substrat vertical avec un débit volumique $Q = 1,25 \times 10^{-5} m^3.s^{-1}$ . . . . .	222
7.22	Evolution temporelle de l'épaisseur du film d'un mélange eau/glycérine injecté sur un substrat vertical avec un débit volumique $Q = 1,25 \times 10^{-5} m^3.s^{-1}$ . . . . .	223
7.23	$Re = 0,52$ , $\beta^y = 0^\circ$ , $\tau_i^x = 7,166 Pa$ . . . . .	225
7.24	$Re = 0,26$ et $\beta^y = 0^\circ$ , $\tau_i^x = 5,725 Pa$ . . . . .	226
7.25	$Re = 0,13$ et $\beta^y = 0^\circ$ , $\tau_i^x = 4,544 Pa$ . . . . .	227
A.1	Représentation simplifiée de la formation d'un film mince sur un profil d'aile aéronautique. . . . .	243
A.2	Représentation de l'écoulement stationnaire d'un film piloté par la gravité et le cisaillement gazeux. . . . .	245
C.1	Représentation d'un film s'écoulant à débit constant uniformément dans la direction transversale $y$ . . . . .	251
C.2	Représentation de l'apparition d'une instabilité transversale au voisinage du point triple d'un film s'écoulant à débit constant uniformément dans la direction transversale $\tilde{y}$ . . . . .	253
E.1	Evolution temporelle d'un film liquide injecté sur un substrat vertical en fonction du rayon d'action $h_*$ . Les données du calcul sont résumées dans le tableau E.3. . . . .	264
E.2	Epaisseur du film à $t = 0,1 s$ du cas $h_* = 10^{-4} m$ et $\Delta_\Omega = 1,5 \times 10^{-4} m$ . La ligne en pointillée représente l'abscisse $x$ à laquelle l'étalement $d^{num}$ du film est évalué. Les données du calcul sont résumées dans le tableau E.4. . . . .	265
E.3	Tracé de l'évolution de l'étalement $d^{num}$ en fonction de la résolution du maillage $\Delta_\Omega$ . Une échelle logarithmique est utilisée. . . . .	266
E.4	Evolution du profil 2D d'épaisseur du film $h(x)$ obtenu par simulation numérique à une distance $x = 0,015 m$ de l'injecteur et à $t = 0,1 s$ en fonction de la résolution du maillage $\Delta_\Omega$ . . . . .	266
F.1	Evolution du profil longitudinal d'un film tombant à des intervalles de temps $\Delta t = 0,4 s$ en fonction de la tension de surface $\gamma_{lg}$ . L'épaisseur du film est adimensionnée par l'épaisseur $h^{Nu}$ de l'écoulement de Nusselt. Le tracé bleu (resp. le tracé rouge) représente le cas $\gamma_{lg} = 10^{-3} N.m^{-1}$ (resp. le cas $\gamma_{lg} = 0,68 N.m^{-1}$ ) et a été réalisé avec pas de maillage $\Delta x$ de $5 \times 10^{-4} m$ (resp. de $2 \times 10^{-3} m$ ). La longueur de glissement est fixée à $10^{-8} m$ . . . . .	268

F.2 Stabilité d'un film tombant en réponse à une perturbation au niveau de la ligne triple en fonction de la tension de surface  $\gamma_{lg}$ . Les données du calcul sont résumées dans le tableau F.3. . . . . 270



# Liste des tableaux

5.1	Propriétés à température ambiante du liquide étudié. . . . .	130
5.2	Evolution de l'angle $\theta_{num}$ , de l'étalement $W_{num}$ , et de l'erreur $E_{h_*}$ obtenus numériquement à $t = 10s$ en fonction du paramètre $h_*$ . Le pas de maillage est fixé à $\Delta x = 2.22 \times 10^{-5} m$ . Le pas de temps est de $\Delta t = 10^{-4} s$ pour l'ensemble des simulations. . . . .	133
5.3	Evolution de l'angle $\theta_{num}$ , de l'étalement $W_{num}$ , et de l'erreur $E_{h_*}$ obtenus numériquement à $t = 10s$ en fonction du pas de maillage $\Delta x$ . Le rayon d'action $h_*$ est fixé à $\Delta x = 1.749 \times 10^{-4} m$ . Le pas de temps moyen $\Delta t$ est d'environ $10^{-4} s$ . . . . .	136
5.4	Propriétés à température ambiante du liquide étudié. . . . .	138
5.5	Evolution de l'angle apparent $\theta_{num}$ et de l'étalement $x_{CP}$ obtenus par simulation numérique en fonction du couple d'angle $(\theta_i, \theta_s)$ . . . . .	139
5.6	Propriétés à température ambiante du liquide étudié. . . . .	142
5.7	Evolution de la régression linéaire $\theta_{num}^3 = r \times C_a$ en fonction de la longueur de glissement $b$ . . . . .	144
5.8	Influence du pas de maillage $\Delta x$ sur la régression linéaire $\theta_{num}^3 = r \times C_a$ et sur la régression polynômiale $h(0, t) - h(0, 0) = K/t^n$ . La longueur de glissement est fixée à $b = 4 \times 10^{-6} m$ . . . . .	146
5.9	Influence du rayon d'action $h_*$ sur la régression linéaire $\theta_{num}^3 - \theta_s^3 = a \times C_a$ . La dernière colonne donne la norme $L_2$ de l'erreur entre les résultats numériques et la régression. . . . .	149
5.10	Propriétés à température ambiante du liquide et du substrat étudiés. . . . .	151
5.11	Influence de la longueur de glissement $b$ sur la géométrie du profil d'épaisseur d'un film totalement mouillant. Le pas de maillage $\Delta x$ est fixé à $2 \times 10^{-5} m$ et le pas de temps de simulation $\Delta t$ à $1,5 \times 10^{-6} s$ . $r_b$ désigne l'écart relatif entre la hauteur du bourrelet et la hauteur de l'écoulement de Nusselt. . . . .	154
5.12	Influence de la longueur de glissement $b$ sur la géométrie du profil d'épaisseur d'un film partiellement mouillant. L'angle de contact statique $\theta_s$ est fixé à $38^\circ$ et le rayon d'action $h_*$ à $10^{-4} m$ . Le pas de maillage $\Delta x$ est fixé à $2 \times 10^{-5} m$ et le pas de temps de simulation $\Delta t$ à $1,5 \times 10^{-6} s$ . $r_b$ désigne l'écart relatif entre la hauteur du bourrelet et la hauteur de l'écoulement de Nusselt. . . . .	156

5.13	Influence du rayon d'action $h_*$ sur la géométrie du profil d'épaisseur d'un film partiellement mouillant d'angle de contact statique $\theta_s = 38^\circ$ . La longueur de glissement $b$ est fixée à $10^{-5} m$ . Le pas de maillage $\Delta x$ est fixé à $2 \times 10^{-5} m$ et le pas de temps de simulation $\Delta t$ à $1,5 \times 10^{-6} s$ . $r_{h_*}$ désigne la différence relative entre la hauteur du bourrelet et la hauteur de l'écoulement de Nusselt. . . . .	157
5.14	Propriétés à température ambiante du liquide étudié. . . . .	158
7.1	Conditions d'injection . . . . .	197
7.2	Propriétés à température ambiante du liquide étudié . . . . .	197
7.3	Comparaison de la longueur de pincement $L^{num}$ obtenue par simulation numérique à $t = 0,2 s$ avec celle obtenue expérimentalement $L^{exp} = 0,05 m$ en fonction de l'angle de contact statique $\theta_s$ . Le rayon d'action moléculaire $h_*$ est fixé à $10^{-4} m$ , la résolution du maillage $\Delta_\Omega$ à $3 \times 10^{-4} m$ , et le CFL est pris égal à 0,1 induisant un pas de temps moyen de simulation $\Delta t$ de $4 \times 10^{-6} s$ . . . . .	200
7.4	Propriétés des liquides et du substrat . . . . .	200
7.5	Conditions d'injections . . . . .	200
7.6	Comparaison de la longueur de pincement $L^{num}$ obtenue par simulation numérique à $t = 0,3 s$ avec celle obtenue expérimentalement $L^{exp}$ en fonction de l'angle de contact statique $\theta_s$ et du débit volumique d'injection $Q$ . . . . .	202
7.7	Comparaison de la longueur de pincement $L^{num}$ obtenue par simulation numérique à $t = 0,6 s$ avec celle obtenue expérimentalement $L^{exp}$ en fonction de l'angle de contact statique $\theta_s$ et du débit volumique d'injection $Q$ . . . . .	203
7.8	Comparaison de l'étalement $d^{num}$ du film à l'abscisse $x = 0,02 m$ obtenu par simulation numérique à $t = 1 s$ avec celui obtenu expérimentalement $d^{exp}$ en fonction de l'angle de contact statique $\theta_s$ et du débit volumique d'injection $Q$ . . . . .	204
7.9	Propriétés à température ambiante du fluide B. . . . .	205
7.10	Evolution de l'espacement $w^{exp}$ et de la largeur $d^{exp}$ expérimental des ruisselets en fonction du Reynolds d'injection du liquide et de l'inclinaison $\beta^y$ du plan. Données expérimentales obtenues par Johnson [31] avec le fluide B. . . . .	206
7.11	Evaluation du facteur d'amplification temporel $\omega_i$ à l'aide du profil $h_o(\xi)$ obtenu par simulation numérique bidimensionnelle. . . . .	209
7.12	Evolution de l'espacement $w$ et de la largeur $d$ des ruisselets en fonction du Reynolds d'injection du liquide et de l'inclinaison $\beta$ du plan. Comparaison des simulations numériques avec les résultats expérimentaux de Johnson [31] avec le fluide B. . . . .	210
7.13	Récapitulatif des paramètres numériques. . . . .	211
7.14	Récapitulatif des paramètres numériques. . . . .	214
7.15	Récapitulatif des paramètres numériques. . . . .	215
7.16	Débit linéique d'injection et taux de cisaillement des configurations simulées. . . . .	224
7.17	Récapitulatif des paramètres numériques. . . . .	224
7.18	Evolution de l'espacement $w$ et de la largeur $d$ des ruisselets en fonction du taux de cisaillement du gaz $\tau_i^x$ sur un plan horizontal. . . . .	225
E.1	Conditions d'injection . . . . .	263
E.2	Propriétés à température ambiante du liquide étudié. . . . .	263

E.3	Etude de la stabilité du film en fonction du rayon d'action $h_*$ . L'angle de contact statique $\theta_s$ est fixé à $68^\circ$ et la résolution du maillage $\Delta_\Omega$ à $3 \times 10^{-4} m$ .	265
E.4	Evolution de l'étalement $d^{num}$ obtenu par simulation numérique à une distance $x = 0,015 m$ de l'injecteur et à $t = 0,1 s$ en fonction de la résolution du maillage $\Delta_\Omega$ . Le rayon d'action $h_*$ est fixé à $10^{-4} m$ .	266
F.1	Propriétés à température ambiante du liquide étudié	267
F.2	Conditions d'injection	268
F.3	Récapitulatif des paramètres numériques.	269



# Introduction

## Contexte de l'étude

Dès le début du XX<sup>e</sup> siècle, le givrage a été reconnu comme risque majeur dans le domaine de l'aéronautique [1]. L'accrétion de givre se produit lorsque des gouttelettes d'eau surfondues se déposent sur une surface et gèlent après l'impact. La présence d'un dépôt de givre peut induire une surcharge de l'appareil, une diminution des performances aérodynamiques (plus particulièrement dans le cas où le dépôt se trouve sur une surface portante), des risques pour le moteur en cas d'injection de cristaux ou d'obturation des entrées d'air, ou encore le dysfonctionnement d'une sonde. Par conséquent, les industriels de l'aviation développent depuis les années 1920 des systèmes de protection afin de se prémunir contre ces risques. Sur la grande majorité de la flotte mondiale, y compris sur les avions très récents, les systèmes de protection les plus répandus sont des systèmes à prélèvement d'air chaud. Lorsque l'avion rencontre des conditions givrantes, de l'air chaud est prélevé dans les moteurs (par exemple à la sortie du compresseur du turboréacteur) et injecté dans la zone à protéger (bord d'attaque de la voilure par exemple). Ces systèmes, dits d'antigivrage, fonctionnent sans discontinuer et empêchent les gouttes surfondues qui impactent les surfaces protégées de geler et de former un dépôt de givre. Ils possèdent en revanche l'inconvénient d'engendrer une importante consommation de carburant.

C'est pourquoi des systèmes de protection électrothermiques (ETIPS pour Electro-Thermal Ice Protection System) sont aujourd'hui à l'étude. Le principe est de positionner des résistances électriques dans les zones que l'on souhaite protéger.

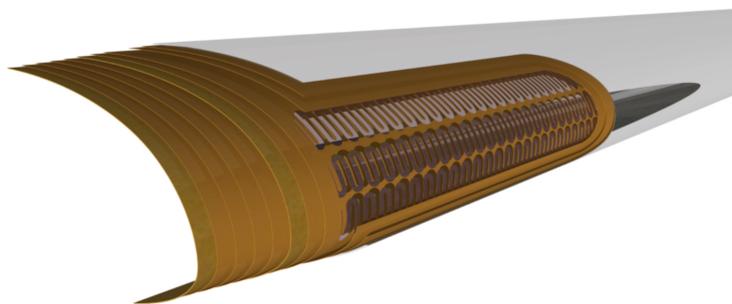


FIGURE 2 – Illustration d'un ETIPS (source FMLC <http://www.fmlc.nl/>)

À moyen terme il est très probable qu'ils remplaceront les systèmes à prélèvement d'air chaud car ils présentent de nombreux avantages. Le premier est de ne pas nécessiter le transport d'un fluide, ce qui permet de réduire significativement la masse et de s'affranchir

des problèmes mécaniques (fuites, usure, etc.). Un deuxième avantage est que ces systèmes peuvent fonctionner de manière plus souple que les systèmes à prélèvement d'air chaud. En particulier, un moyen de réduire la consommation d'énergie consiste à optimiser la puissance chauffante pour que seule une partie de l'eau impactante soit évaporée, la partie restante pouvant former un film d'eau et regeler en aval de la zone protégée (Runback ice). Toutefois les accumulations de givre dues au regel peuvent conduire à des dégradations importantes des performances aérodynamiques voire même être dangereuses pour la sécurité de l'avion. Il faut donc, lorsqu'on conçoit un ETIPS, être capable de prévoir la localisation, l'épaisseur et la forme des accumulations de glace.

Des études expérimentales ont montré que le film d'eau qui se forme par coalescence des gouttes impactant la surface et qui est entraîné vers l'aval par les forces aérodynamiques, n'est pas stable et se sépare généralement en ruisselets qui peuvent regeler plus loin dans les zones non-protégées, comme on peut le constater sur les clichés expérimentaux de la figure 3. La transition d'un film continu en ruisselets modifie les surfaces d'échanges entre l'air et le film ainsi qu'entre le paroi et le film. La puissance à fournir par les résistances chauffantes doit donc être adaptée en conséquence.

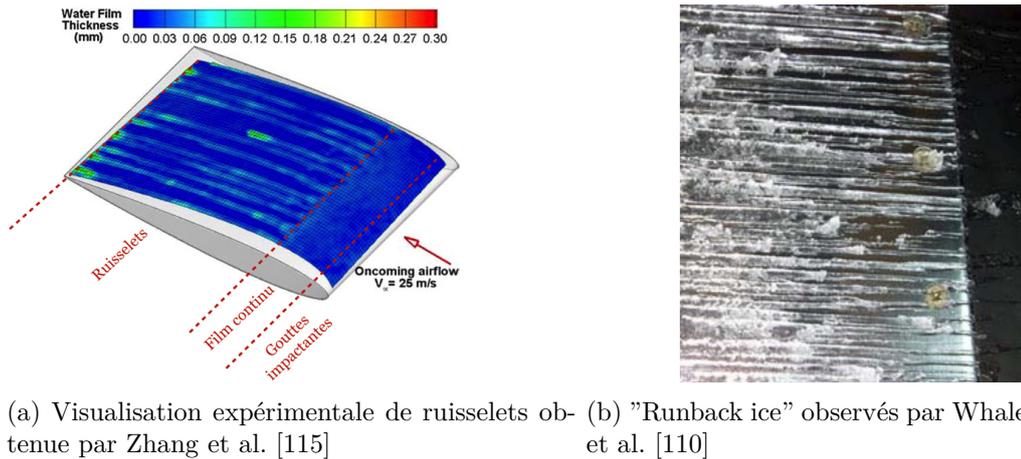


FIGURE 3 – Ecoulement en ruisselets d'un film liquide cisailé sur un profil d'aile. L'écoulement est dirigé de droite à gauche.

Actuellement, ces systèmes sont étudiés par les industriels et les centres de recherche à l'aide d'essais en soufflerie givrante. L'inconvénient de ce type d'essai est la complexité de mise en oeuvre, les coûts associés et la disponibilité des installations, car il existe dans le monde relativement peu de souffleries capables de reproduire des conditions givrantes à échelle réelle. La simulation numérique est donc également utilisée comme outil d'aide à la conception. Outre le prix dérisoire d'un calcul numérique comparé à une expérience, l'intérêt est d'avoir accès à toutes les grandeurs locales, et également de pouvoir mener facilement des études paramétriques. Ainsi, plusieurs codes de givrage ont été développés depuis les années 80 dans le monde, on peut par exemple citer le code LEWICE (NASA) [3] ou le code IGLOO (ONERA) [84]. Dans le cas du code IGLOO, quatre solveurs indépendants que l'on peut représenter schématiquement sur la figure 4 s'exécutent de façon chaînée : un solveur d'aérodynamique externe, un solveur de trajectographie (pour déterminer les zones de la paroi sur lesquelles les gouttes vont se déposer), un solveur de couche limite

(pour modéliser les échanges thermiques) et un solveur d'accrétion (pour calculer la forme du dépôt de givre sur la paroi).

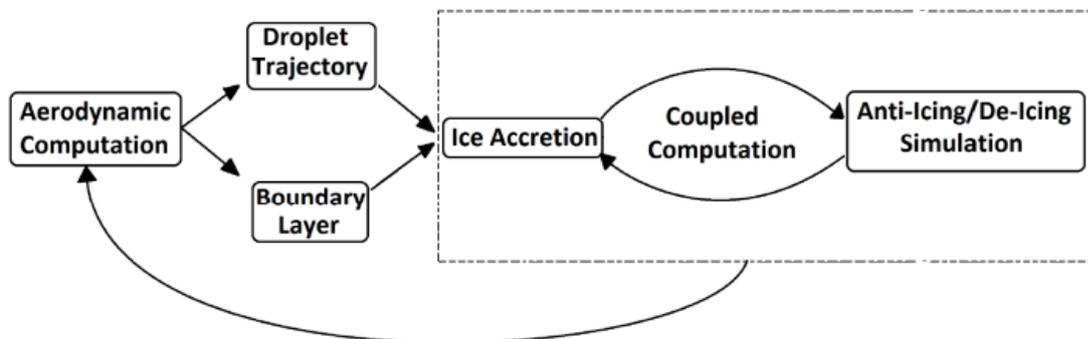


FIGURE 4 – Structure générale d'un code de givrage [84].

Les modèles utilisés dans les outils numériques actuels pour simuler la dynamique d'étalement du film ne tiennent pas compte des forces capillaires ni des forces moléculaires au niveau de la ligne triple, qui est la ligne où les 3 interfaces solide/liquide, solide/gaz et liquide/gaz sont confondues et interagissent. Ces forces jouent pourtant un rôle essentiel sur les phénomènes de mouillage. Par conséquent, les outils actuels ne sont pas capables de prévoir la séparation en ruisselets. Pour tenir compte de celle-ci, les modèles utilisés font appel à des méthodes empiriques qui consistent à corriger la surface mouillée à l'aide d'un coefficient correctif compris entre 0 et 1.

## Objectifs de la thèse

L'objectif de la thèse est d'aller plus loin que les approches actuelles de modélisation des films liquides grâce à une meilleure compréhension des phénomènes physiques en jeu et en développant un nouveau modèle plus complexe tenant compte des effets capillaires et de mouillage. Ce modèle doit permettre en particulier de simuler la transition d'un film en ruisselets. De plus, il doit être adapté pour des simulations dans un contexte industriel (faible coût de calcul, utilisation de maillages non-structurés généraux). En raison du caractère fortement multi-échelles des phénomènes rencontrés (échelle de longueur des phénomènes de mouillage de l'ordre du nanomètre, échelle de longueur des phénomènes capillaires de l'ordre du millimètre, échelle d'étalement du film de l'ordre du mètre), l'utilisation d'une approche de type DNS est exclue car elle conduirait à des temps de calcul trop importants. Une approche qui consiste plutôt à étudier les caractéristiques macroscopiques d'un film tel que son épaisseur ou sa vitesse moyenne a été privilégié. Cette approche, dite "intégrale", sera présentée plus en détail dans la partie I du manuscrit consacrée à l'état de l'art.

## Plan du manuscrit

Le mémoire est organisé en trois parties.

La première partie est composée de deux chapitres. Le premier introduit les notions indispensables de capillarité et de mouillage qui jouent un rôle central dans le comportement d'un liquide déposé sur un substrat solide. Le chapitre 2 présente un état de l'art général sur les modèles réduits permettant de simuler la dynamique d'un film liquide. Nous introduisons également les différentes techniques de modélisation existantes permettant de prendre en compte les phénomènes de capillarité et de mouillage, en soulignant leurs avantages et inconvénients respectifs afin d'orienter et de justifier les choix effectués pour la suite de l'étude.

En seconde partie, nous présentons en trois chapitres l'approche retenue pour modéliser et simuler numériquement la dynamique d'un film en deux dimensions. On introduit au chapitre 3 un nouveau modèle continu 2D qui tient compte de l'ensemble des phénomènes physiques rencontrés dans les applications visées (gravité, capillarité, cisaillement de la couche limite gazeuse, interactions moléculaires à la ligne de triple) qui pilotent l'étalement d'un film à l'échelle macroscopique. Le chapitre 4 décrit les méthodes numériques retenues pour la discrétisation spatiale et temporelle des équations du modèle. Le chapitre 5 est consacré à la validation. Les cas tests utilisés correspondent à des configurations académiques bien référencées dans la littérature. Ceux-ci permettent de s'assurer que l'approche adoptée permet de reproduire avec une précision satisfaisante les mécanismes physiques élémentaires mis en jeu dans le processus d'étalement d'un film (phénomènes inertiels, visqueux, capillaires et moléculaires).

La dernière partie, divisée en deux chapitres, présente l'extension tridimensionnelle du modèle proposé. Les équations et les méthodes numériques associées au modèle 3D sont décrites au chapitre 6 et leur application à différentes configurations d'étalement stationnaire et instationnaire est présentée au chapitre 7. Ne disposant que de peu de données expérimentales, les résultats obtenus ne permettent pas de valider totalement les hypothèses de modélisation utilisées, en particulier sur les cas de films cisailés. Cependant ils illustrent la capacité de l'approche développée au cours de cette thèse à traiter des configurations complexes (notamment de transition en ruisselets) couplant l'ensemble des phénomènes physiques intervenant dans le processus d'étalement d'un film sur un substrat.

## Première partie

# Etat de l'art sur la modélisation des écoulements de films minces



# Chapitre 1

## Capillarité et mouillage des films liquides

On introduit dans ce chapitre les deux concepts de capillarité et de mouillage qui sont à l'origine de la grande diversité de comportement des liquides déposés sur un substrat solide. Parmi l'ensemble des références citées, en particulier trois revues proposées par de Gennes [15], par Dussan [17] et plus récemment par Boon [19] résument bien la littérature sur le sujet et ont grandement contribué à l'établissement de l'état de l'art que nous allons présenter.

### Sommaire

---

<b>1.1 Les phénomènes capillaires . . . . .</b>	<b>29</b>
1.1.1 Tension de surface . . . . .	29
1.1.2 Pression de Laplace . . . . .	31
<b>1.2 Les phénomènes de mouillage . . . . .</b>	<b>32</b>
1.2.1 Origine du mouillage . . . . .	32
1.2.2 Angle de contact statique . . . . .	33
1.2.3 Profil statique d'une goutte en mouillage partiel . . . . .	35
1.2.4 Angle de contact dynamique . . . . .	36
1.2.5 Hystérésis de l'angle de contact . . . . .	37
<b>1.3 Conclusion . . . . .</b>	<b>38</b>

---

### 1.1 Les phénomènes capillaires

La capillarité est la science qui s'intéresse aux phénomènes interfaciaux entre deux phases non-miscibles. On aborde les concepts, indispensables à notre étude, de tension de surface et de pression de Laplace

#### 1.1.1 Tension de surface

Supposons que nous sommes en présence d'une phase liquide et d'une phase gazeuse non-miscibles en équilibre thermodynamique. La frontière entre ces deux phases est appelée interface. Au sein de chaque fluide les molécules exercent entre elles des forces principalement attractives (Van Der Waals). Dans la phase liquide, chaque molécule possède une énergie d'interaction  $e_l < 0$  résultat de l'interaction attractive avec son voisinage

immédiat. Il en est de même dans la phase gazeuse où on définit une énergie d'interaction  $e_g (> e_l)$ . Au voisinage de l'interface, il existe une fine couche dans laquelle les molécules sont soumises à l'action des deux phases, comme illustré sur la figure 1.1. L'épaisseur  $\delta_{int}$  de cette couche est de l'ordre de grandeur du rayon d'interactions moléculaires noté  $\mathfrak{R}$ , et l'énergie d'interaction  $e_{int}$  d'une molécule interfaciale vérifie  $e_l \leq e_{int} \leq e_g$ .

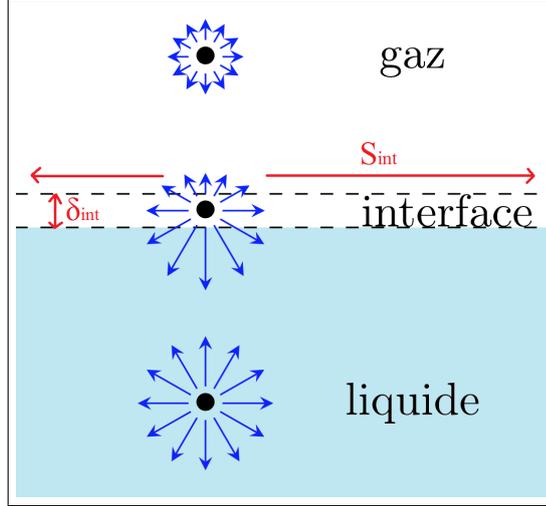


FIGURE 1.1 – Représentation schématique 2D des interactions moléculaires au voisinage d'une interface *liquide/gaz*. L'interface est caractérisée par une épaisseur  $\delta_{int}$  et une surface  $S_{int}$ .

Si on introduit  $N_l$  le nombre total de molécules de liquide et  $N_{l,int}$  le nombre de molécules de liquide dans la couche interfaciale, l'énergie de la phase liquide  $E_l$  s'écrit :

$$E_l = (N_l - N_{l,int}) e_l + N_{l,int} e_{int} = N_l e_l + E_{int} \quad (1.1)$$

et fait apparaître  $E_{int} = N_{l,int} (e_{int} - e_l)$  l'énergie associée à l'interface. Si on définit  $d_l$  la densité volumique (supposée constante) de molécules de liquide, l'énergie interfaciale se ré-écrit :

$$E_{int} = d_l \delta_{int} S_{int} (e_{int} - e_l) > 0 \quad (1.2)$$

qui est positive, ce qui signifie que les molécules interfaciales sont dans un état dit "défavorable" et vont chercher à minimiser leur énergie, ce qui revient d'après (1.2) à minimiser la surface de l'interface  $S_{int}$ . Sous la contrainte d'un volume donné, la surface qui minimise l'énergie  $E_{int}$  est une sphère en 3D (resp. un cercle en 2D), ce qui explique pourquoi des bulles de gaz carbonique dans du champagne sont sphériques.

Augmenter la surface d'une interface entre deux phases non-miscibles A et B coûte donc de l'énergie. A température et volume constant, une augmentation infinitésimale de l'aire  $dA$  de l'interface A/B nécessite alors un travail  $\delta W$  proportionnel à l'accroissement surfacique  $dA$  qui s'écrit :

$$\delta W = \gamma_{AB} dA \quad (1.3)$$

où  $\gamma_{AB}$  de la dimension d'une énergie surfacique, et donc d'une force linéique, est appelé dans la littérature "tension de surface". L'interface peut ainsi être vue comme une membrane tendue par une force linéique tangente à l'interface et égale à  $\gamma_{AB}$ .

### 1.1.2 Pression de Laplace

On considère une phase liquide à l'équilibre avec une phase gazeuse, telle que l'interface soit courbée uniquement dans le plan  $(xz)$  avec un rayon de courbure  $R$ . On constate sur la figure 1.2 que la résultante des forces de tension de surface  $d\vec{R} = d\vec{F}_1 + d\vec{F}_2 + d\vec{F}_3 + d\vec{F}_4$  n'est pas nulle, et a pour effet d'exercer une compression sur l'interface. Puisque l'interface est à l'équilibre, il existe donc en compensation une surpression à l'intérieur de la phase liquide appelée "Pression de Laplace".

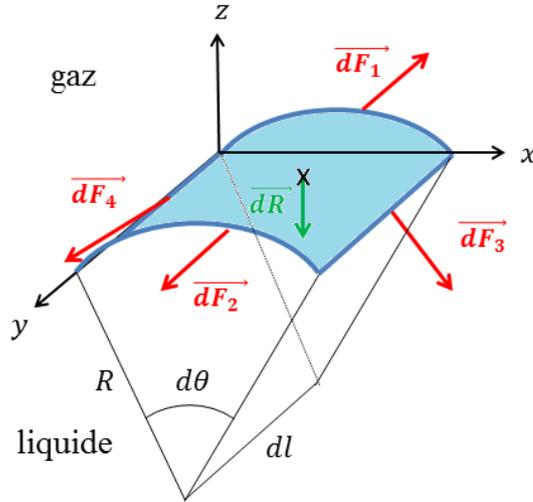


FIGURE 1.2 – Représentation des forces de tension de surface agissant sur une portion de surface d'une interface.

Soit  $P_l$  et  $P_g$  respectivement la pression au sein de la phase liquide et de la phase gazeuse. Si on augmente le rayon de courbure  $R$  de l'interface de  $dR$ , la variation du volume de liquide est de  $dV_l = R d\theta dR dl$ , et la variation de surface de l'interface est de  $dS = dR d\theta dl$ . Le travail des forces de pression au cours de cette opération est de :

$$\delta W_p = P_l dV_l + P_g dV_g = (P_l - P_g) R d\theta dR dl \quad (1.4)$$

Le travail des forces de tension de surface vaut :

$$\delta W_\gamma = \gamma_{lg} dS = \gamma_{lg} dR d\theta dl \quad (1.5)$$

Par le théorème des travaux virtuels, ces deux travaux sont égaux à l'équilibre, soit :

$$\delta W_\gamma = \delta W_p \implies (P_l - P_g) = \gamma_{lg} K \quad (1.6)$$

avec  $K = 1/R$  la courbure de l'interface *liquide/gaz*. Le saut de pression de Laplace  $\Delta P$  à la traversée de l'interface est donc proportionnel à sa courbure. Cette relation montre également qu'il n'y a pas de saut de pression dans le cas d'une interface plane puisque le rayon de courbure  $R$  est infini. La relation (1.6) est également valable en 3D pour n'importe quelle interface de courbure totale  $K = (1/R) + (1/R')$ , avec  $R$  et  $R'$  les rayons de courbure dans deux plans orthogonaux.

## 1.2 Les phénomènes de mouillage

Le mouillage est la science qui s'intéresse à la physique de l'étalement d'un liquide sur une surface solide. Il convient de considérer deux cas : le liquide s'étale complètement (mouillage total), ou le liquide se rassemble sous forme de gouttes ou de flaques (mouillage partiel), laissant une partie de la surface sèche. Les liquides usuels tels que l'eau présentent en général des propriétés de mouillage partiel. La pluie laisse par exemple des petites gouttes sur des plantes ou une flaque se forme quand on renverse un verre d'eau sur une table. Dans cette section, nous rappelons les principes généraux du mouillage utiles pour la suite du manuscrit, on y présente les notions d'angle de contact statique et dynamique, et d'hystérésis. Dans un souci de clarté, et sans nuire à la généralité, on travaillera dans cette section avec le cas d'une "goutte" 2D déposée sur un substrat.

### 1.2.1 Origine du mouillage

Lorsqu'un liquide se dépose sur une surface le tout environné par un gaz, comme représenté sur la figure 1.3c, nous sommes en présence de trois phases (liquide, solide et gazeuse). Il existe alors 3 interfaces dont les molécules au voisinage interagissent. Comme nous l'avons vu à la section 1.1.1, les molécules au voisinage de l'interface *liquide/gaz* sont dans un état défavorable, sa surface est donc susceptible de varier afin de minimiser son énergie. On se place dans le cas d'une goutte si petite que la gravité est négligeable et nous allons montrer par un simple raisonnement énergétique pourquoi cette goutte déposée sur le substrat solide va vouloir se rétracter ou s'étaler.

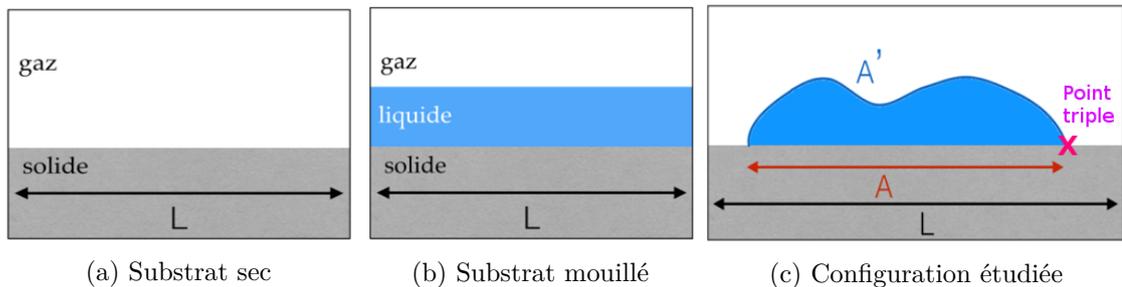


FIGURE 1.3 – Représentation d'un substrat sec, d'un substrat mouillé, et de la configuration étudiée. On désigne respectivement par  $L$ ,  $A$  et  $A'$  la surface (par unité de longueur) de la phase solide, celle de l'interface *solide/liquide* et celle de l'interface *liquide/gaz*.

On se place d'abord dans le cas d'un substrat sec illustré sur la figure 1.3a. La seule interface en présence est celle entre la phase solide et gazeuse. L'énergie linéique associée à ce système vaut :

$$E_{sec} = \gamma_{sg} L \quad (1.7)$$

avec  $L$  la surface (par unité de longueur) du substrat solide. Dans le cas d'un substrat mouillé, on voit sur la figure 1.3b que les interfaces *solide/liquide* et *liquide/gaz* co-existent. En supposant que ces deux interfaces n'interagissent pas, et en négligeant l'énergie linéique gravitationnelle, l'énergie linéique de ce système vaut :

$$E_{mouille} = (\gamma_{sl} + \gamma_{lg}) L \quad (1.8)$$

En définissant  $A$  la surface linéique de l'interface *solide/liquide* et  $A' > A$  celle de l'interface *liquide/gaz*, l'énergie linéique associée à la configuration représentée sur la figure 1.3c vaut :

$$\begin{aligned} E_{film} &= \gamma_{lg} A' + \gamma_{sl} A + \gamma_{sg} (L - A) \\ &= -S \times A + \gamma_{lg} A \left( \frac{A'}{A} - 1 \right) \end{aligned} \quad (1.9)$$

avec  $S$  appelé le paramètre d'étalement, qui représente la différence d'énergie entre le substrat sec et le substrat totalement mouillé.

$$S = \gamma_{sg} - (\gamma_{sl} + \gamma_{lg}) \quad (1.10)$$

Il est alors possible d'évaluer si un liquide va avoir tendance à s'étaler ou non sur un substrat en évaluant le signe du paramètre  $S$ .

- si  $S > 0$ , la surface  $A$  doit augmenter et le rapport de surface  $A'/A$  doit tendre vers 1 pour minimiser  $E_{film}$ . Le film va donc s'étaler à l'infini, le mouillage est dit total,
- si  $S < 0$ , la surface  $A$  doit diminuer pour réduire  $E_{film}$ , le film se rétracte. Par contre, le rapport  $A'/A$  augmente par conservation du volume, ce qui fait augmenter l'énergie quand le film démouille. Le film ne se rétracte donc pas indéfiniment et va adopter la forme d'équilibre qui minimise  $E_{film}$ , le mouillage est dit partiel.

Ce simple bilan d'énergie permet d'appréhender le mécanisme du mouillage, mais ne permet pas de trouver la forme d'équilibre du liquide en mouillage partiel. Il faut pour cela tenir compte des énergies associées aux interactions des interfaces au niveau du point triple (resp. ligne triple en 3D) représenté sur la figure 1.3c, qui est le point (resp. la ligne) où les 3 interfaces sont confondues.

### 1.2.2 Angle de contact statique

Nous avons précédemment supposé que les 3 interfaces ne pouvaient pas interagir, ce qui est uniquement vrai si la distance qui les sépare est grande devant le rayon d'action moléculaire  $\mathfrak{R}$  (typiquement de l'ordre du  $nm$ ). Cette hypothèse n'est pas valable au voisinage du point triple car les 3 interfaces se confondent et peuvent de ce fait interagir. A ce jour, il est encore difficile de décrire précisément ces interactions (van der Waals, électrostatique, polaire, double couche) à de telles échelles. On peut toutefois appréhender leurs effets sur une ligne triple à l'équilibre grâce à une représentation simplifiée introduite par Potash et Wayner [44] illustrée à la figure 1.4. Dans cette représentation, la ligne triple se décompose en trois régions. La région sèche correspond au substrat sec ( $h = 0$ ). La micro-région mouillée ( $h \sim \mathfrak{R}$ ) est le siège des interactions moléculaires, où la pente locale ( $\partial h / \partial x$ ) de l'interface *liquide/gaz* varie rapidement dans cette zone. Dans la macro-région, l'épaisseur du film est grande devant le rayon d'action moléculaire ( $h \gg \mathfrak{R}$ ) et les interfaces n'interagissent plus. La pente locale tend vers une valeur constante, l'interface forme ainsi un angle avec le substrat, noté  $\theta_s$ , que l'on appelle dans la littérature "angle de contact statique".

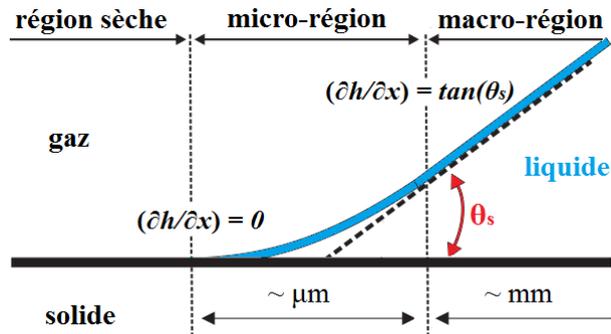


FIGURE 1.4 – Représentation de Potash et Wayner [44] de la ligne triple à différentes échelles d'un liquide partiellement mouillant.

Ainsi, les forces moléculaires ont des effets sur la géométrie de la goutte à l'échelle macroscopique. Ils sont quantifiables à travers l'angle de contact statique  $\theta_s$  qui est visible à l'oeil nu (figure 1.5), et donc mesurable expérimentalement. Cet angle peut être compris entre  $0^\circ$  et  $180^\circ$ .

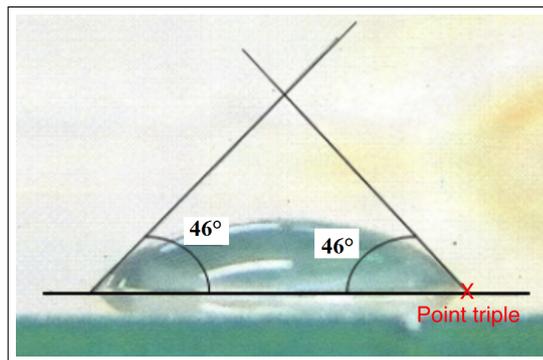


FIGURE 1.5 – Vue de côté d'une goutte à l'équilibre sur un substrat horizontal formant un angle de contact statique  $\theta_s = 46^\circ$  avec le substrat [22].

A l'aide de cette nouvelle donnée, on peut effectuer un bilan de forces au voisinage du point triple. Les forces de pression hydrostatique étant négligeables dans cette zone, l'équilibre est uniquement régi par une compétition entre les différentes tensions de surface, représenté sur la figure 1.6.

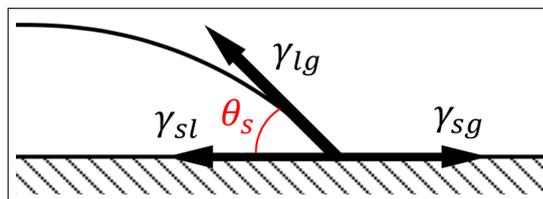


FIGURE 1.6 – Equilibre des forces de tension de surface au point triple illustrant la relation de Young-Dupré.

On obtient une relation d'équilibre liant les tensions de surface et l'angle de contact

statique, appelée relation de Young-Dupré, qui s'écrit :

$$\gamma_{lg} \cos(\theta_s) = \gamma_{sg} - \gamma_{sl} \quad (1.11)$$

Le paramètre d'étalement  $S$  est difficile à calculer tel qu'il est écrit sous la forme (1.10), en particulier  $\gamma_{sg}$  est difficile à évaluer. Mais en utilisant la relation (1.11), on peut le ré-exprimer uniquement en fonction de  $\gamma_{lg}$  et de  $\theta_s$  :

$$S = \gamma_{lg} [\cos(\theta_s) - 1] \quad (1.12)$$

Ainsi, plus l'angle de contact statique  $\theta_s$  est important, plus le paramètre d'étalement  $S$  est petit. D'après (1.9) le liquide va donc davantage se rétracter. Si l'angle  $\theta_s \leq 90^\circ$ , on parle de surface "hydrophile", et si  $\theta_s > 90^\circ$ , on parle de surface "hydrophobe".

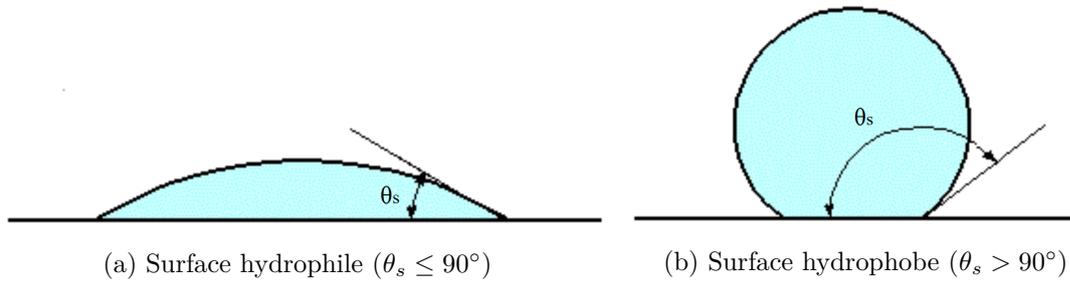


FIGURE 1.7 – Représentation d'une goutte à l'équilibre sur une surface hydrophile et hydrophobe.

### 1.2.3 Profil statique d'une goutte en mouillage partiel

Il est possible de définir une longueur en dessous de laquelle la gravité est négligeable devant les forces capillaires. On l'appelle longueur capillaire  $l_c$  et elle s'écrit :

$$l_c = \frac{\gamma_{lg}}{\rho g} \quad (1.13)$$

avec  $\rho$  la masse volumique du liquide et  $g$  l'accélération de la pesanteur. A des échelles inférieures à  $l_c$ , la pression hydrostatique est négligeable devant la pression de Laplace et on parle de régime capillaire. A des échelles supérieures à  $l_c$ , on parle de régime gravitaire.

La forme théorique d'équilibre d'une goutte de rayon  $r$  déposé sur un substrat horizontal est très bien connue et peut être trouvée dans la littérature [15]. On distingue deux cas particuliers schématisés sur la figure 1.8 :

- si  $r \ll l_c$ , une goutte 2D (reps. 3D) adopte un profil parabolique (reps. sphérique) qui forme un angle de contact  $\theta_s$  avec le substrat.
- si  $r \gg l_c$ , la goutte est aplatie par son propre poids. Elle adopte à l'équilibre une forme de flaque d'épaisseur  $e = 2 l_c \sin(\theta_s/2)$  loin du point triple [15] et forme un angle de contact  $\theta_s$  avec le substrat.

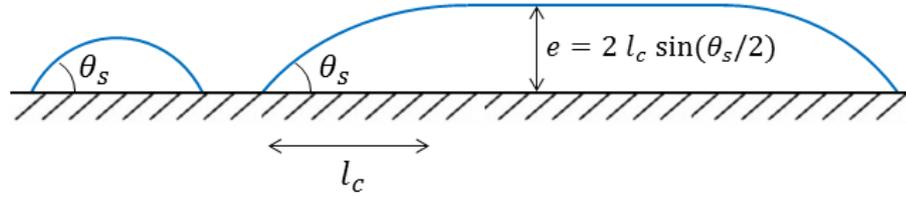


FIGURE 1.8 – Forme à l'équilibre d'une goutte 2D sur un plan horizontal en fonction de son rayon  $r$  par rapport à la longueur capillaire  $l_c$ .

#### 1.2.4 Angle de contact dynamique

La condition aux limites à la ligne triple d'une goutte statique, définie par une interface *liquide/gaz* formant un angle de contact  $\theta_s$  avec le substrat, n'est par contre pas valable dans le cas d'une ligne en mouvement. Ablett [23] a constaté que l'angle change lorsque le liquide est en mouvement et introduit la notion d'angle de contact dynamique  $\theta_d$ . Dussan [24] en a conclu plus tard que plus une ligne triple avance vite (par exemple par inclinaison croissante du substrat), plus l'angle de contact dynamique  $\theta_d$  est grand. Réciproquement, plus la ligne de contact recule rapidement, plus l'angle diminue. Ce constat est observable dans les expériences de Le Grand sur la figure 1.9, où l'on visualise une goutte se déplacer à vitesse croissante sur un substrat incliné.

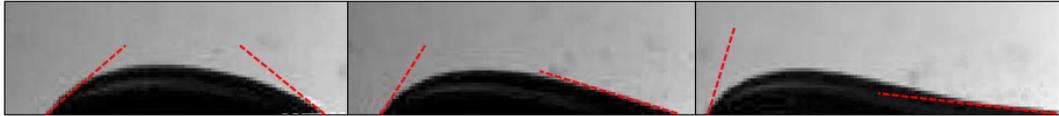


FIGURE 1.9 – Vues de côté d'une goutte d'huile s'écoulant à vitesse croissante sur un plan incliné. Expérience réalisée par Le Grand [22].

Cette loi dynamique a fait l'objet de nombreuses études cherchant à déterminer une équation d'évolution du type  $\theta_d = f(V_{LT})$  de l'angle de contact  $\theta_d$  en fonction de la vitesse de la ligne triple  $V_{LT}$ , tel celle tracée sur la figure 1.10. On peut notamment citer les modèles les plus célèbres de Cox-Voïnov [16] et de De Gennes [67] qui seront présentés dans la section 2.2.4 du manuscrit.

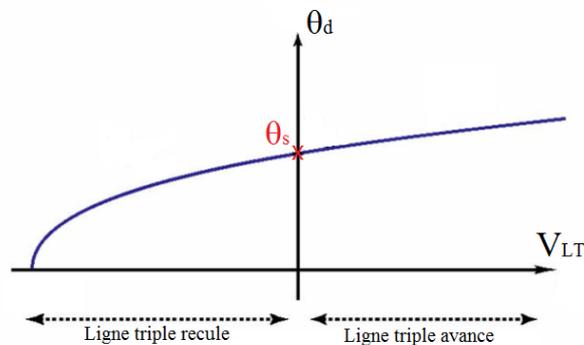


FIGURE 1.10 – Évolution de l'angle de contact dynamique  $\theta_d$  en fonction de la vitesse de la ligne triple  $V_{LT}$  d'après le modèle de Cox-Voïnov [16].

### 1.2.5 Hystérésis de l'angle de contact

À supposer que les concepts d'angle de contact statique et dynamique soient bien maîtrisés, il existe un phénomène statique dit "d'hystérésis de l'angle de contact" dont la description théorique demeure encore à ce jour un problème ouvert [19].

On se place dans le cas statique d'une goutte à l'équilibre sur un plan horizontal. La loi de Young introduite à la section 1.2.2 prédit que les deux points triples à l'avant et à l'arrière de la goutte adoptent le même angle  $\theta_s$ . La résultante des deux forces linéiques agissant de part et d'autres de la goutte est alors nulle, il y a bien équilibre, comme illustré sur la figure 1.11a. On se place maintenant dans le cas d'un plan incliné, une nouvelle composante gravitaire vient s'ajouter au bilan de forces. Si les angles de contact à l'avant et à l'arrière de la goutte restent égaux à  $\theta_s$ , la résultante des forces projetées sur le substrat fait s'écouler la goutte, comme on le voit la figure 1.11b.

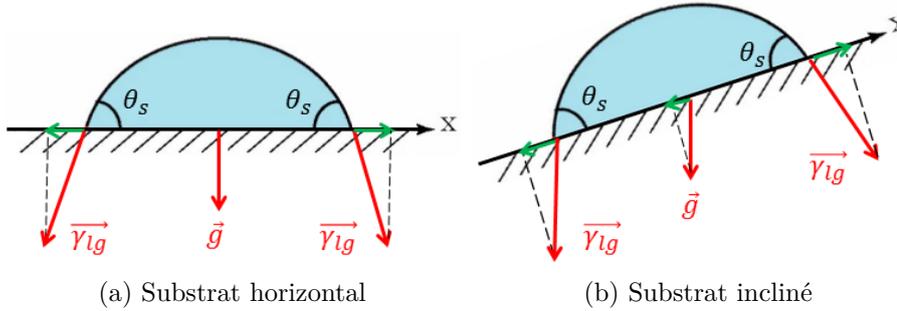


FIGURE 1.11 – Bilan de force d'une goutte sur un substrat dans l'hypothèse d'un angle de contact statique unique prédit par la loi de Young.

Cependant des expériences ont montré qu'une goutte peut rester accrochée à un substrat incliné, voire vertical [22]. La raison est que l'angle de contact statique n'est pas unique, mais peut en réalité prendre un continuum de valeurs  $\theta_s \in [\theta_s^{min}; \theta_s^{max}]$ . L'amplitude  $|\theta_s^{max} - \theta_s^{min}|$  de cet intervalle est appelé dans la littérature "hystérésis de l'angle de contact". Il est faible quand le substrat est lisse et homogène, et d'autant plus important que le substrat présente des hétérogénéités chimiques ou des rugosité à sa surface [15, 20].

Pour illustrer ce phénomène, on désigne par  $\theta_s^{amont}$  (reps.  $\theta_s^{aval}$ ) l'angle de contact statique en amont (resp. en aval) de la goutte. Si on incline le substrat, on observe expérimentalement que la goutte va se dissymétriser en adoptant des angles  $\theta_s^{amont}$  et  $\theta_s^{aval}$  différents schématisés sur la figure 1.12. La différence d'angles entre l'amont et l'aval crée une force de rappel, et la goutte va adopter une différence qui s'oppose exactement au poids de la goutte et rester à l'équilibre. Par contre, si la différence d'angle  $|\theta_s^{aval} - \theta_s^{amont}|$  nécessaire pour compenser le poids de la goutte dépasse la valeur de l'hystérésis  $|\theta_s^{max} - \theta_s^{min}|$ , alors la goutte va s'écouler.

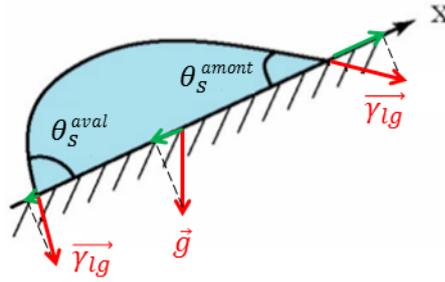


FIGURE 1.12 – Bilan de force d'une goutte sur un substrat incliné dans l'hypothèse d'un phénomène d'hystérésis de l'angle de contact.

Ce phénomène d'hystérésis induit donc un comportement statique de l'angle de contact bien plus complexe que celui introduit par Young, et influe en conséquence également son comportement dynamique [22]. On peut résumer cette influence statique et dynamique en s'appuyant sur la figure 1.13 montrant une équation type d'évolution  $\theta_d = f(V_{LT})$  incluant le phénomène d'hystérésis. On voit à l'équilibre ( $V_{LT} = 0$ ) qu'un angle de contact peut adopter une multitude de valeurs comprises entre deux extrémaux ( $\theta_s^{min}$  et  $\theta_s^{max}$ ) que l'on détermine généralement expérimentalement pour chaque configuration étudiée. Deux angles à l'amont et à l'aval peuvent alors créer une force compensant des actions extérieures (gravité, cisaillement) et maintenir la goutte à l'équilibre. Si les deux angles atteignent les valeurs extrémales, la goutte se met en mouvement et l'angle varie dynamiquement avec la vitesse de la ligne de contact, comme prédit par Cox et Voïnov.

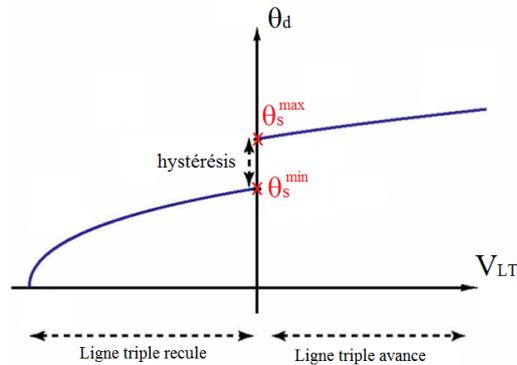


FIGURE 1.13 – Évolution de  $\theta_d$  en fonction de  $V_{LT}$  avec le phénomène d'hystérésis qui induit une discontinuité par rapport au modèle de Cox-Voïnov.

### 1.3 Conclusion

Les principales notions théoriques ayant trait à la capillarité et au mouillage ont maintenant été posées. Nous avons vu qu'il est possible de comprendre le mécanisme global du mouillage à l'aide de concepts assez simples tels que celui de tension de surface et d'angle de contact statique. Néanmoins, ces concepts s'avèrent insuffisants pour décrire les mécanismes locaux (angle dynamique, hystérésis) qui sont d'une grande complexité. Il faut recourir à des modélisations plus poussées qui vont faire l'objet du prochain chapitre dédié à l'état de l'art sur la modélisation et la simulation numérique de ces phénomènes.

# Chapitre 2

## Modèles réduits pour la dynamique d'un film

Ce chapitre a pour but de donner une vision générale des travaux existants sur la modélisation des écoulements de films liquides dans des situations faisant intervenir la capillarité et le mouillage. Nous verrons que la compréhension et la modélisation de ces phénomènes s'est faite de façon progressive dans le temps. En effet, la modélisation du mouillage fait encore à ce jour l'objet de nombreuses études car ce n'est qu'après que les phénomènes capillaires (tension de surface, pression de Laplace) ait été bien modélisés que la problématique de la ligne triple a été étudiée en détail. On se propose ainsi d'aborder ce chapitre en deux parties. La première est dédiée aux modèles intégraux proposés pour modéliser des écoulements avec capillarité seule. La deuxième se concentre sur les extensions proposées pour y inclure les phénomènes de mouillage.

### Sommaire

---

<b>2.1 Modèles sans ligne triple . . . . .</b>	<b>39</b>
2.1.1 Contexte . . . . .	40
2.1.2 Introduction aux instabilités en "Roll-Waves" . . . . .	40
2.1.3 Equation de lubrification de Benney . . . . .	42
2.1.4 Modèle Saint Venant de Shkadov . . . . .	47
<b>2.2 Modèles avec ligne triple . . . . .</b>	<b>49</b>
2.2.1 Contexte . . . . .	49
2.2.2 Introduction aux instabilités en "Ruisselets" . . . . .	49
2.2.3 Equation de lubrification . . . . .	54
2.2.4 Modélisation de l'angle de contact statique . . . . .	55
2.2.5 Lois d'angle de contact dynamique . . . . .	63
2.2.6 Condition aux limites à la paroi . . . . .	66
2.2.7 Prédiction et simulation numérique de la formation de ruisselets . . . . .	68
<b>2.3 Conclusion . . . . .</b>	<b>74</b>

---

### 2.1 Modèles sans ligne triple

On s'intéresse dans cette section aux premiers modèles intégraux proposés dans la littérature. Ils permettent de simuler avec une bonne précision la dynamique d'un film

liquide s'écoulant sur un plan incliné et tiennent compte des phénomènes capillaires. Ces modèles développés par Benney [6] et Shkadov [9] se limitent à des écoulements 2D et en régime permanent, le liquide recouvre donc intégralement le substrat et ne fait pas apparaître de ligne triple. Bien que ces modèles semblent à priori loin des applications visées dans ce travail, il est important de les introduire. Ils sont facilement extensibles en trois dimensions et ils constituent les modèles de base auxquels nous allons inclure la modélisation de la ligne triple.

### 2.1.1 Contexte

Les premiers modèles, qui ont fait l'objet de nombreux travaux au cours des dernières décennies, ont pour objet de simuler la dynamique d'un film liquide s'écoulant en régime permanent. Cette configuration, qui à première vue paraît simple, présente un régime d'écoulement favorable au développement d'instabilités longitudinales d'ondes de surface pouvant être fortement non linéaires (notamment à cause de la capillarité). Appelées dans la littérature "Roll-Waves", ces instabilités sont principalement observables dans nos rivières et nos canaux.



FIGURE 2.1 – Instabilités de type "Roll-Waves" apparaissant dans la rivière de Grunnbach, Allemagne. Source : Wikimedia Commons.

Ces études ont été principalement motivées par l'industrie car ces instabilités apparaissent également dans les écoulements de films cisailés par un gaz à la surface des échangeurs thermiques et modifient les échanges à l'interface entre le liquide et le gaz. Du point de vue de leur modélisation, ces écoulements présentent des particularités (petit Reynolds, vagues de grande longueur d'onde par rapport à leur épaisseur) qui permettent de simplifier les équations de Navier-Stokes (notées N-S). De nombreux modèles réduits ont émergé dans la littérature avec l'avantage d'offrir un gain en temps de calcul considérable par rapport à une résolution complète des équations de N-S.

### 2.1.2 Introduction aux instabilités en "Roll-Waves"

Les premières études dédiées à la compréhension de l'amplification des ondes interfaciales d'un film s'écoulant sur un plan incliné en régime établi ont été menées expérimentalement par Kapitza [99], suivi de Alekseenko et al. [102], Liu and Gollub [100] et Nosoko et al.

[101]. Ces derniers ont montré que pour des Reynolds (noté  $Re$  et défini par (2.12)) suffisamment grands, un écoulement établi est naturellement instable et présente deux régimes d'instabilité bien distincts. On voit sur la figure 2.2 que le film initialement plat et en régime stationnaire développe en premier lieu des instabilités d'onde de surface bidimensionnelles, évoluant dans le sens de l'écoulement, qui vont ensuite devenir tridimensionnelles.

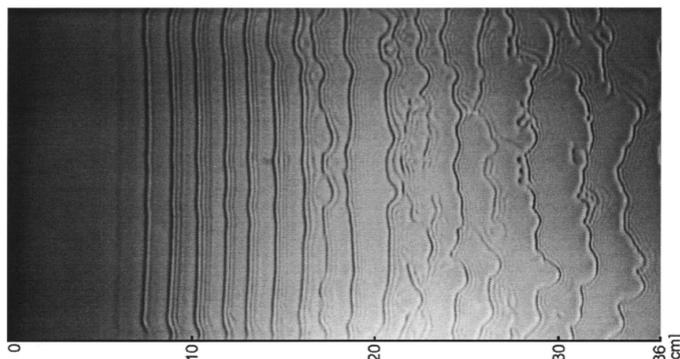
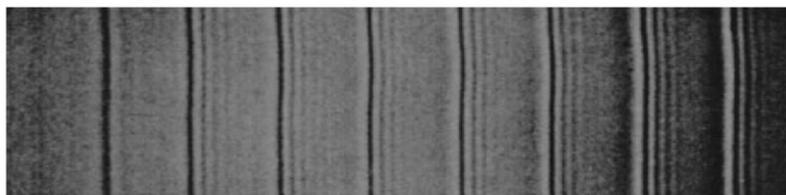
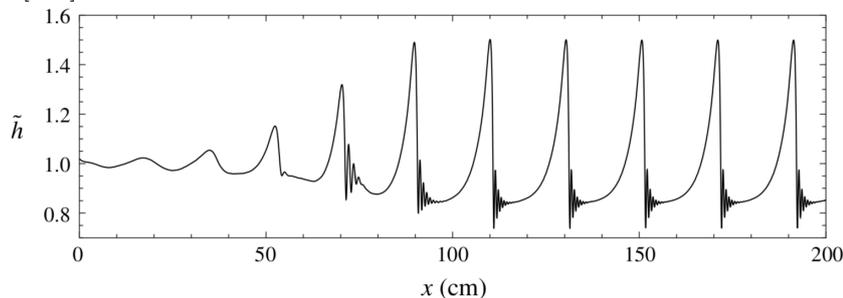


FIGURE 2.2 – Evolution des ondes à l'interface d'un film liquide s'écoulant (de gauche à droite) sur un plan vertical à  $Re = 32.7$ . Expérience réalisée par Park et Nosoko [103].

Afin de déterminer le mécanisme déclencheur de ces instabilités, Liu et Gollub [100] et Nosoko et Miyara [104], ont réalisé des expériences avec des conditions d'injection bien maîtrisées afin de générer un écoulement dont la dynamique est suffisamment longtemps bidimensionnelle pour pouvoir obtenir le profil des vagues tracé sur la figure 2.3b.



(a) Écoulement 2D obtenu expérimentalement par Nosoko et Miyara [104].



(b) Profil expérimental obtenu par Liu et Gollub [100].

FIGURE 2.3 – Amplification d'une petite perturbation à l'injection d'un liquide sur un plan vertical.

Ces expériences ont montré que des vagues forcées de faibles amplitudes à l'injection

du liquide peuvent s'amplifier. Aux temps longs, elles adoptent un profil périodique caractérisé par une haute vague principale (onde gravitationnelle), devancée par des petites vagues (ondes capillaires), que l'on appelle dans la littérature "Roll-waves". Ces auteurs ont également déterminé le régime critique à partir duquel ces instabilités apparaissent :

$$Re = \frac{h_o u_o}{\nu} > \frac{5}{6} \cot(\beta) \quad (2.1a)$$

$$Fr = \frac{u_o^2}{g h_o} > \frac{5}{18} \cos(\beta) \quad (2.1b)$$

avec  $Re$  et  $Fr$  respectivement le nombre de Reynolds et le nombre de Froude de l'écoulement,  $u_o$  la vitesse moyenne du liquide,  $h_o$  son épaisseur,  $\nu$  sa viscosité cinématique,  $g$  l'accélération de la gravité, et  $\beta$  l'inclinaison du plan. Ce Reynolds critique a été retrouvé théoriquement par Benjamin [105] et Yih [106] en résolvant une analyse de stabilité linéaire (ou LSA pour Linear Stability Analysis) des équations de Navier-Stokes 2D, aussi appelées équations d'Orr-Sommerfeld.

Des expériences réalisées par Kapitza [99] et Nosoko [104] ont montré qu'à petit nombre de Reynolds, i.e.  $Re = 0(1)$ , la longueur d'onde des vagues est toujours grande devant l'épaisseur du film. Cette observation a servi de base aux nombreux modèles qui sont apparus dans la littérature afin de modéliser et simuler ces écoulements dits "onde longue". Sous cette hypothèse, de nombreux auteurs ont ainsi écrits des modèles réduits 2D en simplifiant les équations de N-S. Ils sont capables de reproduire les expériences de Liu et Gollub et de retrouver le même Reynolds critique d'apparition des instabilités que celui obtenu par résolution des équations d'Orr-Sommerfeld.

### 2.1.3 Equation de lubrification de Benney

#### Formulation du problème

Le problème mathématique est formulé en considérant un film liquide incompressible en deux dimensions cisailé par un gaz et se déplaçant sur une surface solide inclinée d'un angle  $\beta$ . L'axe  $x$  est parallèle au substrat et l'axe  $z$  est perpendiculaire au substrat. La surface du liquide correspond donc à  $z = h(x, t)$ , où  $h$  est l'épaisseur du film liquide. Le champ de vitesse admet une composante  $u(x, z, t)$  longitudinale à l'écoulement (direction  $x$ ), et une composante  $v(x, z, t)$  normale (direction  $z$ ) à l'écoulement.

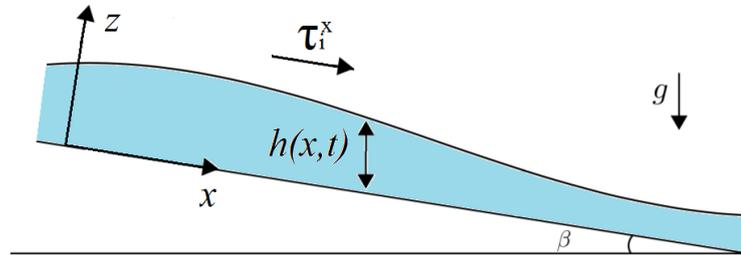


FIGURE 2.4 – Représentation 2D d'un film liquide séculant sur un plan incliné d'un angle  $\beta$  et soumis à un cisaillement gazeux  $\tau_i^x$ .

Benney a dédié ses travaux [6] à la modélisation des ondes interfaciales 2D d'un film

liquide s'écoulant sur une plaque inclinée. Il a développé une équation différentielle non-linéaire donnant l'évolution temporelle de l'épaisseur  $h(x, t)$  du film qui s'écrit :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(h\bar{u})}{\partial x} = 0 \quad (2.2)$$

avec l'opérateur  $\bar{*}$  défini par :

$$\bar{*} = \frac{1}{h(x, t)} \int_0^{h(x, t)} [*] dz \quad (2.3)$$

La notation  $\bar{u}$  désigne donc la vitesse dans la direction  $x$  moyennée sur la hauteur du film. Cette équation conservative, appelée équation de lubrification, s'interprète aisément de façon physique. Elle décrit qu'en chaque point  $x$  du domaine, le taux de variation de la hauteur du film est égal au taux de variation en  $x$  du flux convectif volumique. Afin de fermer cette équation, il faut trouver une expression (analytique ou empirique) de la vitesse moyenne du film  $\bar{u}$  en fonction de la hauteur  $h$  et du taux de cisaillement à l'interface *liquide/gaz* (en  $N.m^{-2}$ ) noté  $\tau_i^x$ . En utilisant les propriétés des écoulements de films minces, Benney a déterminé une expression analytique des champs de vitesse  $u(x, z, t)$  et  $v(x, z, t)$  en simplifiant et résolvant les équations de N-S.

### Equations de Navier-Stokes

En supposant que les variations de température sont suffisamment faibles pour que les propriétés physiques du liquide restent constantes, les équations de N-S décrivant l'écoulement du film s'écrivent dans le plan  $(x, z)$  :

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (2.4a)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + g^x + \nu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \quad (2.4b)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + g^z + \nu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \quad (2.4c)$$

où  $\nu$  désigne la viscosité cinématique du liquide,  $\rho$  sa masse volumique, et  $P(x, z, t)$  le champ de pression au sein du liquide.  $g^x$  (resp.  $g^z$ ) est l'accélération de la gravité projetée sur l'axe  $x$  (resp. l'axe  $z$ ) :

$$g^x = g \sin(\beta) \quad (2.5a)$$

$$g^z = g \cos(\beta) \quad (2.5b)$$

Le système (3.20) possède 3 équations et 3 inconnues qui sont le champ de vitesse longitudinal  $u(x, z, t)$ , le champ de vitesse transversal  $v(x, z, t)$  et le champ de pression  $P(x, z, t)$ , pour lesquelles il faut donner des conditions aux limites à la paroi ( $z = 0$ ) et à l'interface ( $z = h$ ). On applique généralement des conditions aux limites de non-glissement à l'interface *liquide/solide* :

$$u(x, z = 0) = 0 \quad (2.6a)$$

$$v(x, z = 0) = 0 \quad (2.6b)$$

et des conditions de continuité des contraintes tangentielles à l'interface *liquide/gaz* :

$$\mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{(x,z=h)} = \mu_g \left( \frac{\partial u_g}{\partial z} \right)_{(x,z=h)} = \tau_i^x \quad (2.7)$$

avec  $\mu$  (resp.  $\mu_g$ ) la viscosité dynamique du liquide (resp. du gaz), et  $u$  (resp.  $u_g$ ) le champ de vitesse dans la phase liquide (reps. la phase gazeuse). On applique également la condition de saut de pression à l'interface *liquide/gaz* décrite à la section 1.1.2 :

$$P(x, z = h) = P_g(x) + \gamma_{lg} K^{xz}(x) \quad (2.8)$$

avec  $P_g(x)$  la pression du gaz à l'interface et  $K^{xz}(x)$  la courbure de l'interface dans le plan  $(xz)$  qui peut s'écrire de façon exacte en fonction de l'épaisseur  $h$  et de ses dérivées spatiales :

$$K^{xz}(x) = - \frac{\left( \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right)}{\left( 1 + \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \right)^{3/2}} \quad (2.9)$$

Dans le cadre de l'hypothèse "onde longue", la pente de l'interface est faible, i.e.  $\left( \frac{\partial h}{\partial x} \right) \ll 1$ . On peut alors approximer la courbure de l'interface par :

$$K^{xz}(x) \simeq - \left( \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right) \quad (2.10)$$

expression qui est bien plus simple à discrétiser et qui est très majoritairement employée dans la littérature [47, 49, 56, 72].

### Réduction des équations

On procède à un adimensionnement à l'aide des changements de variables suivants :

$$x = \tilde{x} h_0, \quad z = \tilde{z} h_0, \quad t = \tilde{t} t_0, \quad (2.11a)$$

$$u = \tilde{u} u_0, \quad v = \tilde{v} u_0, \quad P = \tilde{P} (\rho u_0^2) \quad (2.11b)$$

avec  $u_0$  la vitesse moyenne de l'écoulement de référence,  $h_0$  son épaisseur, et  $t_0 = h_0/u_0$  une échelle de temps. On définit également les nombres (sans dimensions) de Reynolds, de Froude et de Weber qui s'écrivent respectivement :

$$Re = \frac{u_0 h_0}{\nu}, \quad Fr = \frac{u_0^2}{g h_0}, \quad We = \frac{\rho u_0^2 h_0}{\gamma_{lg}} \quad (2.12)$$

A petits nombres de Reynolds, des expériences ont montré que l'amplitude des vagues est faible devant leur longueur d'onde [100]. On introduit alors le paramètre  $\epsilon = h_0/\lambda_o \ll 1$  qui représente le rapport entre la hauteur  $h_0$  du film liquide et une longueur d'onde  $\lambda_o$  caractéristique de l'écoulement. Sous cette hypothèse dite "onde longue", les variations spatiales et temporelles de l'épaisseur du film sont faibles. On peut alors considérer que les gradients longitudinaux à l'écoulement et que les variations temporelles sont petits devant les gradients transversaux, soit :

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{z}} = O(1), \quad \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} = O(\epsilon), \quad \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} = O(\epsilon) \quad (2.13)$$

On marque alors l'ordre de grandeur des dérivées spatiales et temporelles en adoptant la notation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \longrightarrow \frac{\partial^{(\epsilon)}}{\partial \tilde{x}}, \quad \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} \longrightarrow \frac{\partial^{(1)}}{\partial \tilde{z}}, \quad \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \longrightarrow \frac{\partial^{(\epsilon)}}{\partial \tilde{t}} \quad (2.14a)$$

De plus, les types d'écoulements étudiés par Benney se caractérisent d'une part par des faibles nombres de Reynolds, et d'autre part par des faibles épaisseurs de films et donc des phénomènes capillaires dominants. Gjevik a montré dans ses travaux [8] que cela se traduit en terme de nombres adimensionnés par :

$$Re = O(1), \quad Fr = O(1), \quad We = O(\epsilon^2) \quad (2.15)$$

Les équations adimensionnées de N-S et marquées en ordre de grandeur ont alors pour expression :

$$\left( \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{x}} \right)^{(\epsilon)} + \left( \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{z}} \right)^{(1)} = 0 \quad (2.16a)$$

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{u} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{x}} \right)^{(\epsilon)} + \left( \tilde{v} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{z}} \right)^{(1)} \\ &= -\frac{\partial^{(\epsilon)} \tilde{P}}{\partial \tilde{x}} + \left( \frac{\sin(\beta)}{Fr} \right)^{(1)} + \left( \frac{1}{Re} \right)^{(1)} \left[ \left( \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \tilde{x}^2} \right)^{(\epsilon^2)} + \left( \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \tilde{z}^2} \right)^{(1)} \right] \end{aligned} \quad (2.16b)$$

$$\begin{aligned} & \left( \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{u} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{x}} \right)^{(\epsilon)} + \left( \tilde{v} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{z}} \right)^{(1)} \\ &= -\frac{\partial^{(1)} \tilde{P}}{\partial \tilde{z}} + \left( \frac{\cos(\beta)}{Fr} \right)^{(1)} + \left( \frac{1}{Re} \right)^{(1)} \left[ \left( \frac{\partial^2 \tilde{v}}{\partial \tilde{x}^2} \right)^{(\epsilon^2)} + \left( \frac{\partial^2 \tilde{v}}{\partial \tilde{z}^2} \right)^{(1)} \right] \end{aligned} \quad (2.16c)$$

### Modèle de Benney à l'ordre 0 en $\epsilon$

Pour déterminer les trois inconnus du système (2.16), Benney propose de les écrire sous la forme d'un développement limité en fonction du paramètre  $\epsilon$  :

$$\tilde{u} = (\tilde{u}_1)^{(1)} + (\tilde{u}_\epsilon)^{(\epsilon)} \quad (2.17a)$$

$$\tilde{v} = (\tilde{v}_1)^{(1)} + (\tilde{v}_\epsilon)^{(\epsilon)} \quad (2.17b)$$

$$\tilde{P} = (\tilde{P}_1)^{(1)} + (\tilde{P}_\epsilon)^{(\epsilon)} \quad (2.17c)$$

En injectant ces développements dans (2.16) et en ne conservant que les termes d'ordre 0 en  $\epsilon$ , on obtient le champ de pression :

$$P(x, z) = P_g(x) - \gamma_g \left( \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right) + \rho g \cos(\beta) [h - z] \quad (2.18)$$

et le champ de vitesse :

$$v_1(x, z) = 0 \quad (2.19a)$$

$$u_1(x, z) = \frac{1}{\mu} \left[ \left( \frac{\partial P_g}{\partial x} \right) - \rho g \sin(\beta) \right] \left( \frac{z^2}{2} - hz \right) + \frac{\tau_i^x}{\mu} z \quad (2.19b)$$

Le modèle de Benney s'écrit donc à l'ordre 1 :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(h\bar{u})}{\partial x} = 0 \quad (2.20a)$$

$$\bar{u} = \frac{1}{h} \int_0^h [u_1] dz = -\frac{h^2}{3\mu} \left[ \left( \frac{\partial P_g}{\partial x} \right) - \rho g \sin(\alpha) - \frac{3\tau_i^x}{2h} \right] \quad (2.20b)$$

Il peut être vu comme l'équation d'un écoulement de Nusselt stationnaire piloté par la gravité et le cisaillement. Cette équation d'équilibre local ne permet pas de reproduire correctement des instabilités de type "Roll-waves", il faut pour cela déterminer les champs de vitesse avec un ordre de précision supérieur.

### Modèle de Benney à l'ordre 1 en $\varepsilon$

En injectant les expressions de  $u_1$ ,  $v_1$  et  $P$  dans le système (2.16) et en conservant les termes d'ordre  $\varepsilon$ , le modèle de Benney s'écrit :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(h\bar{u})}{\partial x} = 0 \quad (2.21a)$$

$$\bar{u} = \frac{1}{h} \int_0^h [u_1 + u_\varepsilon] dz = -\frac{h^2}{3\mu} \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \rho g \sin(\alpha) - \frac{3\tau_i^x}{2h} \right] + \bar{u}_{cor,\varepsilon} \quad (2.21b)$$

avec  $\bar{u}_{cor,\varepsilon}$  qui s'écrit :

$$\bar{u}_{cor,\varepsilon} = u_o \left( \begin{array}{l} \frac{2}{15} [(\tilde{\Lambda}^x \tilde{h} + \tilde{\tau}_i^x) \tilde{\Lambda}^x \tilde{h}^4 Re] \left( \frac{\partial \tilde{h}}{\partial \tilde{x}} \right) \\ + \left[ \frac{1}{240} (7\tilde{\Lambda}^x \tilde{h} - 18\tilde{\tau}_i^x) \tilde{h}^4 Re \right] \left( \frac{\partial \tilde{\tau}_i^x}{\partial \tilde{x}} \right) \\ - \frac{2}{15} [\tilde{h}^4 Re^2] \left( \frac{\partial \tilde{G}^x}{\partial \tilde{t}} \right) - \frac{5}{24} [\tilde{h}^3 Re] \left( \frac{\partial \tilde{\tau}_i^x}{\partial \tilde{t}} \right) \\ + \frac{Re^2}{2520} [\tilde{h}^5 (64\tilde{\Lambda}^x \tilde{h} - 91\tilde{\tau}_i^x)] \left( \frac{\partial \tilde{G}^x}{\partial \tilde{x}} \right) \end{array} \right) \quad (2.22)$$

On renvoie le lecteur à [11] pour la définition des notations  $\tilde{\Lambda}^x$  et  $\tilde{G}^x$ . Ce modèle s'interprète comme un écoulement piloté par le cisaillement de l'air, la gravité, la pression hydrostatique et la pression de Laplace. Le champ de vitesse correspond à celui d'un écoulement de Poiseuille auquel on ajoute des termes correctifs d'ordre  $\varepsilon$ . Cette équation non-linéaire est capable de simuler avec précision des écoulements de films sur plan incliné y compris dans le régime instable. En étudiant la stabilité de ce modèle, i.e. en linéarisant l'équation (2.21) autour d'un état constant d'épaisseur  $h_o$  et en injectant une solution de la forme :

$$h = h_o + h_1 e^{ik(x-ct)} \quad (2.23)$$

avec  $h_1$  l'amplitude de la perturbation,  $k$  sa longueur d'onde, et  $c = c_r + i c_i$  la célérité des ondes. Benney obtient dans l'hypothèse des petites perturbations ( $k \ll 1$ ) l'expression de la célérité des ondes à la surface d'un liquide non-cisaillé ( $\tau_i^x = 0$ ) s'écoulant sur un plan incliné :

$$c_r = 3 u_o \quad (2.24a)$$

$$c_i = u_o h_o \left[ \frac{6}{5} Re - \cot(\beta) \right] k \quad (2.24b)$$

Une perturbation est instable si  $c_i > 0$ , soit si  $Re > 5/6 \cot(\beta)$ , qui coïncide bien avec le Reynolds prédit par Yih et Benjamin [105, 106]. Ce modèle est séduisant car il permet de simuler des dynamiques de vagues complexes à l'aide d'une seule équation d'évolution pour l'épaisseur du film  $h(x, t)$ . Toutefois, nous nous sommes placés dans la théorie dite de la lubrification correspondant à des écoulements faiblement inertiels, i.e. à petit nombre de Reynolds.

### 2.1.4 Modèle Saint Venant de Shkadov

Afin de simuler plus précisément des écoulements à des nombres de Reynolds plus élevés, Shkadov propose dans ses travaux [9] un nouveau système d'équation plus général donnant l'évolution temporelle de l'épaisseur  $h$  et du débit volumique par unité de longueur  $q = h\bar{u}$  d'un film liquide 2D. Il se compose du bilan intégral de conservation de la masse (2.2) et d'un bilan intégral de conservation de la quantité de mouvement, ce dernier remplaçant la fermeture du profil de vitesse. Ce système "de Saint Venant" s'écrit :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \quad (2.25a)$$

$$\frac{\partial \rho q}{\partial t} + \frac{\partial(\rho h \bar{u}^2)}{\partial x} + h \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) = \rho g \sin(\beta) h + \tau_i^x - \tau_w^x \quad (2.25b)$$

avec le terme cinétique  $\bar{u}^2$  et le frottement pariétal  $\tau_w^x$  donnés par :

$$\bar{u}^2 = \frac{1}{h} \int_0^h [u^2] dz \quad (2.26a)$$

$$\tau_w^x = \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{(z=0)} \quad (2.26b)$$

qu'il faut exprimer en fonction de l'épaisseur  $h$  et du débit volumique par unité de longueur  $q$  du liquide. En s'inspirant de la méthode Benney, Shkadov obtient le profil de vitesse à partir du développement limité (2.16) des équations de N-S. Lavalle montre dans ses travaux [11] que le modèle est consistant à condition d'exprimer  $\bar{u}^2$  à l'ordre 0 en  $\varepsilon$  :

$$\bar{u}^2 = u_o^2 \left[ \frac{6}{5} \frac{\tilde{q}^2}{\tilde{h}^2} + \frac{\tilde{h}^2}{60} \tilde{\tau}_i^x (\tilde{\Lambda}^x \tilde{h} + 2\tilde{\tau}_i^x) \right] \quad (2.27)$$

et d'exprimer  $\tau_w^x$  à l'ordre 1 en  $\varepsilon$  :

$$\tau_w^x = \mu \frac{u_o}{h_o} \left( \begin{array}{l} 3 \frac{\tilde{q}}{\tilde{h}^2} - \frac{1}{2} \tilde{\tau}_i^x - \frac{1}{15} \tilde{\Lambda}^x \tilde{h}^3 Re (\tilde{\Lambda}^x \tilde{h} + \tilde{\tau}_i^x) \left( \frac{\partial \tilde{h}}{\partial \tilde{x}} \right) \\ - \frac{1}{840} Re^2 \tilde{h}^4 (8\tilde{\Lambda}^x \tilde{h} - 21\tilde{\tau}_i^x) \left( \frac{\partial \tilde{G}^x}{\partial \tilde{x}} \right) + \frac{1}{8} Re \tilde{h}^2 \left( \frac{\partial \tilde{\tau}_i^x}{\partial \tilde{t}} \right) \\ - \frac{1}{240} Re \tilde{h}^3 (\tilde{\Lambda}^x \tilde{h} - 14\tilde{\tau}_i^x) \left( \frac{\partial \tilde{\tau}_i^x}{\partial \tilde{x}} \right) + \frac{1}{15} Re^2 \tilde{h}^3 \left( \frac{\partial \tilde{G}^x}{\partial \tilde{t}} \right) \end{array} \right) \quad (2.28)$$

Ce modèle est aussi précis que l'équation de lubrification (2.21) et prédit le bon nombre de Reynolds de déclenchement des instabilités de surface. De plus, il est valable sur une plus grande gamme de nombre de Reynolds tout en ayant un bon accord par comparaison avec des simulations obtenues par DNS, comme illustré sur la figure 2.5.

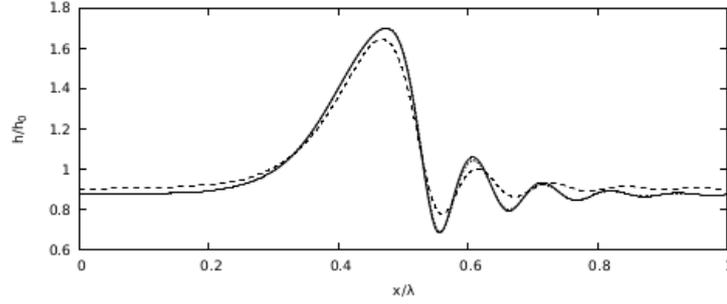


FIGURE 2.5 – Instabilités de type "Roll-Waves" à la surface d'un film liquide cisailé par un gaz. Comparaison des simulations obtenus avec le modèle de Skhadov et par DNS (en pointillé) avec OpenFOAM. Les données du calcul sont détaillées dans [11].

La dernière amélioration connue de ce modèle a été apportée par Lavalley [11] qui s'est intéressé à la discrétisation du terme capillaire dans le bilan intégral de quantité de mouvement (2.25b). Ce bilan dépend du gradient de pression dans le liquide qui s'écrit :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial x}\right) = \left(\frac{\partial P_g}{\partial x}\right) - \gamma_{lg} \left(\frac{\partial^3 h}{\partial x^3}\right) + \rho g \cos(\beta) \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right) \quad (2.29)$$

où le terme capillaire fait intervenir une dérivée spatiale du troisième ordre qui est difficile à discrétiser. En reprenant les travaux de Noble et Vila [12], il ajoute une nouvelle inconnue  $w = \frac{1}{\sqrt{h}} \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)$ , résolue à l'aide de l'équation suivante :

$$\frac{\partial(hw)}{\partial t} + \frac{\partial(qw)}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[ h^{3/2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{q}{h}\right) \right] \quad (2.30)$$

Il obtient un système "augmenté" de Saint Venant à trois équations uniquement du second ordre en espace et qui est plus facile à discrétiser.

## 2.2 Modèles avec ligne triple

### 2.2.1 Contexte

Alors que la grande majorité de la littérature est dédiée depuis les années 60 à l'étude de l'amplification des ondes de surface d'un film liquide, la modélisation du mouillage n'est vraiment apparue qu'à partir des années 90. L'intérêt de ces études est de pouvoir comprendre et exploiter les propriétés de mouillage d'une surface. On peut en effet chercher à réduire le contact entre la surface et le liquide (traitements anti-tâche, textiles imperméables, vitres autonettoyantes) ou à obtenir un mouillage total et uniforme (peinture, photographie). D'un point de vue fondamental, le mouillage est très bien compris dans les situations statiques (même si l'hystérésis n'est pas parfaitement décrite). Le mouillage dynamique par contre, incluant une ligne triple en mouvement, pose encore de nombreuses questions. En effet, la ligne triple peut être le siège d'instabilités tridimensionnelles dites "en ruisselets", correspondant à des structures en forme de doigts. On trouve ces ruisselets dans des situations de la vie courante illustrées sur la figure 2.6 : les amateurs d'oenologie peuvent les observer dans leur verre de vin (larmes du vin) et ils rendent la tâche difficile aux pâtisseries pour réaliser un napage uniforme sur les bords d'un gâteaux.



(a) Larmes du vin.



(b) Napage en chocolat [117].

FIGURE 2.6 – Exemples de formation de ruisselets dans des situations du quotidien.

On les retrouve également dans des configurations industrielles telles que les échangeurs thermiques, les traitements sanitaires, ou encore le givrage en aéronautique (cf. Introduction) où l'on souhaite déterminer leur moment d'apparition et leur géométrie et ainsi anticiper les zones mouillées et les zones sèches. Ces applications ont motivés le développement de modèles réduits numériques fortement inspirés de ceux présentés à la section 2.1 et qui permettent de simuler ces instabilités complexes tout en garantissant un coût en temps de calcul raisonnable.

### 2.2.2 Introduction aux instabilités en "Ruisselets"

La transition d'un film liquide en ruisselets a en premier lieu fait l'objet d'études expérimentales. Les cas étudiés demeurent encore à ce jour très académiques et consistent à injecter (à débit constant) ou déposer (à volume constant) un liquide sur une paroi. Parmi l'ensemble des configurations expérimentales existantes dans la littérature, on présente

celle d'un liquide entraîné par la gravité et par un écoulement d'air cisailé. Ces configurations sont les mieux maîtrisées et constituent une référence pour une comparaison avec des simulations numériques.

### Ruisselets par gravité

Huppert [26] a été le premier à réaliser un dispositif "à volume constant" permettant d'observer le comportement d'une ligne triple avançant sur un plan incliné. Le liquide, stocké dans un réservoir, est relâché sur la plaque en soulevant une trape, comme illustré sur la figure 2.7.

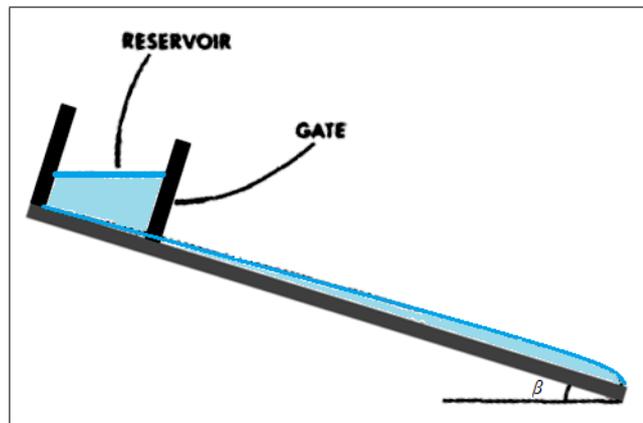
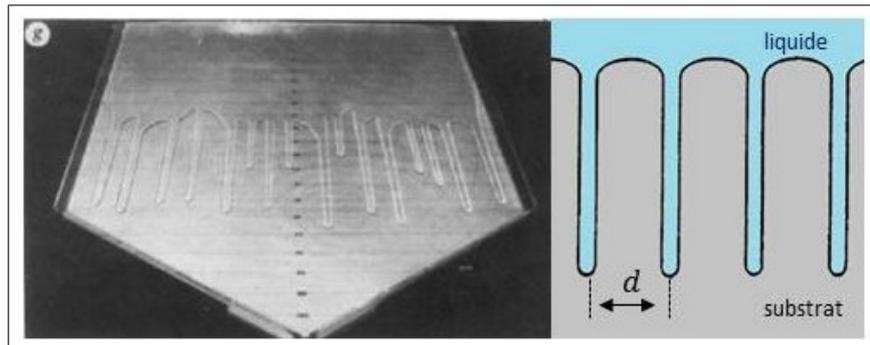


FIGURE 2.7 – Dispositif expérimental utilisé par Huppert [26] sur un plan incliné d'un angle  $\beta$ .

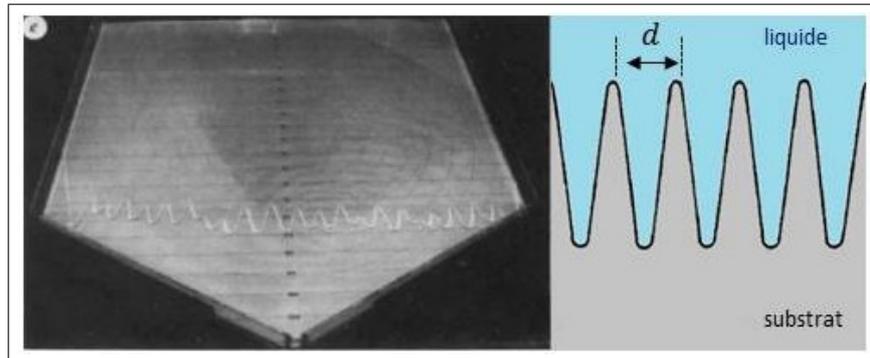
D'autres dispositifs similaires ont ensuite été développés par Silvi et Dussan [27], Jerrett et al. [28] et de Bruyn [29], et ont permis d'aboutir à de nombreuses observations. Le premier constat est qu'un front semble transitionner en ruisselets régulièrement espacés et permet de supposer que cette transition est le résultat de l'amplification d'une instabilité transversale. Ils ont également noté qu'il pouvait apparaître deux familles de ruisselets :

- des ruisselets droits représentés sur la figure 2.8a. Ils ont une forme de doigts et se manifestent pour des fluides peu mouillants (angle  $\theta_s$  grand),
- des ruisselets triangulaires représentés sur la figure 2.8b. Ils ont la forme de chevrons et se manifestent pour des fluides très mouillants ( $\theta_s$  proche de  $0^\circ$ ),

Ainsi, les ruisselets n'apparaissent pas que pour des films partiellement mouillant ce qui laisse supposer que l'angle de contact statique  $\theta_s$  ne joue qu'un rôle secondaire dans le mécanisme de transition.



(a) Ruisselets droits



(b) Ruisselets triangulaires

FIGURE 2.8 – Formation de ruisselets régulièrement espacés d’une distance  $d$  à la ligne triple d’un liquide injecté avec un volume constant sur un plan incliné. Expérience réalisée par Huppert [26].

Il faut attendre les années 90 pour obtenir des résultats plus quantitatifs grâce aux expériences réalisées par Cazabat [30] et Johnson [31]. Ce dernier apporte des améliorations majeures par rapport au dispositif de Huppert. D’une part, l’injection du liquide se fait à débit constant et permet de ré-itérer plus rigoureusement une expérience. D’autre part, il utilise une méthode de fluorescence pour mesurer l’épaisseur du film sur la plaque et il obtient des visualisations de coupes transversales et longitudinales des ruisselets (figure 2.9).

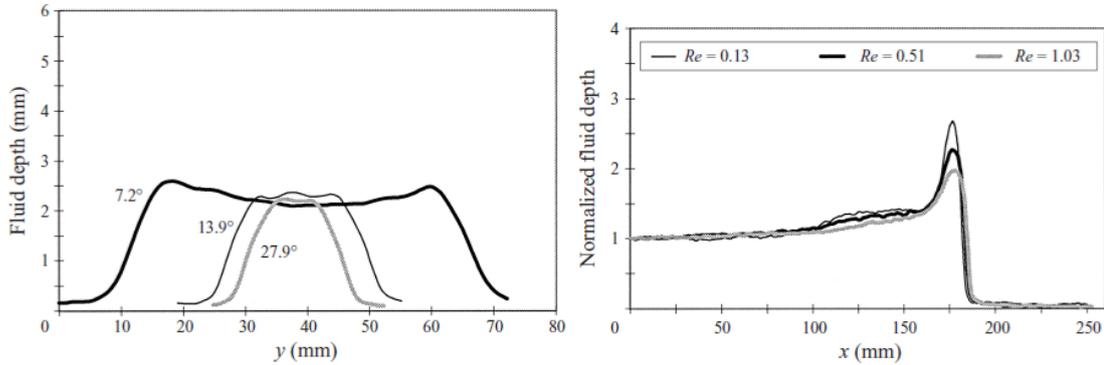


FIGURE 2.9 – A gauche : profil transversale d'un ruisseau pour différentes inclinaisons du substrat. A droite : profil longitudinal d'un ruisseau pour différents Reynolds d'injection du liquide. Visualisations obtenues par Johnson [31].

Il réalise des expériences pour un film très mouillant ( $\theta_s = 7^\circ$ ) et peu mouillant ( $\theta_s = 38^\circ$ ), et fait varier deux paramètres : le débit d'injection et l'inclinaison du plan. Il obtient ainsi un graphe (figure 2.10) donnant l'espacement entre les ruisselets en fonction de ces paramètres, qui constitue encore aujourd'hui l'étude de référence dans le domaine. Nous reviendrons plus en détail sur ces résultats expérimentaux à la section 2.2.7.

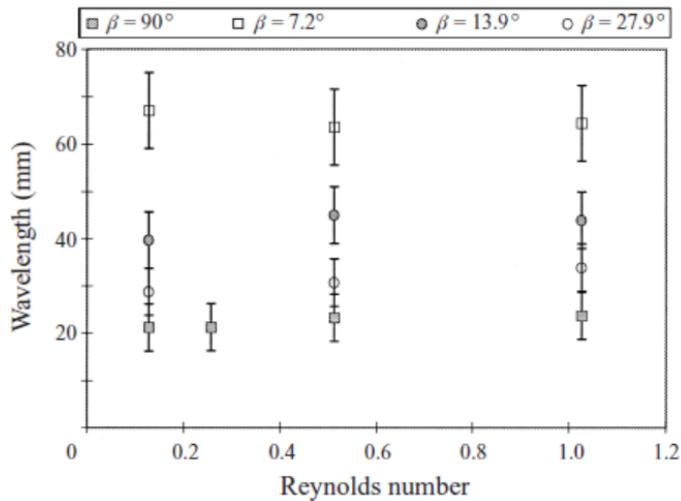


FIGURE 2.10 – Espacement entre les ruisselets en fonction du Reynolds d'injection de liquide et de l'inclinaison du plan. Les conditions expérimentales sont décrites dans [31].

### Ruisselets par cisaillement

D'autres auteurs se sont intéressés à la transition film/ruisselet en présence d'un cisaillement d'air. Le plan est très proche de l'horizontale, le mouvement du film n'est plus causé par une force de gravité volumique, mais par une force de frottement surfacique. La littérature sur ce sujet est plus mince que celle des écoulements par gravité car les phénomènes physiques en jeu sont beaucoup plus complexes. Il faut prendre en compte des effets de couche limite, de turbulence et d'aérodynamique au niveau de la ligne triple.

Les études sont alors majoritairement académiques et se concentrent sur des cas très simples, comme le cas de gouttes soufflées [32] et de ruisselets soufflés [33, 34]

L'étude qui se rapproche le plus à ce jour d'une configuration industrielle car elle est représentative d'une transition d'un film cisailé en ruisselets a été proposée par Zhang et al. [116]. Cette étude, menée spécifiquement dans le cadre des problématiques de givrage en aéronautique, a consisté à générer un spray de gouttelettes qui se dépose sur un profil d'aile. Le dispositif est placé dans une soufflerie afin de créer un écoulement d'air.

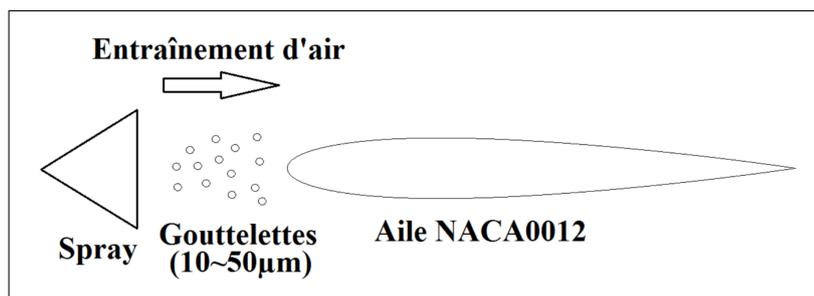


FIGURE 2.11 – Représentation simplifiée du dispositif expérimental de Zhang [116].

La formation de ruisselets sur le profil s'effectue en trois phases : des gouttes isolées se déposent et se déplacent sur le bord d'attaque, puis elles coalescent et forment un film liquide, qui finalement se brise en plusieurs ruisselets. Zhang a étudié l'influence de la vitesse d'air sur le déclenchement de la transition film/ruisselets et a développé une méthode de projection [115] pour mesurer l'épaisseur du film et obtenir des visualisations de transition film/ruisselet (figure 2.12).

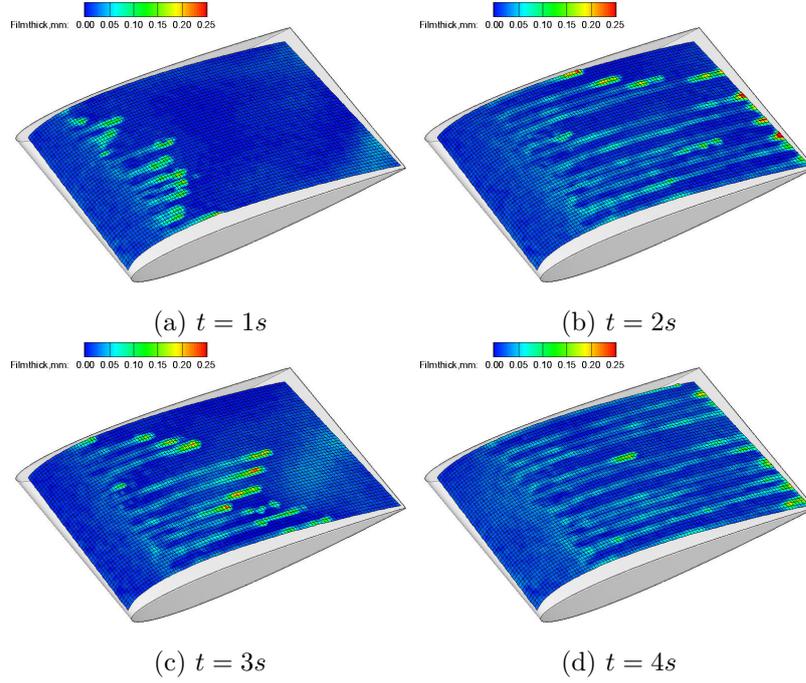


FIGURE 2.12 – Evolution temporelle d'un film liquide se déplaçant sur un profil NACA0012 cisailé par un gaz. Expérience réalisée par Zhang et al. [116]

### 2.2.3 Equation de lubrification

Les écoulements étudiés dans la littérature impliquant des transitions en ruisselets se caractérisent en général par de faibles vitesses d'écoulements qui ne dépassent pas des nombres de Reynolds de l'ordre de 1. Sous cette hypothèse, les effets inertiels sont négligeables et l'écoulement peut être décrit par l'équation de lubrification, que l'on rappelle en 2D :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(h\bar{u})}{\partial x} = 0 \quad (2.31)$$

En se plaçant toujours dans l'hypothèse "onde longue", en considérant des écoulements faiblement inertiels ( $Re \ll 1$ ,  $Fr \ll 1$ ), et en s'inspirant de la méthode de Benney de résolution approchée des équations de N-S décrite à la section 2.1.3, le profil de vitesse longitudinal  $u(x, z)$  ainsi que sa valeur moyenne  $\bar{u}(x)$  s'écrivent à l'ordre 0 en  $\varepsilon$  (voir [117] pour des détails) :

$$u(x, z) = \frac{1}{\mu} \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \rho g \sin(\alpha) \right] \left( \frac{z^2}{2} - hz \right) + \frac{\tau_i^x}{\mu} z \quad (2.32a)$$

$$\bar{u}(x) = -\frac{h^2}{3\mu} \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \rho g \sin(\alpha) - \frac{3\tau_i^x}{2h} \right] \quad (2.32b)$$

avec  $P(x)$  le champs de pression dans le liquide donné par :

$$P(x, z) = P_g(x) + \rho g \cos(\beta) [h - z] + \gamma_{lg} K^{xz} \quad (2.33)$$

comprenant la pression du gaz à l'interface, la pression hydrostatique, et la pression de Laplace avec  $K^{xz} = -\left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}\right)$  l'approximation "onde longue" de la courbure dans le plan

( $xz$ ). Ce profil de vitesse correspond à celui d'un écoulement de Poiseuille piloté par la gravité, le champ de pression et le cisaillement du gaz. Il ressemble fortement au profil (2.21b) obtenu par Benney à la différence qu'il ne comprend de termes correctifs supplémentaires à l'ordre 1 en  $\varepsilon$ . Ces termes sont nécessaires à la modélisation exacte des instabilités de type "Roll-Waves", mais ne sont pas utiles dans les régimes de lubrification où ces instabilités sont absentes. En injectant l'expression de la vitesse moyenne  $\bar{u}$  dans l'équation (2.31), on obtient le modèle de lubrification 2D suivant

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( -\frac{h^3}{3\mu} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( P_g + \rho g h \cos(\beta) - \gamma_{lg} \left( \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right) \right) - \rho g \sin(\alpha) - \frac{3\tau_i^x}{2h} \right] \right) = 0 \quad (2.34)$$

Il se généralise aisément en 3 dimensions [93, 117, 52, 47] et l'évolution temporelle de l'épaisseur  $h(x, y, t)$  d'un film liquide 3D s'écoulant sur un plan incliné d'un angle  $\beta$  par rotation autour de l'axe  $y$  s'écrit :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \left( -\frac{h^3}{3\mu} \left[ \nabla [P_g + \rho g h \cos(\beta) - \gamma_{lg} \nabla \cdot (\nabla h)] - \rho \mathbf{g}_t - \frac{3\boldsymbol{\tau}_i}{2h} \right] \right) = 0 \quad (2.35)$$

avec  $\nabla \cdot (*)$  l'opérateur divergence,  $\nabla (*)$  l'opérateur gradient, et  $\nabla \cdot (\nabla *)$  l'opérateur laplacien.  $\mathbf{g}_t = {}^t (g \sin(\beta), 0)$  représente l'accélération gravitationnelle projetée sur le plan incliné d'un angle  $\beta$  par rotation de l'axe  $y$  et  $\boldsymbol{\tau}_i$  le cisaillement du gaz. Ce modèle est le plus utilisé dans la littérature pour simuler l'écoulement de films liquides dans le cadre de la lubrification. Il est toutefois encore insuffisant pour simuler des dynamiques de mouillage pour deux raisons. La première est qu'il ne modélise pas l'angle de contact introduit à la section 1.2.2. La seconde est que la condition aux limites utilisée d'adhérence à la paroi (2.6a) doit être changée, car elle n'est pas compatible avec le mouvement d'une ligne triple.

### Remarque 1

*Dans la suite de ce chapitre, nous travaillerons par soucis de simplicité avec l'équation de lubrification en deux dimensions (2.34). La généralisation en trois dimensions n'ajoute aucune difficulté supplémentaire.*

### 2.2.4 Modélisation de l'angle de contact statique

On présente dans cette section l'approche la plus utilisée dans la littérature pour intégrer les effets de l'angle de contact statique dans l'équation de lubrification (2.34). Faute de compréhension complète du phénomène d'hystérésis, les modèles proposés ici négligent tous ce phénomène et supposent que l'angle de contact  $\theta_s$  est unique.

### Pression de disjonction de Dejarguin

L'équation de lubrification telle qu'elle est écrite sous la forme (2.34) ne permet pas par exemple de retrouver la forme d'équilibre d'une goutte partiellement mouillante sur un substrat. Puisqu'elle ne tient pas compte des interactions moléculaires agissants au voisinage de la ligne de contact, n'importe quel volume de liquide déposé sur le substrat

s'étale indéfiniment. La méthode la plus largement répandue pour intégrer les effets du mouillage partiel dans (2.34) a été proposée par Frumkin et Derjaguin [36, 37, 39, 40]. Ils introduisent une pression dite "de disjonction", notée  $\Pi_d(e)$ , qui est la diminution de pression induit entre deux interfaces qui sont séparées d'une distance  $e$  et qui interagissent. Dans notre cas, on s'intéresse aux interfaces *solide/liquide* et *liquide/gaz*. Elles sont séparées par l'épaisseur du film  $h$  et induisent un saut de pression  $\Delta P$  qui s'écrit :

$$\Delta P = -\Pi_d(h) = \left( \frac{\partial e_d}{\partial h} \right) \quad (2.36)$$

avec  $e_d(h)$  appelée dans la littérature "densité surfacique d'énergie de disjonction" qui représente l'ensemble des densités d'énergies des interaction moléculaires. Une expression de cette pression de disjonction dans le cas de deux interfaces infinies et parallèles séparées d'une distance  $h$  a été proposée par Dejarguin et al. [38] et s'écrit :

$$\Pi_d(h) = \frac{A_1}{h^3} - \frac{A_2}{h^2} + A_{3,1} \exp\left(\frac{-h}{A_{3,2}}\right) \quad (2.37)$$

Le terme à la puissance 2, terme attractif dominant à grande distance, représente des forces de Van der Waals. Le terme à la puissance 3 désigne des forces électrostatiques répulsives et dominantes à courte portée. Le dernier terme représente des forces dipolaires répulsives, avec les coefficients  $A_i > 0$  variants en fonction du type d'interaction et de leur portée.

### Lien entre pression de disjonction et mouillage

Selon la nature des forces, on peut retrouver les deux régimes de mouillage décrits à la section 1.2.1 :

- des forces répulsives génèrent une pression de disjonction négative ( $\Pi_d < 0$ ). Il se forme une surpression ( $\Delta P > 0$ ) entre les deux interfaces au voisinage du point triple, la goutte se rétracte et le mouillage est partiel ( $S < 0$ ). Un tracé typique de la pression de disjonction dans un cas partiellement mouillant se trouve sur la figure 2.13.
- en revanche, si les forces sont uniquement attractives, le mouillage est total ( $S > 0$ ) car il apparaît une dépression ( $\Delta P < 0$ ) dans le film au voisinage du point triple. Une goutte s'étalera jusqu'à former un substrat complètement mouillé par un film d'épaisseur moléculaire. Une pression de disjonction dans cas totalement mouillant est tracée sur la figure 2.13.

On voit cependant d'après (2.37) que les forces ne sont pas toujours uniquement attractives ou répulsives. La mouillabilité peut donc varier en fonction de l'épaisseur  $h$  du film. Il existe alors un troisième régime de mouillage dit "pseudo-partiel", où un film peut être totalement mouillant à faible épaisseur (forces attractives en  $1/h^3$ ) et être partiellement mouillant à grande épaisseur (forces répulsives en  $1/h^2$ ). Un exemple de pression de disjonction pour ce cas est tracé sur la figure 2.13.

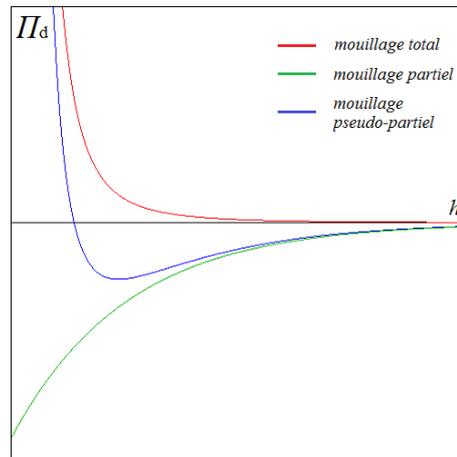


FIGURE 2.13 – Tracé typique de la pression de disjonction  $\Pi_d(h)$  pour le cas d'un mouillage total, partiel et pseudo-partiel [15].

Ainsi, contrairement à une situation de mouillage partiel où l'interface *liquide/gaz* forme un angle  $\theta_s$  avec un substrat sec (figure 1.4), une situation de mouillage pseudo-partiel (figure 2.14) correspond à une interface formant un angle  $\theta_s$  avec un substrat recouvert d'un film d'épaisseur  $h_m$ , appelé dans la littérature "film précurseur". La valeur de cette épaisseur résiduelle  $h_m$  est définie par un équilibre entre les forces attractives et répulsives.

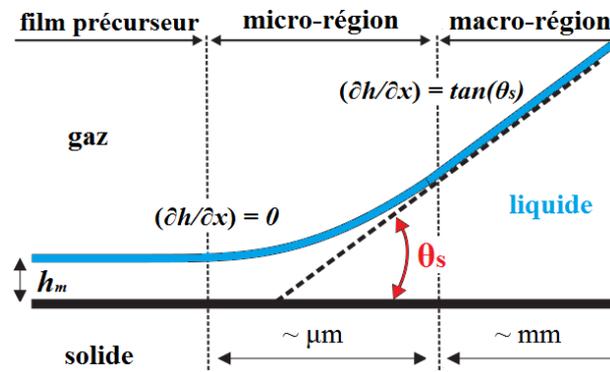


FIGURE 2.14 – Représentation de Potash et Wayner [44] de la ligne triple à différentes échelles d'un liquide pseudo-partiellement mouillant.

### Modèle simplifié de pression de disjonction

L'expression (2.37) permet de modéliser l'ensemble des interactions à leurs échelles respectives mais nécessite de déterminer l'ensemble des coefficients  $A_i$ , ce qui n'est pas aisé. Dans le cadre d'applications destinées à simuler le comportement d'un film à l'échelle macroscopique, on cherche seulement à observer une interface *liquide/gaz* formant un angle de contact  $\theta_s$  avec le substrat à l'équilibre. Dejarguin introduit dans ses travaux [37] une méthode qui consiste à simplifier l'expression de (2.37) et à calibrer les coefficients  $A_i$  afin de retrouver l'angle  $\theta_s$ . En négligeant les forces dipolaires qui sont très faibles [42, 43],

Dejarguin propose l'expression suivante :

$$\Pi_d(h) = B \left[ \left( \frac{h_*}{h} \right)^3 - \left( \frac{h_*}{h} \right)^2 \right] \quad (2.38)$$

où  $h_*$  joue le rôle de rayon d'action  $\mathfrak{R}$  des forces moléculaires et  $B > 0$  est un coefficient à déterminer. Cette pression représente un cas de mouillage pseudo-partiel et est tracé sur la figure 2.15.

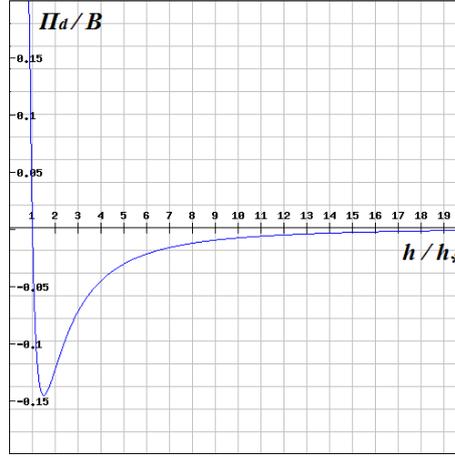


FIGURE 2.15 – Tracé de la pression de disjonction  $\Pi_d(h)$  introduite par Dejarguin [37]. La pression est adimensionnée par  $B$  et l'épaisseur  $h$  du film par  $h_*$ .

A courte portée, i.e.  $h/h_* < 1$ , la pression de disjonction est positive et le mouillage est total. A longue portée, i.e.  $h/h_* > 1$ , le mouillage est partiel car la pression de disjonction est négative. En  $h = h_*$ , on a les résultats suivants :

$$\left( \frac{\partial e_d}{\partial h} \right)_{(h=h_*)} = -\Pi_d(h = h_*) = 0 \quad (2.39a)$$

$$\left( \frac{\partial^2 e_d}{\partial h^2} \right)_{(h=h_*)} = \left( \frac{\partial \Pi_d}{\partial h} \right)_{(h=h_*)} > 0 \quad (2.39b)$$

ce qui signifie que l'équilibre entre les forces attractives et répulsives est atteint pour l'épaisseur  $h_*$ . Le modèle de pression de disjonction décrit alors la ligne triple représentée sur la figure 2.14 avec un film précurseur d'épaisseur  $h_m = h_*$ .

### Relation augmentée de Young-Dupré

Pour calibrer la constante  $B$  dans l'expression (2.38) de la pression de disjonction, on peut effectuer un bilan de forces au point triple [45, 46]. On suppose que les épaisseurs de films sont petites devant la longueur capillaire ( $h \ll l_c$ ) au voisinage de ce point, on peut donc négliger la pression hydrostatique. À l'équilibre, le gradient de pression en tout point du liquide est nul. La somme de la pression de disjonction et de la pression de Laplace est alors constante, i.e. :

$$\forall x, \forall h, \quad \gamma_{lg} K^{xz}(h(x)) + \Pi_d(h(x)) = P_e \quad (2.40)$$

avec  $P_e$  une constante. On définit  $\theta(x)$  l'angle entre l'interface *liquide/gaz* et le substrat en tout point  $x$ . Nous supposons que la forme de l'interface *liquide/gaz* est telle que décrite par Potash [44], à savoir :

- au niveau du film précurseur loin du point triple (point  $B$  sur la figure 2.16), on a d'après (2.39a) :

$$\Pi_d(x_B) = 0 \quad (2.41)$$

et l'épaisseur est uniformément égale à  $h_*$ , soit :

$$\theta(x_B) = 0 \quad (2.42a)$$

$$K^{xz}(x_B) = 0 \quad (2.42b)$$

- à des épaisseurs de film qui vérifient  $l_c \gg h \gg h_*$  (point  $A$ ), les interfaces sont trop éloignées pour interagir, ce qui se traduit par :

$$\Pi_d(x_A) = 0 \quad (2.43a)$$

$$e_d(x_A) = 0 \quad (2.43b)$$

et la pente de l'interface *liquide/gaz* est constante, soit :

$$\theta(x_A) = \theta_s \quad (2.44a)$$

$$K^{xz}(x_A) = 0 \quad (2.44b)$$

A partir des conditions aux limites aux points  $A$  et  $B$ , on trouve  $P_e = 0$ , et la relation d'équilibre des pressions devient :

$$\forall x, \forall h, \quad \gamma_{lg} K^{xz}(h(x)) + \Pi_d(h(x)) = 0 \quad (2.45)$$

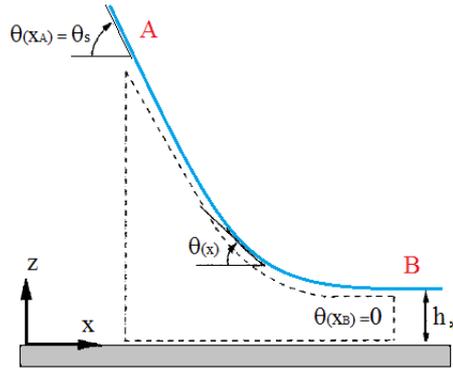


FIGURE 2.16 – Représentation de Potash et Wayner [44] du point triple. Le point  $A$  se situe dans la macro-région  $h \gg h_*$  et le point  $B$  dans la région du film précurseur  $h = h_*$ .

En utilisant les formules de Frenet suivantes :

$$K^{xz} = -\frac{d\theta}{ds} \quad (2.46a)$$

$$\frac{dh}{ds} = \sin(\theta) \quad (2.46b)$$

avec  $s(x)$  l'abscisse curviligne le long de la l'interface *liquide/gaz*, on obtient en intégrant la relation (2.45) entre le point  $B$  et le point  $A$  :

$$\begin{aligned}
& - \int_{h_B}^{h_A} [\Pi_d(h)] dh = \int_{h_B}^{h_A} [\gamma_{lg} K^{xz}(h)] dh \\
\implies & - \int_{h_*}^{+\infty} [\Pi_d(h)] dh = -\gamma_{lg} \int_{s_B}^{s_A} \left[ \frac{d\theta}{ds} \right] \left[ \frac{dh}{ds} \right] ds = -\gamma_{lg} \int_{\theta_B}^{\theta_A} [\sin(\theta)] d\theta \\
\implies & - \int_{h_*}^{+\infty} [\Pi_d(h)] dh = \gamma_{lg} [\cos(\theta_s) - 1] \\
\implies & e_d(h_*) = S \quad \text{mouillage pseudo-partiel}
\end{aligned} \tag{2.47}$$

qui est appelée dans la littérature relation augmentée de Young-Dupré. La démonstration dans le cas d'un liquide partiellement mouillant est analogue [15] et on obtient :

$$e_d(h=0) = - \int_0^{+\infty} [\Pi_d(h)] dh = S \quad \text{mouillage partiel} \tag{2.48}$$

Cette relation permet de calibrer les modèles de pression de disjonction pour retrouver l'angle de contact statique  $\theta_s$  à l'équilibre. Dans le cas du modèle (2.38) proposé par Dejarguin, cela revient à prendre  $B$  égal à :

$$B = -\frac{2S}{h_*} \tag{2.49}$$

En intégrant la pression de disjonction  $\Pi_d(h)$  dans l'équation de lubrification (2.34), on obtient :

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ -\frac{h^3}{3\mu} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( P_g - \gamma_{lg} \left( \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right) + \rho g h \cos(\beta) - \Pi_d(h) \right) - \rho g \sin(\beta) - \frac{3\tau_i^x}{2h} \right] \right] \tag{2.50}$$

qui tient compte des interactions moléculaires entre les interfaces quand l'épaisseur du film  $h$  tend vers 0.

## Remarque 2

Les paramètres ajustables du modèle (2.50) sont donc l'angle de contact statique, déterminable expérimentalement, et le rayon d'action des forces moléculaires  $h_*$ . Si on prend le modèle de pression de disjonction (2.38) de Dejarguin, le rayon d'action est piloté par la valeur de  $h_*$  qui est typiquement de l'ordre du *nm*. L'inconvénient de modéliser des phénomènes physiques à de telles échelles est que cela nécessite d'utiliser des maillages du même ordre ( $\Delta x \sim h_*$ ) et peut entraîner des temps de calcul très longs [47] lorsque nous discrétiserons les équations. Par conséquent, à des fins numériques, le paramètre  $h_*$  est généralement choisi plus grand que sa valeur physique. Il doit toutefois rester petit devant l'épaisseur du film loin de la ligne triple (comme nous le verrons dans la section 4.7) afin de ne pas modifier le comportement macroscopique du film (angle de contact statique, étalement, vitesse du point triple).

### Autres modèles de pression de disjonction

A partir des relations (2.47) et (2.48), de nombreux modèles de pression de disjonction sont apparus dans la littérature : un modèle composé de fonctions exponentielles de  $h$  proposé par Thiele et Pomeau [70, 55], de puissances de  $h$  utilisé par Schwartz [48], Glasner [49] et Sharma [50], ou de combinaisons d'exponentielles et de puissances par Beltrame [52]. Ces modèles font l'hypothèse d'une pression de disjonction agissant entre deux interfaces infinies et parallèles, ce qui n'est pas exact à proximité du point triple. Dai [57] et Hocking [58] ont alors développé un modèle tenant compte de la courbure de l'interface dans l'expression de la pression de disjonction.

On peut toutefois se demander quelle est la différence entre ces différents modèles. En effet, si on cherche à étudier le comportement d'un film macroscopique, nous avons vu que toute pression de disjonction  $\Pi_d(h)$  qui vérifie la relation augmentée de Young-Dupré (2.48) permet de retrouver un point triple formant un angle de contact statique  $\theta_s$  avec le substrat. Par conséquent, l'expression exacte de  $\Pi_d(h)$  importe peu dans ce type d'études [47]. Par contre, cette expression est d'une grande importance quand on étudie des film microscopiques. Supposons qu'un film liquide d'épaisseur uniforme  $h_o$  est à l'équilibre sur un substrat. Si on perturbe ce film liquide, deux scénarios peuvent se produire : si le film a une épaisseur  $h_o$  grande devant le rayon d'action moléculaire  $\mathfrak{R}$ , la perturbation décroît dans le temps (figure 2.17a). Par contre, si  $h_o$  est petit devant  $\mathfrak{R}$ , la perturbation peut croître et le film démouille en petites gouttelettes (figure 2.17b). Cette instabilité dite "spinodale" a fait l'objet de nombreuses études expérimentales [74, 75]. Elle est représentée sur la figure 2.18.

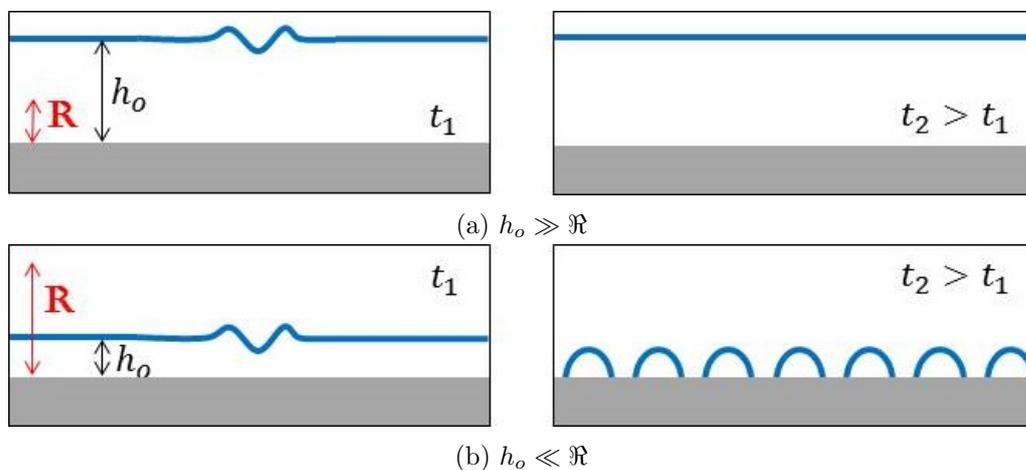


FIGURE 2.17 – Evolution d'un film liquide plat d'épaisseur  $h_o$  auquel on applique une perturbation.  $\mathfrak{R}$  désigne le rayon d'action moléculaire.

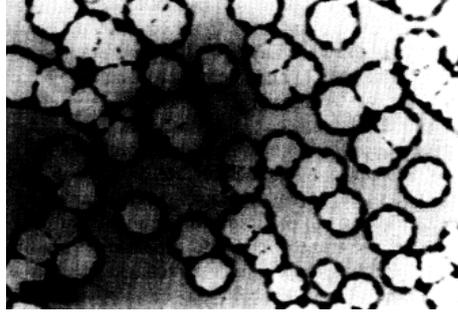


FIGURE 2.18 – Démouillage spinodal d'un film de polystyrène d'épaisseur  $40,5 \text{ nm}$  sur une plaque de silicium [74].

Ce démouillage a également fait l'objet d'études théoriques [72] à partir de l'équation de lubrification . En linéarisant l'équation (2.50) autour d'un état constant d'épaisseur  $h_o$  sur un plan horizontal ( $\beta = 0$ ), non cisailé ( $\tau_i^x = 0$ ), et non soumis à un gradient de pression ( $\frac{\partial P_g}{\partial x} = 0$ ), et en injectant une solution de la forme :

$$\tilde{h} = h_o + h_1 e^{ik(x-ct)} \quad (2.51)$$

on obtient dans la limite des grandes longueurs d'onde de perturbation  $k \ll 1$  l'expression de la célérité des ondes  $c = c_r + i c_i$  suivante :

$$c_r = 0 \quad (2.52a)$$

$$c_i = -\frac{h_o^3}{3\nu} \left[ \rho g - \left( \frac{\partial \Pi_d}{\partial h} \right)_{(h=h_o)} \right] k^2 \quad (2.52b)$$

La limite de stabilité correspond aux solutions de  $c_i = 0$  et permet d'obtenir le diagramme 2.19. Dans le cas d'une pression de disjonction d'un mouillage pseudo-partiel donné par (2.38), on obtient trois comportements d'un film liquide en réponse à une perturbation :

- Si l'épaisseur du film  $h_o$  est du même ordre de grandeur que le rayon d'action moléculaire, ici égal à  $h_*$ , le film est instable en réponse à une perturbation. Les interfaces *solide/liquide* et *liquide/gaz* sont à une distance où elles peuvent interagir et les forces répulsives ont tendance à déstabiliser le film.
- Si l'épaisseur  $h_o$  est petite devant  $h_*$ , les interfaces peuvent toujours interagir, mais le film est stable car les forces attractives stabilisantes sont dominantes.
- Si l'épaisseur  $h_o$  est grande devant  $h_*$ , il n'y a plus d'interaction moléculaires entre les interfaces et le film est stable.

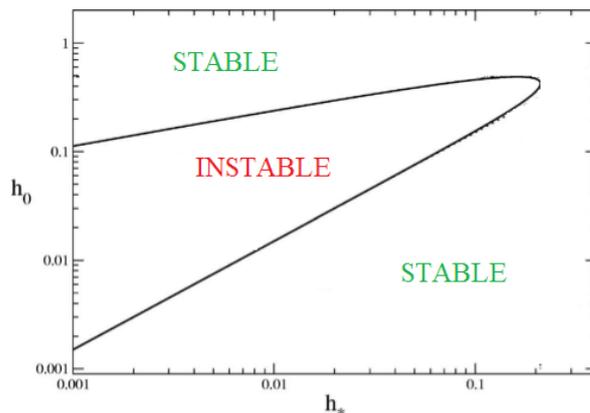


FIGURE 2.19 – Diagramme de stabilité d'un film liquide infini d'épaisseur  $h_0$  obtenu par Kondic [72]. La pression de disjonction s'exprime par (2.38) et l'angle de contact statique  $\theta_s$  est fixé à  $50^\circ$ . Une échelle logarithmique est utilisée.

La stabilité d'un film liquide microscopique est donc fortement dépendante de l'expression de la pression de disjonction  $\Pi_d(h)$ . La bonne modélisation des interactions moléculaires est alors primordiale dans ce type d'études.

### Remarque 3

*Dans le cadre de nos applications, nous étudions des films macroscopiques, i.e. dont l'épaisseur loin du point triple est grande devant le rayon d'action moléculaire. Les instabilités spinodales décrites ci-dessus n'existent donc pas à de telles épaisseurs. De ce fait, l'expression exacte de la pression de disjonction a peu d'importance dans notre cas tant qu'elle respecte la relation augmentée de Young-Dupré (2.48). L'expression simplifiée de cette pression peut-être vue comme une manière de régulariser les forces moléculaires agissants au voisinage du point triple sans modifier le comportement macroscopique du film.*

### 2.2.5 Lois d'angle de contact dynamique

Nous avons introduit à la section 1.2.4 la notion d'angle de contact dynamique  $\theta_d$  qui décrit la variation de l'angle de contact à la ligne triple lorsque le liquide est en mouvement. On trouve plusieurs approches dans la littérature pour expliquer ce phénomène dont une théorie de sauts moléculaires de Blake [69] ou une théorie d'interface diffuse de Pomeau [70]. Toutefois, ce sont des approches hydrodynamiques développées par Cox et Voïnov [66] et De Gennes [67] qui sont les plus utilisées et qui s'accordent le mieux avec les données expérimentales [22]. On présente dans cette section les deux approches.

#### Approche de De Gennes

La méthode de de Gennes consiste à effectuer un bilan énergétique sur une tranche de fluide au voisinage du point triple vue à l'échelle macroscopique. Dans cette zone, on peut raisonnablement supposer que le mouvement du point triple est régi par un compétition entre les forces capillaires et visqueuses. Il suppose également que l'interface *liquide/gaz*

forme macroscopiquement un dièdre avec le substrat. L'angle  $\theta_d$  de ce dièdre, représenté sur la figure 2.20, varie dynamiquement avec la vitesse  $U$  du point triple, et est égal à l'angle de contact statique  $\theta_s$  à l'équilibre.

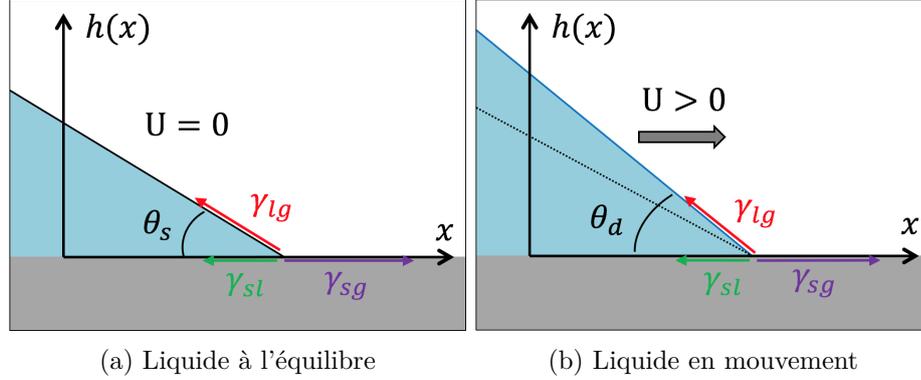


FIGURE 2.20 – Vision macroscopique d'un point triple formant un dièdre avec le substrat proposée par De Gennes [67].

En supposant que le liquide avance à une vitesse constante  $U$ , le travail élémentaire des forces capillaires  $dW_\gamma$  pendant une durée  $dt$  s'écrit :

$$dW_\gamma = [\gamma_{lg} \cos(\theta_d) + \gamma_{sl} - \gamma_{sg}] U dt = \gamma_{lg} [\cos(\theta_d) - \cos(\theta_s)] U dt \quad (2.53)$$

En supposant que le profil de vitesse correspond à un écoulement de Poiseuille avec une condition d'adhérence à la paroi, le travail des forces visqueuses s'écrit :

$$dW_\mu = \int \left[ \frac{3\mu U^2}{h} dt \right] dx = \frac{3\mu U^2 dt}{\tan(\theta_d)} \int \left[ \frac{1}{h} \right] dh \quad (2.54)$$

Puisque l'angle  $\theta_d$  que l'on étudie s'observe à l'échelle macroscopique, le travail des forces visqueuses se calcule dans une tranche de fluide d'épaisseur comprise entre  $h = 0$  et  $h = H \sim mm$ . Cependant, l'intégrale de  $1/h$  fait apparaître une divergence en  $h = 0$  qu'il faut donc tronquer à une échelle de longueur microscopique. On obtient finalement le travail des forces visqueuses :

$$dW_\mu = \frac{3\mu U^2 dt}{\tan(\theta_d)} \ln\left(\frac{H}{a}\right) \quad (2.55)$$

avec  $a$  une épaisseur microscopique. La dépendance logarithmique traduit l'effet divergent des forces visqueuses appelé dans la littérature "paradoxe de la ligne de contact" [59, 60]. En mécanique des fluides, la condition aux limites usuelle utilisée pour décrire un liquide s'écoulant sur un substrat solide est une condition d'adhérence à la paroi : la vitesse du fluide s'annule au contact du substrat. Cette condition est bien posée dans le cas de films d'épaisseurs macroscopiques, mais ne l'est pas à des échelles plus faibles, en particulier au point triple où l'épaisseur  $h$  du film tend vers zéro. Afin de lever ce paradoxe mathématique, on introduit une longueur de coupure moléculaire symbolisant l'échelle en-dessous de laquelle la description hydrodynamique n'a plus de sens [66].

En supposant que le travail des forces capillaires compense la dissipation visqueuse, on obtient la loi de De Gennes suivante :

$$\tan(\theta_d) [\cos(\theta_s) - \cos(\theta_d)] = 3 C_a \ln\left(\frac{H}{a}\right) \quad (2.56)$$

avec  $C_a = \mu U / \gamma_{lg}$  le nombre capillaire. Dans l'hypothèse des petits angles à la ligne triple ( $\theta_d \ll 1$ ) et des faibles variations d'angles ( $\theta_d / \theta_s \sim 1$ ), on obtient la version "onde longue" de (2.56) qui s'écrit :

$$\theta_d^3 - \theta_s^3 \left[ \frac{\theta_d}{\theta_s} \right] \simeq \theta_d^3 - \theta_s^3 = 6 C_a \ln \left( \frac{H}{a} \right) \quad (2.57)$$

On trouve un angle dynamique qui croît lorsque le point triple avance ( $C_a > 0$ ) et décroît lorsqu'il recule ( $C_a < 0$ ), et qui concorde quantitativement avec les observations expérimentales de Le Grand [22].

### Approche de Cox-Voïnov

Contrairement à De Gennes qui regarde le point triple comme un dièdre macroscopique, Cox et Voïnov proposent une vision micro/macro sans négliger la courbure, représentée sur la figure 2.21. Ils considèrent comme De Gennes une échelle macro où l'interface *liquide/gaz* forme un angle dynamique  $\theta_d$  avec le substrat. Par contre, cet angle diffère à l'échelle micro et est fixé par l'angle de contact statique  $\theta_s$ .

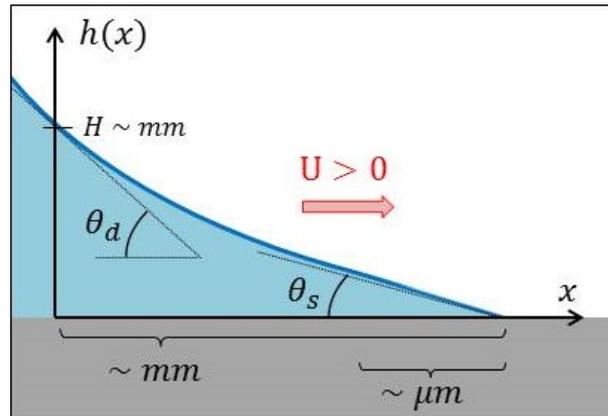


FIGURE 2.21 – Vision à deux échelles d'un point triple proposée par Cox et Voïnov [66].

En supposant que les angles sont petits ( $\theta_d \ll 1$  et  $\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right) \ll 1$ ), et que les forces capillaires et visqueuses sont dominantes, la vitesse moyenne  $U$  du point triple sous l'hypothèse d'un écoulement de Poiseuille s'écrit :

$$U = \frac{h^2}{3\mu} \left( \gamma_{lg} \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} \right) \implies \frac{3C_a}{h^2} = \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} \quad (2.58)$$

En supposant que l'angle  $\theta(x)$  entre l'interface et le substrat varie lentement avec  $x$ , on peut écrire :

$$h(x) = x \theta(x), \quad \frac{\partial^3 h}{\partial x^3} \simeq 3 \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} \quad (2.59)$$

L'intégration de (2.58) dans une tranche de fluide donne la relation de Cox-Voïnov suivante :

$$\theta_d^3 - \theta_s^3 = 9 C_a \ln \left( \frac{H}{a} \right) \quad (2.60)$$

qui est très similaire au modèle obtenu par De Gennes, car l'angle dynamique au cube varie également linéairement avec le nombre capillaire et logarithmiquement avec une échelle de coupure microscopique.

#### Remarque 4

Les deux approches aboutissent à un polynôme de degré 3 en angle de contact dynamique  $\theta_d$  proportionnel au nombre capillaire  $C_a$ . Il apparaît également une dépendance avec un rapport micro/macro nécessaire pour s'affranchir de la singularité à la ligne de contact. Ce rapport constitue un paramètre ajustable et est très difficile à évaluer exactement car il dépend des caractéristiques de surface du solide et des interactions moléculaires. Toutefois, son influence sur l'angle dynamique est faible (logarithmique) et un rapport compris entre de  $10^4$  et  $10^6$  s'accorde bien avec des données expérimentales [13].

### 2.2.6 Condition aux limites à la paroi

Nous avons vu à la section précédente qu'une singularité existe au point triple à cause de la condition aux limites de non-glissement (2.6a) utilisée pour obtenir le profil de vitesse. Cette singularité induit une divergence de la dissipation visqueuse à moins d'introduire "manuellement" une longueur de coupure microscopique. Puisque l'équation de lubrification (2.34) dérive de la condition aux limites (2.6a), elle admet ce même problème théorique. On présente deux solutions très répandues dans la littérature afin de rendre l'équation de lubrification (2.34) consistant avec le mouvement d'un point triple.

#### Approche par longueur de glissement

On rappelle que le choix d'une condition aux limites de non-glissement sur la vitesse longitudinale, du type  $u(z=0) = 0$ , mène à un gradient de vitesse à la paroi qui s'écrit

$$\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{(z=0)} = \frac{1}{\mu} \left( \frac{3}{h(x)} \mu \bar{u}(x) - \frac{\tau_i^x}{2} \right) \quad (2.61)$$

Puisque la condition aux limites de non-glissement induit que (2.61) diverge lorsque  $h$  tend vers 0, celle-ci n'est pas adaptée au voisinage du point triple. Afin de lever cette divergence, Huh [60] et Greenspan [61] proposent de remplacer la condition de non-glissement sur la vitesse par une condition de glissement qui impose que la contrainte visqueuse à la paroi vérifie :

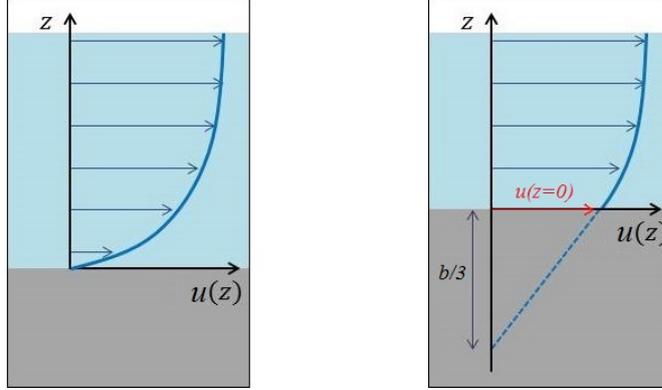
$$\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{(z=0)} = \frac{u(z=0)}{b/3} \quad (2.62)$$

avec  $b$  appelée dans la littérature longueur de glissement. Le facteur  $1/3$  est arbitraire, il permet seulement d'obtenir une forme factorisée de l'expression (2.64c). La nouvelle condition aux limites à la paroi, dite condition de Navier [62, 63], s'écrit alors

$$u(z=0) = \frac{b}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)_{(z=0)} \quad (2.63)$$

La longueur  $b/3$  s'interprète comme la profondeur (à l'intérieur du substrat) à laquelle l'extrapolation linéaire du profil de vitesse s'annule (figure 2.22b). On parle ainsi de condition

de glissement car la vitesse à la paroi  $u(z = 0)$  devient non-nulle. La condition de non-glissement est retrouvée dans la limite  $b = 0$ .



(a) Condition au limites de non-glissement (b) Condition aux limites dite de Navier

FIGURE 2.22 – Représentation du profil de vitesse longitudinal  $u(z)$  en fonction de la condition aux limites à la paroi.

En remplaçant la condition de non-glissement (2.6a) par celle de Navier (2.63), le profil de vitesse parabolique  $u(x, z)$ , sa moyenne dans l'épaisseur du film  $\bar{u}(x)$  et les contraintes visqueuses  $\tau_w(x)$  s'écrivent :

$$u(x, z) = -\frac{1}{\mu} \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \rho g \sin(\alpha) \right] \left( h(z + b/3) - \frac{z^2}{2} \right) + \frac{\tau_i^x}{\mu} (z + b/3) \quad (2.64a)$$

$$\bar{u}(x) = -\frac{h(h+b)}{3\mu} \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \rho g \sin(\alpha) - \frac{3\tau_i^x}{2h} \left( \frac{h + \frac{2}{3}b}{h+b} \right) \right] \quad (2.64b)$$

$$\tau_w(x) = \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{(z=0)} = 3\mu \frac{\bar{u}}{h+b} - \frac{\tau_i^x}{2} \left( \frac{h}{h+b} \right) \quad (2.64c)$$

En réévaluant le travail des forces visqueuses (2.55) de De Gennes, on obtient :

$$dW_\mu = \int \left[ \frac{3\mu U^2}{h+b} dt \right] dx = \frac{3\mu U^2 dt}{\tan(\theta_d)} \ln \left( \frac{H}{b} \right) \quad (2.65)$$

qui ne diverge plus au voisinage du point triple et ne nécessite plus de tronquer l'intégrale en  $h = 0$ , car la longueur de glissement  $b$  joue le rôle de longueur de coupure moléculaire. Finalement, l'équation de lubrification modifiée s'écrit en 2D :

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ -\frac{h^2(h+b)}{3\mu} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( P_g - \gamma_l g \left( \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right) + \rho g h \cos(\beta) - \Pi_d(h) \right) - \rho g \sin(\beta) - \frac{3\tau_i^x}{2h} \left( \frac{h + \frac{2}{3}b}{h+b} \right) \right] \right] \quad (2.66)$$

### Approche par pression de disjonction

Certains auteurs [48, 49, 50, 52] préfèrent utiliser une pression de disjonction qui combine des forces attractives et répulsives. Cette pression permet de décrire un liquide partiellement mouillant, cependant il ne va pas se déplacer sur un substrat sec, mais sur un substrat totalement recouvert d'un film précurseur (voir section 2.2.4). Si on reprend le modèle (2.38) utilisée par Dejarguin, il permet d'introduire un film précurseur à l'équilibre d'épaisseur  $h_*$ . Cette méthode est donc similaire à l'introduction d'une longueur de glissement  $b = h_*$ , car on voit sur la figure 2.23b que la vitesse à la paroi "pré-mouillée"  $u(z = h_*)$  est non-nulle et que le travail des forces visqueuses vaut :

$$dW_\mu = \int \left[ \frac{3\mu U^2}{h} dt \right] dx = \frac{3\mu U^2 dt}{\tan(\theta_d)} \ln \left( \frac{H}{h_*} \right) \quad (2.67)$$

Le film précurseur présent sur le substrat empêche la divergence de la dissipation visqueuse puisque l'épaisseur  $h$  est minorée par  $h_*$ .

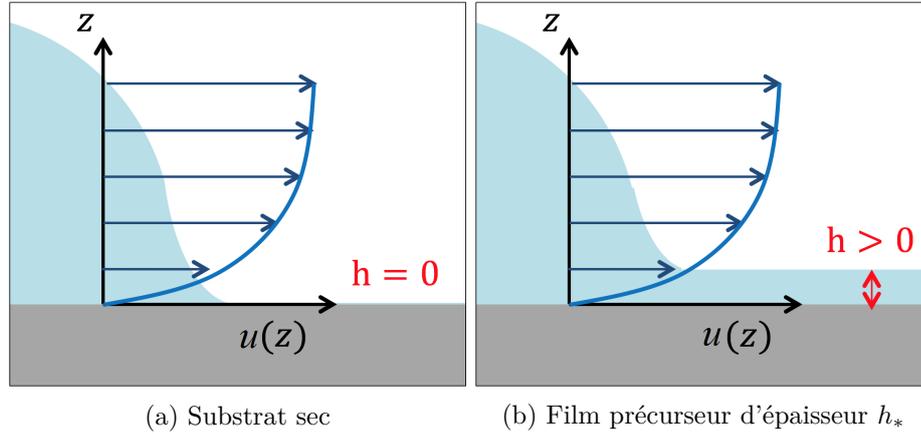


FIGURE 2.23 – Représentation profil de vitesse longitudinal  $u(z)$  dans le cas d'une ligne triple en contact avec un substrat sec et un substrat "pré-mouillé".

### Conclusion

Pour s'affranchir de la singularité à la ligne de contact, le problème est traité dans la littérature en introduisant une longueur de coupure moléculaire via une longueur de glissement  $b$  soit via la présence d'un film précurseur d'épaisseur  $h_*$ . La comparaison des deux approches [107] mène à la conclusion que les résultats sont très proches quand l'épaisseur du film précurseur  $h_*$  et la longueur de glissement  $b$  ont des valeurs similaires.

### 2.2.7 Prédiction et simulation numérique de la formation de ruisselets

Pour comprendre le mécanisme à l'origine de la formation de ruisselets ainsi que leurs caractéristiques, telles que leur taux croissance temporelle ou la distance entre deux ruisselets successifs, plusieurs auteurs se sont intéressés à la stabilité linéaire et à la simulation numérique d'un film s'écoulant sur un plan incliné à partir de l'équation de lubrification (2.35). La littérature sur la transition en ruisselets par cisaillement d'air étant très mince, on ne présente dans cette section que des résultats d'écoulements de films pilotés par la gravité.

### Analyse de stabilité linéaire

Nous considérons un film liquide injecté avec un débit volumique par unité de longueur  $q_o$  constant et uniforme dans la direction  $y$  sur un plan incliné d'un angle  $\beta$  par rotation autour de l'axe  $y$ . Après un court régime transitoire, les résultats expérimentaux [31] montrent que le film adopte une forme d'onde progressive, caractérisée par la présence d'un bourrelet près de la ligne triple, et d'un d'écoulement de Nusselt d'épaisseur  $h^{Nu}$  et de vitesse moyenne  $\bar{u}^{Nu}$  loin de la ligne et donnés par :

$$h^{Nu} = \left( \frac{3 \nu q_o}{g \sin(\beta)} \right)^{1/3} \quad (2.68a)$$

$$\bar{u}^{Nu} = \frac{(h^{Nusselt})^2}{3\nu} g \sin(\beta) \quad (2.68b)$$

Le fluide s'écoule uniformément sans développer aucune structure dans la direction transversale  $y$ , comme schématisé sur la figure 2.24.

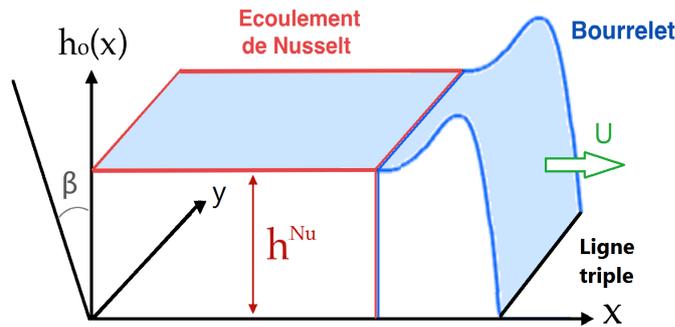


FIGURE 2.24 – Représentation d'un film s'écoulant à débit constant uniformément dans la direction transversale  $y$ .

Cette solution d'onde progressive décrit de manière réaliste la dynamique du fluide, mais seulement dans les premiers instants. Aux temps long, la ligne triple perturbée par des hétérogénéités du substrat ou des forces extérieures peut devenir instable et des ruisselets commencent à se développer. Ce scénario montre que la dynamique à court terme de l'épaisseur du film liquide peut être décrite par la fonction  $h_o(\xi) = h(x, y, t)$  où  $\xi = x - U t$ , ce qui correspond à un profil de base d'onde progressive se déplaçant à la vitesse constante  $U$ . Bertozzi [87], Davis et al. [88] et Kondic [89] ont étudié la stabilité du film vis-à-vis des perturbations dans la direction transversale. Ils imposent une petite perturbation sur le profil de base en posant  $h(\xi, y, t) = h_o(\xi) + \varepsilon h_1(\xi, y, t)$ , avec  $h_1(\xi, y, t) = \varphi(\xi) e^{iky + \omega t}$  la perturbation,  $\varepsilon \ll 1$  son amplitude,  $k = 2\pi/\lambda$  son nombre d'onde, et  $\omega$  le facteur d'amplification temporel. Linéariser l'équation de lubrification (2.35) en  $\varepsilon h_1$  conduit au type d'équation suivante :

$$L \varphi = -\omega \varphi \quad (2.69)$$

avec  $L \left( h_o(\xi), q, \frac{\partial}{\partial \xi}, \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}, \frac{\partial^3}{\partial \xi^3}, \frac{\partial^4}{\partial \xi^4} \right)$  un opérateur linéaire du quatrième ordre. L'équation (2.69) est un problème aux valeurs propres qui peut être résolu numériquement. Elle dépend du nombre d'onde  $k$  de la perturbation et du profil de base  $h_o(\xi)$ . Toutefois, il est possible d'obtenir une expression analytique du facteur d'amplification temporel. En

faisant l'approximation des petites perturbations ( $\vec{\nabla}h \ll 1$ ,  $k \ll 1$ ) et des petites longueurs de glissement ( $b \ll h^{Nusselt}$ ), Bertozzi [87] obtient dans le cas d'un film totalement mouillant :

$$\omega(k) \propto \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} \right) \left[ \left( \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} \right)^2 - 1 \right] d\xi \right\} k^2 + O(k^4) \quad (2.70)$$

La forme du bourrelet près de la ligne triple constitue donc un indicateur direct de stabilité. Si ce bourrelet est suffisamment haut et large par rapport à l'épaisseur  $h^{Nu}$  loin de la ligne triple,  $\omega(k)$  est positif et le front de liquide est instable en réponse à une perturbation dans la direction transversale.

L'expression analytique (2.70) donne des informations sur le taux de croissance mais ne permet pas de déterminer la distance entre les ruisselets. Pour répondre à cette question, il faut déterminer  $\omega(k)$  pour des nombres d'onde  $k$  plus grands. Un terme supplémentaire proportionnel à  $k^4$  est manquant, il produit une contribution négative à  $\omega(k)$  car il implique la tension de surface toujours stabilisante. Typiquement,  $\omega$  sera positif pour les petits  $k$  et négatif pour les grands  $k$ . Un tracé est représenté sur la figure 2.25.

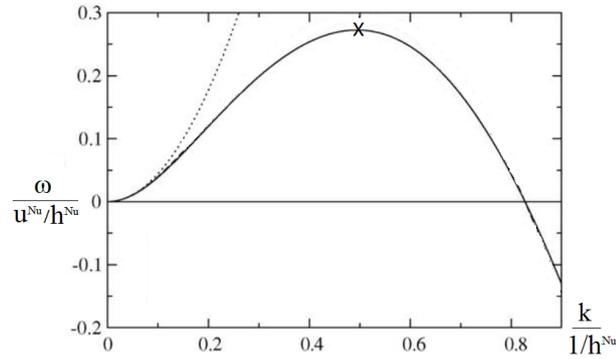


FIGURE 2.25 – Diagramme de stabilité  $\omega = f(k)$ . La solution en trait continu est obtenu par résolution numérique de (2.69) et celle en pointillé est obtenu analytiquement par calcul de (2.70). Les détails sur la configuration étudiée sont donnés dans [107].

Dans l'intervalle des  $k$  instables, un nombre d'onde (ou une longueur d'onde) est caractérisé(e) par le facteur d'amplification le plus élevé. En supposant que la formation des ruisselets est pilotée par l'amplification de cette longueur d'onde, cette analyse de stabilité permet à priori de retrouver l'espacement entre les ruisselets à condition de connaître le profil longitudinal  $h_o(\xi)$ .

### Prédiction de la formation de ruisselets

Plusieurs auteurs se sont intéressés à l'influence des conditions expérimentales sur la formation de ruisselets. Ces études, principalement motivées par des applications industrielles, visent à contrôler le déclenchement de ces instabilités. L'outil le plus rapide que l'on peut utiliser pour mener ce genre d'étude est l'analyse de stabilité linéaire décrite au paragraphe précédent. A partir des conditions d'injection (débit volumique linéique  $q_o$ , inclinaison du plan  $\beta$ ), des propriétés du liquide et des propriétés du substrat (angle de contact  $\theta_s$ , longueur de glissement  $b$ ), on peut calculer numériquement le profil de base  $h_o(\xi)$  injecté sur le substrat et étudier sa stabilité. Ces analyses de stabilité se retrouvent

dans les travaux de Marshall [97], Troian [86], Bertozzi [87] et Slade [117]. Ce dernier a en particulier comparé l'espacement entre les ruisselets prédits par l'analyse de stabilité linéaire (en pointillé) avec les résultats expérimentaux (losanges) de Johnson [31] représentés sur la figure 2.26. On constate qu'à débit d'injection fixé, l'espacement obtenu par analyse de stabilité linéaire est proche de l'espacement expérimental uniquement dans le cas de grandes inclinaisons  $\beta$  du plan proches de  $90^\circ$ . En réduisant l'inclinaison  $\beta$ , l'analyse de stabilité prédit la bonne tendance d'augmentation de l'espacement, mais les valeurs sont qualitatives.

La deuxième méthode de prédiction de l'espacement des ruisselets consiste à réaliser des simulations numériques instationnaires. Kondic and Diez [93, 94, 95, 96], Eres et al. [92], Marshall [97] et Slade [117] ont ainsi simulé les configurations de Johnson en utilisant l'équation de lubrification (2.50). On constate sur la figure 2.26 que les espacements obtenus par simulation numérique sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux.

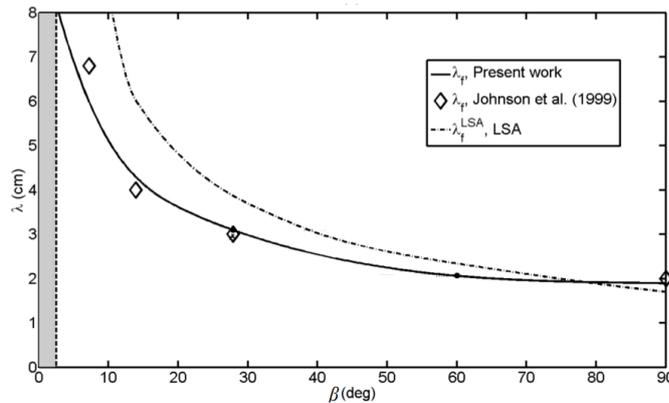


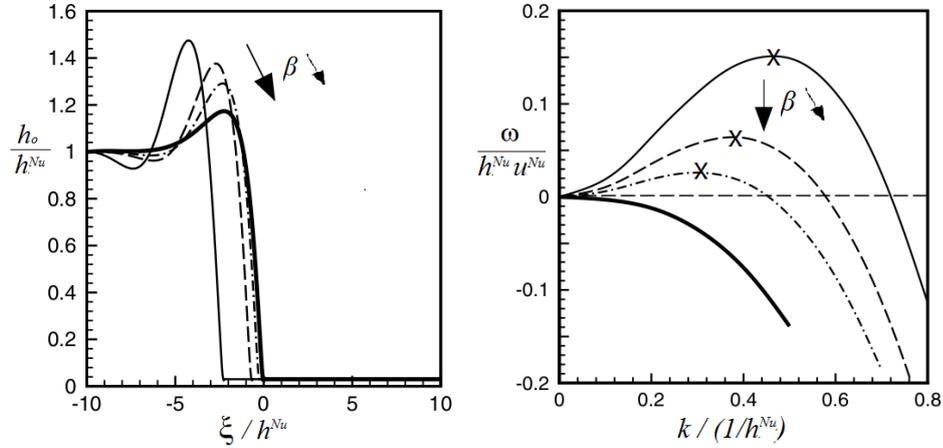
FIGURE 2.26 – Evolution de l'espacement entre les ruisselets en fonction de l'inclinaison  $\beta$  du plan à débit volumique fixé dans le cas du fluide B partiellement mouillant [31]. Les losanges sont les espacements expérimentaux, la solution en trait pointillé est obtenue par analyse de stabilité linéaire, et celle en trait continu est une loi extrapolée des résultats de simulations numériques. Les détails sur la configuration étudiée sont donnés dans [117].

On peut conclure des résultats de la littérature que l'utilisation d'une équation de lubrification permet de simuler avec une bonne précision la transition d'un film tombant en ruisselets. L'analyse de stabilité linéaire obtenue à partir de cette équation peut également constituer un bon outil afin de prédire la stabilité du film, mais n'est toutefois pas suffisamment précise pour retrouver le bon espacement.

### Influence des paramètres physiques et numériques sur la géométrie des ruisselets

Les études qui s'intéressent à l'influence de l'inclinaison du substrat prédisent qu'une forte inclinaison est favorable au développement d'instabilités transversales (figure 2.30b). Ce comportement est une conséquence directe de l'aplatissement du bourrelet par gravité avec l'horizontalité du substrat, induisant une diminution du facteur d'amplification (2.70), comme représenté sur la figure 2.30a. Une inclinaison croissante induit également une apparition plus rapide et un espacement plus réduit des ruisselets. Ce comportement

théorique s'observe bien dans les simulations numériques de Slade [117] et les expériences de Huppert et de Johnson.



(a) Solution en onde progressive  $h_o(\xi)$  (b) Diagramme de stabilité  $\omega = f(k)$  obtenu par simulation numérique. obtenu par analyse de stabilité linéaire.

FIGURE 2.27 – Influence de l'inclinaison  $\beta$  du plan sur le profil en onde progressive  $h_o(\xi)$  et sa stabilité. Les détails du calcul sont donnés dans [97].

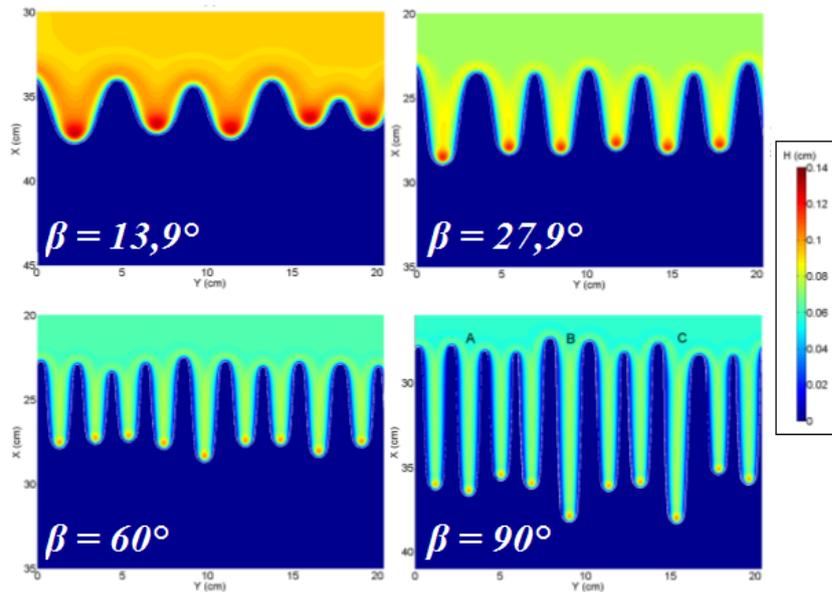


FIGURE 2.28 – Influence de l'inclinaison  $\beta$  du plan sur le développement des ruisselets. Les résultats sont pris au même instant  $t$ , traduisant un développement plus rapide des ruisselets quand le substrat est incliné. Simulation numérique obtenue par Slade [117].

Marshall [97] et Slade [117] se sont intéressés aux propriétés de mouillage et prédisent numériquement qu'une perturbation transversale a plus de chance de s'amplifier pour un liquide hydrophobe que pour un liquide hydrophile. Leurs analyses de stabilité sur la figure 2.29 montrent qu'une augmentation de l'angle de contact statique  $\theta_s$  entraîne

une croissance de la taille du bourrelet qui est par conséquent plus instable. De plus, leurs simulations numériques (figure 2.30) s'accordent bien avec les clichés de Huppert (figure 2.8) car elles décrivent bien des ruisselets en dent de scie dans le cas d'un liquide totalement mouillant et des ruisselets fins et droits dans le cas partiellement mouillant. Ils remarquent également que l'espacement entre les ruisselets est plus petit pour des liquides hydrophobes.

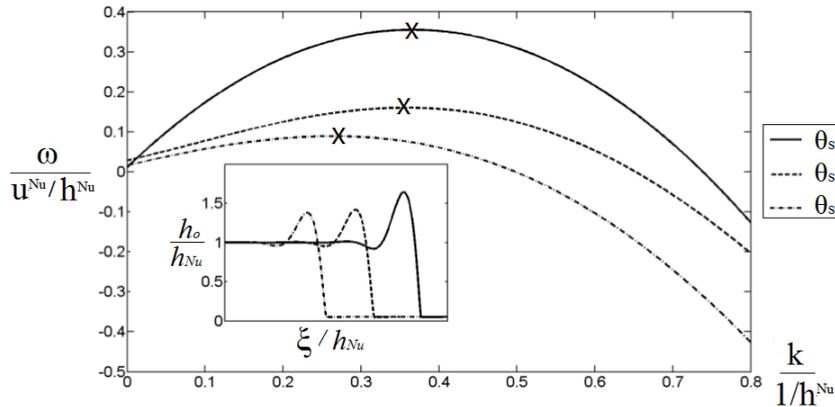


FIGURE 2.29 – Influence de l'angle de contact statique  $\theta_s$  sur le profil en onde progressive  $h_o(\xi)$  et sa stabilité. Les détails du calcul sont donnés dans [117].

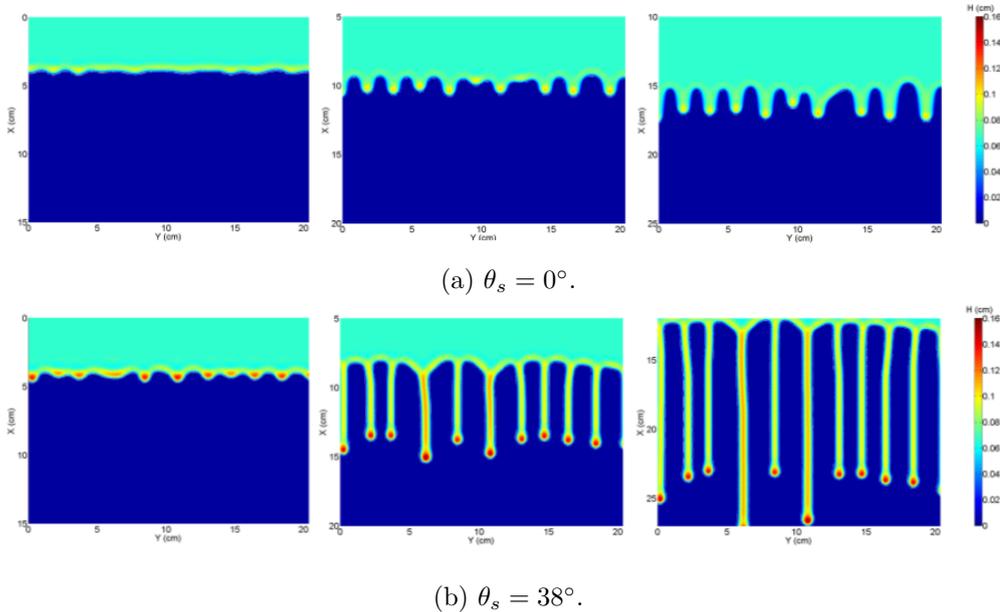
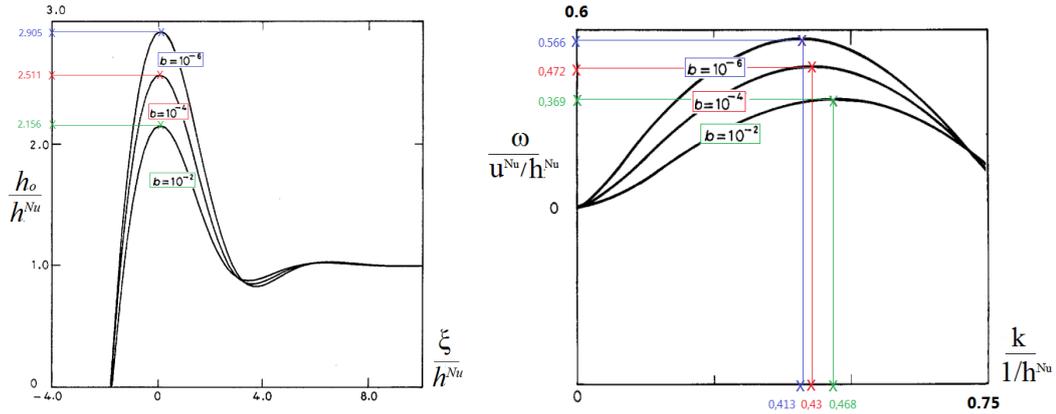


FIGURE 2.30 – Influence de l'angle de contact  $\theta_s$  sur l'évolution temporelle des ruisselets. Simulation numérique obtenue par Slade [117].

Les deux derniers paramètres qui sont purement numériques et qui ont fait l'objet d'études approfondies dans le cas de films totalement mouillants sont la longueur de glissement  $b$  et le film précurseur  $h_m$  introduits à la section 2.2.6. Par analyse de stabilité,

Troian [86] et Bertozzi [87] ont d'une part montré que le choix d'une méthode par glissement ou par film précurseur mène à des résultats quasiment identiques si  $b$  et  $h_m$  sont égaux. D'autre part, même si ce paramètre numérique est difficile à évaluer précisément, il influe au final plus sur la vitesse de développement des ruisselets que sur leur espacement tant qu'il reste petit devant l'épaisseur de l'écoulement de Nusselt. En effet, on voit sur la figure 2.31 que le passage de  $b = h^{Nu}/10^2$  à  $b = h^{Nu}/10^6$  induit une variation du facteur d'amplification temporel maximal de 35% mais n'induit qu'une variation de 11% sur la longueur d'onde théorique. Les résultats de cette analyse ont été confirmés par des simulations numériques de Zao et al. [98].



(a) Solution en onde progressive  $h_o(\xi)$  (b) Diagramme de stabilité  $\omega = f(k)$  obtenu par résolution numérique de l'équation (2.69).

FIGURE 2.31 – Influence de la longueur de glissement  $b$  (adimensionnée par  $h^{Nu}$ ) sur le profil en onde progressive  $h_o(\xi)$  et sa stabilité. Les valeurs des points ont été extrapolées depuis les courbes de [86].

## 2.3 Conclusion

Nous avons présenté un état de l'art sur les travaux les plus importants dans le domaine de la compréhension et de la modélisation des écoulements de films liquides incluant des phénomènes capillaires et de mouillabilité dans la littérature.

Il existe plusieurs modèles réduits 2D à une (modèle de Benney [6]), à deux (modèle de Shkadov [9]), et à trois équations (modèle de Lavallo [11]) pour simuler des écoulements 2D de films minces avec capillarité. Cependant, seul l'équation de lubrification de Benney a été généralisée en 3D et modifiée pour y inclure la modélisation de la ligne triple. Le terme capillaire de cette équation fait intervenir une dérivée spatiale du quatrième ordre qui est difficile à discrétiser sur un maillage non-structuré dans le cadre d'une formulation Volumes Finis (notée VF). Cette contrainte sur le maillage limite les simulations numériques possibles à des configurations très académiques (écoulement d'un film sur une plaque plane). Le développement d'un nouveau modèle compatible avec l'utilisation de maillages non-structurés pour des applications plus complexes constitue un réel enjeu et sera abordé dans le cadre de ce travail.

De plus, les termes capillaires sont en général modélisés avec une hypothèse "onde longue" (courbure de l'interface approchée par l'expression  $K \simeq -\Delta h$ ), limitant leur précision à

des liquides très mouillants dont l'angle de contact statique est très petit ( $\theta_s \ll 1$ ). On rappelle que l'eau rencontrée en application de dégivrage est un liquide généralement peu mouillant ( $\theta_s \sim 1$ ). Une nouvelle écriture des termes capillaires permettant une extension de leur domaine de validité représente un autre axe d'étude privilégié pour cette thèse. Enfin, très peu de simulations numériques de films cisailés par un gaz ont à ce jour été effectuées avec des modèles réduits. Ce type de configuration est intéressant à étudier et à simuler dans le contexte aéronautique.

De nombreuses pistes d'amélioration de l'équation de lubrification, très majoritairement utilisée dans la littérature, sont ouvertes. Les deux prochaines parties se concentrent sur le travail de thèse dédié au développement d'un modèle réduit 2D et 3D pour la simulation numérique d'un film liquide soumis à la gravité et/ou au cisaillement d'un gaz. Ce modèle destiné à des applications industrielles (pour la modélisation des systèmes de dégivrage notamment) doit être adapté à une formulation VF générale et applicable à n'importe quel type de liquide sans limitation en terme d'angle de contact au voisinage de la ligne triple.



Deuxième partie

**Modélisation bidimensionnelle**



## Chapitre 3

# Etablissement des équations du modèle continu bidimensionnel

Dans ce chapitre, on introduit un nouveau modèle continu 2D dont l'intention est de modéliser la dynamique d'un film macroscopique piloté par la gravité, la capillarité, le cisaillement de la couche limite gazeuse, et les interactions moléculaires à l'origine du démouillage. Nous avons fait le choix d'utiliser des équations de type intégrales, tels celles présentées au chapitre 2, qui ont l'avantage de fortement réduire le temps de calcul par rapport à une résolution complète des équations de Navier-Stokes. Cette efficacité de calcul est particulièrement recherchée pour la simulation de phénomènes complexes multi-échelles, tel les phénomènes de mouillage, qui peuvent nécessiter des temps de simulations longs.

Dans le cadre des écoulements rencontrés dans les applications en givrage, qui sont à faibles nombres de Reynolds ( $Re \sim 1$ ), la dynamique du film liquide peut être simulée avec une bonne précision par l'équation de lubrification. Cependant, en 3D particulièrement, cette équation différentielle du quatrième ordre n'est pas adaptée à une discrétisation dans le cadre d'une formulation Volume Finis sur maillage non structuré. On propose donc un nouveau modèle strictement équivalent à l'équation de lubrification (dans la limite  $Re \sim 1$ ). Il se compose d'un système à deux équations de type Saint Venant, écrit sous forme conservative, et complété par une équation de transport supplémentaire pour le gradient d'épaisseur du film. Le grand avantage est que ce modèle à trois équations correspond à un système différentiel conservatif, du second ordre espace, et bien adapté à une formulation Volume Finis.

En s'inspirant de ce qui est généralement fait dans la littérature, les interactions moléculaires au voisinage du point triple sont prises en compte à l'aide d'un terme de pression de disjonction. Une expression adéquate est proposée afin de modéliser une vraie situation de mouillage partiel. En d'autres termes, une expression qui garantit que l'interface *liquide/gaz* rencontre un substrat sec (d'épaisseur nulle) au point triple. En ce qui concerne le paradoxe de la ligne de contact, expliqué à la section 2.2.6, l'approche basée sur l'introduction d'une longueur de glissement  $b$  est adoptée.

## Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Dérivation de l'équation de lubrification . . . . .</b>	<b>80</b>
3.1.1	Hypothèses du problème . . . . .	80
3.1.2	Conditions aux limites . . . . .	82
3.1.3	Equation de conservation de la masse . . . . .	83
3.1.4	Modèle de fermeture . . . . .	85
<b>3.2</b>	<b>Formulation équivalente de type Saint Venant . . . . .</b>	<b>87</b>
3.2.1	Equation de conservation de la quantité de mouvement . . . . .	88
3.2.2	Equivalence avec l'équation de lubrification . . . . .	91
3.2.3	Système augmenté . . . . .	91
3.2.4	Définition de la densité surfacique d'énergie d'un film . . . . .	92
3.2.5	Mise sous forme conservative du bilan de quantité de mouvement . . . . .	93
<b>3.3</b>	<b>Equation d'énergie associée . . . . .</b>	<b>96</b>
3.3.1	Réécriture du système à l'aide des variables "entropiques" . . . . .	97
3.3.2	Equation de conservation de l'énergie . . . . .	97
<b>3.4</b>	<b>Prise en compte des phénomènes de mouillage . . . . .</b>	<b>99</b>
3.4.1	Présentation de la démarche . . . . .	99
3.4.2	Construction de la densité surfacique d'énergie de disjonction . . . . .	99
3.4.3	Vérification de la relation de Young-Dupré à l'échelle macroscopique pour un film statique . . . . .	104
3.4.4	Vérification du bon comportement du modèle pour des situations de mouillage dynamique . . . . .	105
<b>3.5</b>	<b>Analyse de stabilité linéaire . . . . .</b>	<b>107</b>
3.5.1	Linéarisation du système autour d'un état d'équilibre . . . . .	107
3.5.2	Relation de dispersion . . . . .	108
3.5.3	Stabilité d'un film dans différentes configurations . . . . .	110
3.5.4	Remarques sur la partie réelle de la célérité des ondes . . . . .	113
<b>3.6</b>	<b>Hyperbolicité . . . . .</b>	<b>114</b>
3.6.1	Calcul des valeurs propres du système linéarisé du premier ordre . . . . .	114
3.6.2	Analyse de l'hyperbolicité du système . . . . .	116
<b>3.7</b>	<b>Conclusion du chapitre . . . . .</b>	<b>117</b>

---

## 3.1 Dérivation de l'équation de lubrification

### 3.1.1 Hypothèses du problème

On considère un écoulement incompressible en deux dimensions cisailé par un écoulement de gaz et se déplaçant sur un substrat solide. L'axe  $x$  est parallèle au substrat et l'axe  $z$  est perpendiculaire. La surface du liquide correspond donc à  $z = h(x, t)$ , où  $h$  est l'épaisseur du film liquide. Les effets de courbure du substrat sont négligés, il est donc assimilé à un plan incliné localement d'un angle  $\beta(x)$ . Dans le cadre de nos applications visant à reproduire des dynamiques de mouillage, on trouve deux grandes catégories d'écoulements représentés sur la figure 3.1 : les écoulements dits "à débit constant", où on étudie l'évolution d'un liquide injecté avec un débit volumique par unité de longueur  $q$  sur le substrat, et les écoulements dits "à volume constant", où on étudie l'évolution d'un volume de liquide déposé sur le substrat.

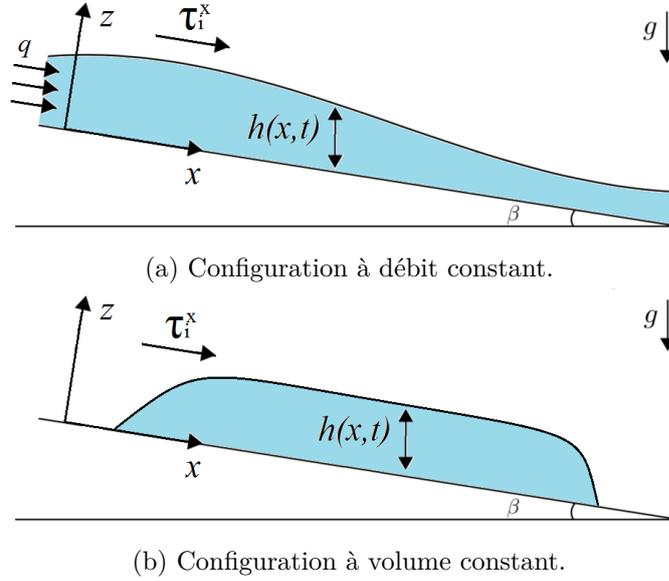


FIGURE 3.1 – Représentation 2D d'un film liquide sécoulant sur un plan incliné d'un angle  $\beta$  et soumis à un cisaillement gazeux  $\tau_i^x$ .

### Écoulements étudiés

Les films liquides rencontrés dans les applications de givrage aéronautique que nous souhaitons modéliser sont des films qui se déplacent principalement sous l'effet du cisaillement du gaz. Dans ce type de configuration, on peut montrer (voir Annexe A) que les nombres de Reynolds de Froude et de Weber valent respectivement

$$Re = \frac{\rho u_o h_o}{\mu} \sim 1 \quad (3.1a)$$

$$Fr = \frac{u_o^2}{g h_o} \gg 1 \quad (3.1b)$$

$$We = \frac{\rho u_o^2 h_o}{\gamma g} \ll 1 \quad (3.1c)$$

avec  $u_o$  la vitesse moyenne du liquide et  $h_o$  son épaisseur. Comme nous l'avons mentionné au chapitre 2, la littérature numérique et expérimentale sur les films minces cisailés est encore à ce jour très mince. On trouve davantage d'études sur des films tombants, i.e. pilotés par la gravité, qui vérifient [8, 11]

$$Re \sim 1, \quad Fr \sim 1, \quad We \ll 1 \quad (3.2)$$

On propose donc un modèle dont le domaine de validité en terme de nombres adimensionnés s'écrit

$$Re \sim 1, \quad \begin{cases} Fr \sim 1 \\ Fr \gg 1 \end{cases}, \quad We \ll 1 \quad (3.3)$$

afin qu'il soit adapté aux applications visées de films cisailés ( $Fr \gg 1$ ), tout en étant valable pour des études de films tombants ( $Fr \sim 1$ ) auxquelles il sera majoritairement comparé.

**Hypothèse onde longue**

Des expériences ont montré qu'à petit nombre de Reynolds ( $Re \sim 1$ ), l'amplitude des vagues est très faible devant l'épaisseur du film [100] et l'écoulement est dit à "ondes longues". Ainsi, si on introduit  $L_o$  une longueur caractéristique de l'écoulement dans la direction longitudinale  $x$ , on peut introduire le rapport  $\epsilon$  suivant :

$$\epsilon = h_o/L_o \ll 1 \quad (3.4)$$

Dans le cas d'un film s'écoulant à débit constant, la longueur caractéristique  $L_o$  représente la longueur d'onde des vagues (figure 3.1a), et dans le cas d'un écoulement à volume constant, elle représente la longueur d'étalement du film (figure 3.1b). Cette hypothèse permet de supposer que l'écoulement est quasi parallèle, soit

$$v(x, z, t) \ll u(x, z, t) \quad (3.5)$$

avec  $u(x, z, t)$  le champ de vitesse longitudinal (direction  $x$ ) et  $v(x, z, t)$  le champ de vitesse normal (direction  $z$ ).

**Remarque 5**

*En condition de givrage aéronautique, l'interface liquide/gaz peut être le siège de flux de masses. On trouve des flux entrants dans le système, ils proviennent de gouttes qui impactent l'interface liquide/gaz. On trouve aussi des flux sortants issus des phénomènes d'évaporation. Ces phénomènes ne sont pas abordés dans le cadre de ce travail. On invite le lecteur à se référer à la thèse de R. Chauvin [84] pour plus de détails sur l'intégration de ces flux de masses dans une équation de lubrification.*

**3.1.2 Conditions aux limites**

La dynamique du film est décrite par son champ de vitesse  $u(x, z, t)$  longitudinal, son champ de vitesse  $v(x, z, t)$  normal, et son champ de pression  $P(x, z, t)$ . Afin de déterminer ces trois inconnues, il faut définir au préalable des conditions aux limites, i.e. leurs valeurs à la paroi ( $z = 0$ ) et à l'interface ( $z = h$ ). On applique une condition aux limites de non-glisement à la paroi pour le champ de vitesse transversal :

$$v(z = 0) = 0 \quad (3.6)$$

une condition de Navier pour le champ de vitesse longitudinal :

$$u(z = 0) = \frac{b}{3} \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{(z=0)} \quad (3.7)$$

avec  $b$  la longueur de glissement introduite à la section 2.2.6. Le facteur  $1/3$  est arbitraire, il permet seulement d'obtenir une forme factorisée de l'équation (3.28). On applique une condition de continuité des contraintes tangentielles à l'interface *liquide/gaz* (qui sera démontrée à la section 3.2.1) :

$$\mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{(x, z=h)} = \mu_g \left( \frac{\partial u_g}{\partial z} \right)_{(x, z=h)} = \tau_i^x \quad (3.8)$$

avec  $\mu$  (resp.  $\mu_g$ ) la viscosité dynamique du liquide (resp. du gaz),  $u(x, z)$  (resp.  $u_g(x, z)$ ) le champ de vitesse dans la phase liquide (reps. la phase gazeuse) et  $\tau_i^x$  le taux de cisaillement à l'interface *liquide/gaz*. On applique également la condition de saut de pression à l'interface introduite à la section 1.1.2 :

$$P(x, z = h) = \underbrace{P_g(x)}_{\text{Pression du gaz}} + \underbrace{\gamma_{lg} K^{xz}(x)}_{\text{Pression de Laplace}} \quad (3.9)$$

avec  $\gamma_{lg}$  la tension de surface *liquide/gaz* et  $K^{xz}$  la courbure de l'interface dans le plan  $(xz)$ . Comme nous l'avons souligné à la section 2.1.3, la courbure  $K^{xz}$  de l'interface admet comme expression exacte

$$K^{xz}(x) = -\frac{\left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}\right)}{\left(1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2\right)^{3/2}} \quad (3.10)$$

qui est généralement simplifiée dans la littérature par  $-(\partial^2 h/\partial x^2)$  en supposant que la pente locale de l'interface *liquide/gaz* est très petite, i.e.  $(\partial h/\partial x) \ll 1$ . Dans le cadre de ce travail, nous cherchons à simuler des dynamiques de mouillage. Il est alors nécessaire de bien modéliser les forces capillaires au voisinage du point triple, qui est le point où l'interface *liquide/gaz* rencontre le substrat. Loin de ce point, le film liquide est généralement très plat, on a donc  $(\partial h/\partial x) \ll 1$  et l'approximation de la courbure est valable. Cependant, au voisinage de ce point, nous avons vu à la section 1.2.4 que l'interface *liquide/gaz* forme un angle  $\theta_d$  avec le substrat, représenté sur la figure 3.2. Cet angle est statiquement et dynamiquement grand pour des liquides non mouillants, qui sont les types de liquide que nous souhaitons étudier. Par conséquent, la pente locale de l'interface, qui vaut  $(\partial h/\partial x) = \tan(\theta_d)$ , est également grande. Nous utiliserons donc l'expression exacte (3.10) de la courbure afin de pouvoir modéliser les forces capillaires au voisinage du point triple sans limite de validité pour l'angle de contact dynamique  $\theta_d$  (ou statique  $\theta_s$ ).

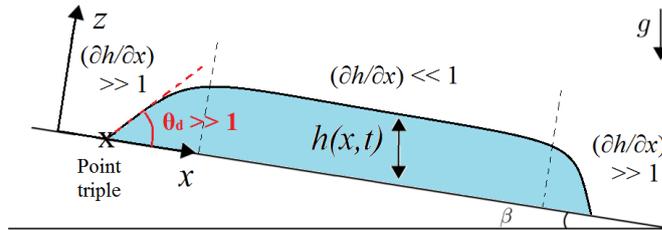


FIGURE 3.2 – Représentation 2D d'un film liquide séchant sur un plan incliné d'un angle  $\beta$ . L'angle  $\theta_d$  représente l'angle apparent à l'échelle macroscopique que fait l'interface *liquide/gaz* avec le substrat.

### 3.1.3 Equation de conservation de la masse

#### Intégration sur la hauteur du film

Le liquide est supposé incompressible newtonien, de propriétés physiques constantes. Les équations utilisées pour décrire la dynamique du film sont donc celles de Navier-Stokes pour un fluide incompressible, et la conservation de la masse s'écrit dans le plan  $(x, z)$  :

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (3.11)$$

Sous l'hypothèse "onde longue", les variations spatiales de l'épaisseur du film sont faibles. On peut alors considérer que le film ne peut pas déferler, cela implique que sa hauteur est uniquement fonction de la coordonnée  $x$ . On peut alors intégrer (3.11) sur la hauteur du film dans la direction  $z$ , ce qui donne :

$$\int_0^{h(x,y)} \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) dz = 0 \quad (3.12)$$

En appliquant la règle de Leibniz sous le signe d'intégration, il vient

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \underbrace{\int_0^h u dz}_{= h \bar{u}} \right] - u(z=h) \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right) + v(z=h) - v(z=0) = 0 \quad (3.13)$$

Et en utilisant la condition de non-glissement (3.6), l'équation intégrale de conservation de la masse s'écrit provisoirement

$$\frac{\partial(h\bar{u})}{\partial x} - u(z=h) \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right) + v(z=h) = 0 \quad (3.14)$$

avec  $\bar{u}$  la vitesse dans la direction  $x$  moyennée sur la hauteur du film.

### Continuité des vitesses à l'interface *liquide/gaz*

En effectuant un bilan de masse à l'interface *liquide/gaz*, on peut écrire [11] :

$$\rho \left( \frac{Dh}{Dt} - v(x, z=h) \right) - \rho_g \left( \frac{Dh}{Dt} - v_g(x, z=h) \right) = 0 \quad (3.15)$$

L'interface étant une discontinuité de contact, la relation (3.17) implique

$$\frac{Dh}{Dt} - v(x, z=h) = 0 \quad (3.16a)$$

$$\frac{Dh}{Dt} - v_g(x, z=h) = 0 \quad (3.16b)$$

avec  $\frac{Dh}{Dt}$  la dérivée particulière donnée par

$$\frac{Dh}{Dt} = \frac{\partial h}{\partial t} + u(z=h) \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right) \quad (3.17)$$

La relation (3.16a) s'écrit donc :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + u(z=h) \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right) - v(z=h) = 0 \quad (3.18)$$

appelée dans la littérature "équation de continuité des vitesses".

### Bilan intégral de masse

La forme finale de l'équation intégrale de conservation de la masse s'obtient en injectant (3.18) dans (3.14)

$$\underbrace{\frac{\partial h}{\partial t}}_{\text{Variation de la hauteur}} = - \underbrace{\frac{\partial(h\bar{u})}{\partial x}}_{\text{Flux convectif volumique}} \quad (3.19)$$

On retrouve bien l'équation (2.2) de Benney décrivant qu'en chaque point  $x$  du domaine, la variation de la hauteur du film dépend du taux de variation en  $x$  des flux convectifs volumiques. Cette équation n'est toutefois pas fermée et car elle possède deux inconnues  $h$  et  $\bar{u}$ .

#### 3.1.4 Modèle de fermeture

L'objet de cette section est de fermer l'équation de conservation de la masse (3.19). Pour déterminer ces inconnues, nous allons utiliser les équations de N-S dans le plan  $(x, z)$  :

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (3.20a)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + g^x + \nu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \quad (3.20b)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + g^z + \nu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \quad (3.20c)$$

où  $\nu$  désigne la viscosité cinématique du liquide et  $g^x$  (resp.  $g^z$ ) est la gravité projetée sur l'axe  $x$  (resp. l'axe  $z$ ). En utilisant les hypothèses d'onde longue et de faible nombre de Reynolds, le système d'équation (3.20) peut s'écrire sous la forme d'un développement limité en fonction du paramètre onde longue  $\varepsilon \ll 1$  introduit à la section 2.1.3. Le système va pouvoir être simplifié par analyse dimensionnelle, puis résolu.

#### Développement limité en $\varepsilon$ des équations de N-S

On procède à un adimensionnement à l'aide des changements de variables suivants :

$$x = \tilde{x} L_0, \quad z = \tilde{z} h_0, \quad t = \tilde{t} t_0, \quad (3.21a)$$

$$u = \tilde{u} u_0, \quad v = \tilde{v} v_0, \quad P = \tilde{P} (\rho u_0^2) \quad (3.21b)$$

$$g^x = \tilde{g}^x g, \quad g^z = \tilde{g}^z g \quad (3.21c)$$

avec  $u_0 = L_o/t_o$  l'ordre de grandeur de la vitesse longitudinale du film,  $v_o = h_o/t_o$  celui de sa vitesse normale,  $h_o$  celui de son épaisseur, et  $t_o$  l'échelle de temps d'étalement du film. En se plaçant dans nos hypothèses d'études, données par les relations (3.3), (3.4) et

(3.5), on peut écrire :

$$\frac{h_o}{L_o} = \epsilon \quad (3.22a)$$

$$\frac{v_o}{u_o} = \epsilon \quad (3.22b)$$

$$Re = O(1) \quad (3.22c)$$

$$O(1) \leq Fr \leq O\left(\frac{1}{\epsilon}\right) \quad (3.22d)$$

Pour que la fermeture des équations soit unique, il faut fixer l'ordre de grandeur du nombre Froude. Afin de s'assurer que les forces gravitationnelles soient bien prises en compte dans le cas d'un film tombant car elles y sont dominantes, on impose que le Froude vaut

$$Fr = O(1) \quad (3.23)$$

Par conséquent, le modèle proposé tiendra également compte des forces gravitationnelles dans le cas d'un film fortement cisailé même si cela n'est pas nécessaire d'un point de vue dimensionnel. Les équations adimensionnées de N-S ont alors pour expression :

$$\left(\frac{1}{\epsilon}\right) \left[ \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{x}}\right) + \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{z}}\right) \right] = 0 \quad (3.24a)$$

$$\left(\frac{1}{\epsilon}\right) \left[ \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \tilde{z}^2}\right) + \frac{\tilde{g}^x}{Fr} \right] - \left[ \frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{x}} \right] \quad (3.24b)$$

$$+ \left[ \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{u} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{x}} + \tilde{v} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{z}} \right] + \epsilon \left[ \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \tilde{z}^2}\right) \right] = 0$$

$$\left(\frac{1}{\epsilon}\right) \left[ -\frac{\partial \tilde{P}}{\partial \tilde{z}} + \frac{\tilde{g}^z}{Fr} \right] + \left[ \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \tilde{v}}{\partial \tilde{z}^2}\right) \right] \quad (3.24c)$$

$$+ \epsilon \left[ \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{t}} + \tilde{u} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{x}} + \tilde{v} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial \tilde{z}} \right] + \epsilon^2 \left[ \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \tilde{v}}{\partial \tilde{x}^2}\right) \right] = 0$$

### Simplification et résolution des équations

Nous souhaitons simplifier par analyse dimensionnelle les équations (3.24) en ne conservant que les termes dominants, soit les termes en  $1/\epsilon$  et les termes de pression (dont l'ordre de grandeur n'est pas fixé a priori). Les équations (3.24), réécrites sous forme dimensionnée, se réduisent finalement à :

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (3.25a)$$

$$\mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right) = \frac{\partial P}{\partial x} - \rho g^x \quad (3.25b)$$

$$\frac{\partial P}{\partial z} = \rho g^z \quad (3.25c)$$

En résolvant le système (3.25) avec les conditions aux limites de non-glissement (3.6) et de Navier à la paroi (3.7), de continuité des contraintes à l'interface (3.8) et de saut de

pression de Laplace (3.9), on obtient le champ de vitesse et de pression suivant :

$$u(x, z) = \frac{1}{\mu} \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \rho g^x \right] \left( \frac{z^2}{2} - h(z + b/3) \right) + \frac{\tau_i^x}{\mu} (z + b/3) \quad (3.26a)$$

$$P(x, z) = P_g - \gamma g \underbrace{\left[ \frac{\left( \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right)}{\left( 1 + \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \right)^{3/2}} \right]}_{= -K^{xz}} + \rho g^z [h - z] \quad (3.26b)$$

qui sont uniquement fonctions de l'épaisseur  $h$  du film et des données physiques du problème. En exprimant la courbure  $K^{xz}$  sous la forme conservative suivante

$$K^{xz}(x) = - \frac{\left( \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \right)}{\left( 1 + \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \right)^{3/2}} = - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)}{\left( 1 + \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \right)^{1/2}} \right] \quad (3.27)$$

et en adoptant par soucis de clareté les notation  $h_x = (\partial h / \partial x)$  et  $h_{xx} = (\partial^2 h / \partial x^2)$ , l'équation (3.19), appelée équation de lubrification, est donc fermée et s'écrit sous la forme conservative suivante :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( - \frac{h^2(h+b)}{3\mu} \left[ \begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial x} \left( P_g - \frac{\partial}{\partial x} \left( \gamma g \frac{h_x}{(1+h_x^2)^{1/2}} \right) + \rho g_z h \right) \\ - \rho g_x - \frac{3\tau_i^x}{2h} \left( \frac{h + \frac{2}{3}b}{h+b} \right) \end{array} \right] \right) = 0 \quad (3.28)$$

Ce modèle permet à l'aide d'une seule équation différentielle de décrire la dynamique d'un film évoluant à faible nombre de Reynolds. De plus, les phénomènes capillaires (via la pression de Laplace) sont exactement modélisés. D'un point de vue continue, l'équation (3.28) semble donc être adaptée pour les applications visées. Cependant, on voit clairement que cette équation fait intervenir une dérivée du quatrième ordre en espace qui est difficile à discrétiser. Cette discrétisation sera d'autant plus compliquée sur des maillages non-structurés si nous cherchons à étendre le modèle en trois dimensions. Afin d'éviter ces difficultés numériques, il est nécessaire de réduire de plusieurs ordres en espace l'équation (3.28). Pour ce faire, nous allons la remplacer par un système d'équation équivalent de type Saint Venant.

### 3.2 Formulation équivalente de type Saint Venant

On propose dans cette section de remplacer l'équation de lubrification (3.28) par un système à deux équations de type Saint Venant. On considère que la vitesse moyenne dans le film n'est plus donnée par une expression analytique en fonction de l'épaisseur  $h$  du film, mais qu'elle est instationnaire et résolue par une équation de quantité de mouvement.

### 3.2.1 Equation de conservation de la quantité de mouvement

La démarche pour obtenir un bilan intégral de quantité de mouvement est similaire à celle pour obtenir le champ de vitesse analytique (3.26a) à la section 3.1.4. En effet, les équations de conservation de la quantité de mouvement de N-S vont également être simplifiées par analyse dimensionnelle. Cependant, nous allons utiliser moins d'hypothèses afin d'obtenir une équation différentielle vérifiée par le champs de vitesse  $u(x, z, t)$  plus générale.

#### Simplification des équations de N-S

On rappelle les équations de conservation de la quantité de mouvement de N-S dans le plan  $(x, z)$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + g^x + \nu \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) \quad (3.29a)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} + g^z + \nu \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) \quad (3.29b)$$

Sous les hypothèses d'écoulement quasi parallèle (3.5) et d'onde longue (3.4), on peut considérer que :

$$\left| \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right| \ll \left| \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right|, \quad \left| \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \right| \ll \left| \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right| \quad (3.30)$$

En supposant également que le champ de pression  $P(x, z)$  est donné par l'expression (3.26b), le système (3.29) prend la forme simplifiée suivante :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + g^x + \nu \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \quad (3.31a)$$

$$P(x, z) = P_g - \gamma l g \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{h_x}{(1 + h_x^2)^{1/2}} \right) + \rho g^z [h - z] \quad (3.31b)$$

Enfin, en utilisant l'équation (3.20a) de conservation de la masse, l'équation (3.31a) peut s'écrire sous forme conservative

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(u u)}{\partial x} + \frac{\partial(u v)}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g^x + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \quad (3.32)$$

#### Intégration sur la hauteur du film

En intégrant l'équation de quantité de mouvement (3.32) sur la hauteur du film dans la direction  $z$ , on obtient :

$$\rho \int_0^h \left( \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial(u u)}{\partial x} + \frac{\partial(u v)}{\partial z} \right) dz = \int_0^h \left( -\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g^x + \mu \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) dz \quad (3.33)$$

En appliquant la règle de Leibniz sous le signe d'intégration, il vient :

$$\begin{aligned} & \rho \left[ \frac{\partial}{\partial t} \left( \overbrace{\int_0^h u \, dz}^{= h\bar{u}} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \overbrace{\int_0^h u^2 \, dz}^{= h\bar{u}^2} \right) \right] + \rho u(z=h) \left[ -\frac{Dh}{Dt} + v(z=h) \right] \\ & = \rho g^x h - \int_0^h \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) dz + \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{(z=h)} - \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{(z=0)} \end{aligned} \quad (3.34)$$

En remarquant que le gradient de pression  $\left(\frac{\partial P}{\partial x}\right)$  est uniquement fonction de la coordonnée  $x$ , on a :

$$\int_0^h \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) dz = h \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) \quad (3.35)$$

Et en utilisant l'équation de continuité des vitesses (3.18), on obtient l'équation provisoire suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h \bar{u}) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho h \bar{u}^2) = \begin{bmatrix} -h \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \rho g^x h \\ + \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{(z=h)} - \mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{(z=0)} \end{bmatrix} \quad (3.36)$$

### Continuité des contraintes tangentielles à l'interface liquide/gaz

En effectuant un bilan de quantité de mouvement à l'interface *liquide/gaz*, on peut écrire [11] :

$$\begin{aligned} & \rho \left( \frac{Dh}{Dt} - v(z=h) \right) u(z=h) - \rho_g \left( \frac{Dh}{Dt} - v_g(z=h) \right) u_g(z=h) \\ & + \mu \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{(z=h)} + \left( \frac{\partial v}{\partial x} \right)_{(z=h)} \right] - \mu_g \left[ \left( \frac{\partial u_g}{\partial z} \right)_{(z=h)} + \left( \frac{\partial v_g}{\partial x} \right)_{(z=h)} \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.37)$$

En se servant du résultat (3.16) et de l'hypothèse onde longue ( $\partial/\partial x \ll \partial/\partial z$ ), on obtient :

$$\mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{(z=h)} = \mu_g \left( \frac{\partial u_g}{\partial z} \right)_{(z=h)} \quad (3.38)$$

appelée dans la littérature "équation de continuité des contraintes".

### Bilan intégral de quantité de mouvement

La forme finale de l'équation intégrale de conservation de la quantité de mouvement s'obtient en injectant l'expression (3.31b) du champ de pression et la relation de continuité (3.38) dans le bilan (3.36). Le nouveau système d'équation de type Saint Venant s'écrit finalement :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \quad (3.39a)$$

$$\frac{\partial (\rho q)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho h \bar{u}^2) = -h \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \rho g^x h + \underbrace{\mu_g \left( \frac{\partial u_g}{\partial z} \right)_{(z=h)}}_{= \tau_i^x} - \underbrace{\mu \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)_{(z=0)}}_{= \tau_w^x} \quad (3.39b)$$

avec  $\rho q = \rho h \bar{u}$  le débit massique linéique (en  $kg.s^{-1}.m^{-1}$ ),  $\tau_i^x$  la contrainte de cisaillement de la couche limite gazeuse (en  $N.m^{-2}$ ) et  $\tau_w^x$  la contrainte visqueuse du fluide sur la paroi solide (également en  $N.m^{-2}$ ).

### Modèle de fermeture

Le nouveau système d'équation (3.39) de type Saint Venant admet actuellement deux inconnues de trop qui sont la moyenne du carré de la vitesse  $\overline{u^2}$  et le frottement pariétal  $\tau_w^x$ . Afin de fermer le système, il faut exprimer ces inconnues en fonction de l'épaisseur  $h$  et du débit volumique par unité de longueur  $q$ . On suppose que le champ de vitesse  $u$  et sa moyenne  $\bar{u}$  sont donnés par :

$$u(x, z) = u^{Poiseuille} = \frac{1}{\mu} \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \rho g^x \right] \left( \frac{z^2}{2} - h(z + b/3) \right) + \frac{\tau_i^x}{\mu} (z + b/3) \quad (3.40a)$$

$$\bar{u}(x) = \bar{u}^{Poiseuille} = -\frac{h(h+b)}{3\mu} \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) - \rho g^x - \frac{3\tau_i^x}{2h} \left( \frac{h + \frac{2}{3}b}{h+b} \right) \right] \quad (3.40b)$$

correspondant au profil de Poiseuille obtenu à la section 3.1.4 par résolution des équations de Navier-Stokes dans nos hypothèses d'étude. Le frottement pariétal  $\tau_w^x$  admet donc comme expression analytique :

$$\tau_w^x = \frac{3}{2} \frac{\mu \bar{u}}{h+b} - \frac{\tau_i^x}{2} \left( \frac{h}{h+b} \right) \quad (3.41)$$

Concernant le terme cinétique  $\overline{u^2}$ , on utilise la relation de fermeture suivante :

$$\overline{u^2} = \bar{u} \bar{u} = \frac{q^2}{h^2} \quad (3.42)$$

qui bien que fautive dans le cas d'un profil de Poiseuille est, comme on le verra plus loin, sans conséquence sur la validité du modèle (3.39) dans le cadre des hypothèses (3.1a) et (3.4). Le modèle de type Saint Venant proposé dans ce travail s'écrit finalement :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \quad (3.43a)$$

$$\frac{\partial(\rho q)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho \frac{q^2}{h^2} \right) = -h \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \rho g^x h - \frac{3}{2} \frac{\mu q}{h(h+b)} + \frac{3\tau_i^x}{2} - \frac{\tau_i^x}{2} \left( \frac{b}{h+b} \right) \quad (3.43b)$$

Ce système à deux équations est mieux adapté pour une discrétisation numérique car il est uniquement du troisième ordre en espace. Il est également plus général que l'équation de lubrification car il prend en compte les effets inertiels. Dans l'hypothèse d'un écoulement de Poiseuille, le terme d'inertie a pour expression exacte  $\overline{u^2} = 6q^2/5h^2$  qui est différente de l'expression (3.42) choisie. Cependant, nous allons démontrer à la section suivante que le système de Saint Venant (3.43) est formellement équivalent à l'équation de lubrification. Par conséquent, il n'est pas nécessaire d'exprimer exactement le terme d'inertie puisque la dynamique est dominée par les effets visqueux.

### 3.2.2 Equivalence avec l'équation de lubrification

Le membre gauche du bilan intégral de quantité de mouvement (3.43b) peut s'écrire sous la forme non-conservative suivante :

$$\frac{\partial(\rho q)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho \frac{q^2}{h^2} \right) = \rho h \left[ \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right] + \rho \bar{u} \underbrace{\left[ \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} \right]}_{= (3.43a) = 0} = \rho h \frac{D\bar{u}}{Dt} \quad (3.44)$$

avec par définition  $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial}{\partial x}$ . Le membre droite peut également s'écrire sous la forme condensée suivante :

$$-h \left( \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \rho g^x h - \frac{3\mu q}{h(h+b)} + \frac{3\tau_i^x}{2} - \frac{\tau_i^x}{2} \left( \frac{b}{h+b} \right) = \frac{3\mu}{h+b} \left( \bar{u}^{Poiseuille} - \bar{u}(t) \right) \quad (3.45)$$

avec  $\bar{u}^{Poiseuille}$  l'expression analytique (3.40b) de la vitesse moyenne de l'écoulement de Poiseuille utilisée pour fermer l'équation de lubrification (3.28). Le bilan intégral (3.43b) se re-écrit finalement :

$$\frac{D\bar{u}}{Dt} = - \frac{\bar{u}(t) - \bar{u}^{Poiseuille}}{T_\nu} \quad (3.46)$$

où  $T_\nu = \rho h(h+b)/3\mu$  désigne une échelle de temps. La résolution de l'équation différentielle (3.46) est simple et donne comme solution :

$$\bar{u}(t) = \bar{u}^{Poiseuille} + \left[ \bar{u}(t=0) - \bar{u}^{Poiseuille} \right] e^{-t/T_\nu} \quad (3.47)$$

Dans nos applications visant à étudier la dynamique du mouillage d'un film liquide caractérisé par une épaisseur  $h_o$ , une vitesse moyenne  $u_o$  et un étalement longitudinal  $L_o$ , nous ne nous intéressons qu'à étudier les variations du champ de vitesse aux échelles de temps  $T_{obs} = L_o/u_o$  d'étalement du film. Dans l'hypothèse d'un écoulement à ondes longues et à petit nombre de Reynolds, la comparaison des deux échelles de temps  $T_{obs}$  et  $T_\nu$  vaut :

$$\frac{T_{obs}}{T_\nu} = \frac{3\mu L_o}{\rho h_o^2 u_o} = 3 \left( \frac{L_o}{h_o} \right) \left( \frac{\mu}{\rho h_o u_o} \right) = 3 \left( \frac{1}{h_o/L_o} \right) \left( \frac{1}{Re} \right) = O \left( \frac{1}{\varepsilon} \right) \gg 1 \quad (3.48)$$

Par conséquent, le système de Saint Venant (3.43) s'écrit aux échelles de temps  $T_{obs}$  d'étalement du film liquide

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(h\bar{u})}{\partial x} = 0 \quad (3.49a)$$

$$\bar{u}(t = T_{obs}) = \bar{u}^{Poiseuille} + \left[ \bar{u}(t=0) - \bar{u}^{Poiseuille} \right] \underbrace{e^{-T_{obs}/T_\nu}}_{\rightarrow 0} = \bar{u}^{Poiseuille} \quad (3.49b)$$

qui est strictement équivalent à l'équation de lubrification (3.28) et qui justifie les fermetures (3.41) et (3.42) du frottement pariétal et du terme d'inertie.

### 3.2.3 Système augmenté

Le système de Saint Venant (3.43) nécessite toujours le calcul d'une dérivée du troisième ordre en espace qui est difficile à discrétiser. Une solution consiste à s'inspirer des travaux de Noble et Vila [12] et introduire une nouvelle variable  $p = (\partial h / \partial x)$ . Elle sera considérée

comme une inconnue et sera calculée indépendamment avec une nouvelle équation. Cette équation s'obtient en dérivant spatialement le bilan intégral de masse (3.43a) et s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial h}{\partial t} \right] &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial q}{\partial x} \right] \\ \implies \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial h}{\partial t} \right] &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( h \frac{q}{h} \right) \right] \\ \implies \frac{\partial h_x}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{q}{h} h_x \right] &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[ h \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{q}{h} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.50)$$

En posant  $p = h_x$ , et en ajoutant (3.50) au système de Saint Venant (3.43), on obtient le système à trois équations suivant :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\bar{u} h] = 0 \quad (3.51a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\bar{u} p] = -\frac{\partial}{\partial x} \left[ h \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right] \quad (3.51b)$$

$$\frac{\partial (\rho q)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\bar{u} \rho q] + h \left( \frac{\partial P^*}{\partial x} \right) = \mathcal{S}(x) \quad (3.51c)$$

avec  $P^*(x, z) = P(x, z) - P_g$  la pression dans le film et  $\mathcal{S}(x)$  la somme des termes sources, donnés respectivement par :

$$P^*(x, z) = \rho g^z [h - z] - \gamma_{lg} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{p}{(1 + p^2)^{1/2}} \right] \quad (3.52a)$$

$$\mathcal{S}(x) = h \left[ \rho g^x - \frac{\partial P_g}{\partial x} \right] - \frac{3\mu q}{h(h+b)} + \frac{3\tau_i^x}{2} - \frac{\tau_i^x}{2} \left( \frac{b}{h+b} \right) \quad (3.52b)$$

Ce système est uniquement du second ordre en espace et les inconnues sont l'épaisseur  $h(x, t)$  du film, la pente locale  $p(x, t)$  de l'interface *liquide/gaz* et le débit massique linéique  $\rho q(x, t)$ .

### 3.2.4 Définition de la densité surfacique d'énergie d'un film

On considère une tranche infinitésimale de film liquide 2D positionnée à l'abscisse  $x$ , de largeur  $dx$ , d'épaisseur  $h(x)$  et de vitesse moyenne  $\bar{u}(x)$ . La configuration est schématisée sur la figure 3.3.

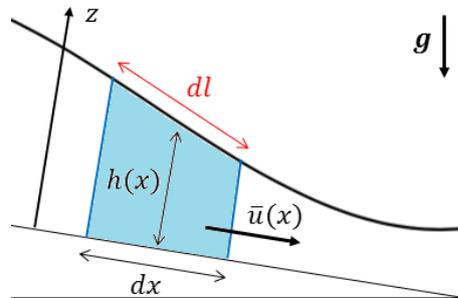


FIGURE 3.3 – Représentation d'une tranche infinitésimale de film 2D s'écoulant sur un plan incliné.

Nous avons vu à la section 1.2.1 que l'énergie linéique capillaire (en  $J.m^{-1}$ ) d'une interface 2D de longueur  $L$  entre deux phases non-miscibles  $A$  et  $B$  est égale à  $\gamma_{AB} L$ . On en déduit que l'énergie linéique capillaire de la tranche de film étudiée est égale à :

$$E_{capi} = \gamma_{sl} dx + \gamma_{lg} dl \quad (3.53)$$

avec  $dx$  l'élément de longueur de l'interface *solide/liquide* et  $dl$  celui de l'interface *liquide/gaz*. En remarquant que la largeur  $dx$  de la tranche correspond à la projection de la longueur élémentaire  $dl$  sur le substrat, et sachant que l'interface a une pente locale égale à  $h_x$ , l'énergie linéique capillaire peut s'écrire :

$$E_{capi} = \gamma_{sl} dx + \gamma_{lg} dx \sqrt{1 + h_x^2} \quad (3.54)$$

La tranche de fluide se caractérise également par une énergie linéique cinétique et une énergie linéique potentielle de pesanteur qui ont respectivement pour expression :

$$E_{cin} = \frac{\rho h \bar{u}^2}{2} dx = \frac{1}{2\rho} \frac{(\rho q)^2}{h} dx \quad (3.55a)$$

$$E_{grav} = \frac{\rho g^z h^2}{2} dx \quad (3.55b)$$

L'énergie linéique totale de la tranche de fluide s'exprime donc en fonction des variables de notre système  $h$ ,  $p$  et  $\rho q$  par :

$$E_{film}(h, p, \rho q) = \underbrace{\left[ \underbrace{\frac{1}{2\rho} \frac{(\rho q)^2}{h}}_{= e_{cin}} + \underbrace{\frac{\rho g^z h^2}{2}}_{= e_{grav}} + \underbrace{\gamma_{sl} + \gamma_{lg} \sqrt{1 + p^2}}_{= e_{capi}} \right]}_{= e_{film}} dx \quad (3.56)$$

avec  $e_{film} = E_{film}/dx$  la densité surfacique d'énergie totale du film composée d'une densité surfacique d'énergie cinétique  $e_{cin}$ , potentielle de pesanteur  $e_{grav}$ , et capillaire  $e_{capi}$ .

### Remarque 6

L'énergie  $E_{film}$  étant définie à une constante additive près, on peut éventuellement retirer le terme constant  $\gamma_{sl}$  de la définition. Il est laissé volontairement afin de préparer la généralisation de (3.56) au cas d'un substrat partiellement mouillant.

### 3.2.5 Mise sous forme conservative du bilan de quantité de mouvement

Afin de pouvoir discrétiser le système de Saint Venant avec des méthodes de type Volume Finis (mieux adaptées aux maillages non-structurés pour l'extension 3D), il est intéressant d'écrire le bilan de quantité de mouvement (3.51c) sous forme conservative. Ainsi, nous cherchons l'expression de la force linéique (en  $N.m^{-1}$ ), notée  $\mathcal{F}(x)$ , qui vérifie :

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial x} = h \left( \frac{\partial P^*}{\partial x} \right) \quad (3.57)$$

avec  $P^*(x, z)$  la pression dans le liquide dont on rappelle l'expression :

$$P^*(x, z) = \underbrace{\rho g^z [h - z]}_{= P_{grav}} + \underbrace{\gamma_{lg} \frac{\partial}{\partial x} \left[ -\frac{p}{(1 + p^2)^{1/2}} \right]}_{= P_{capi}} \quad (3.58)$$

que l'on peut décomposer en une pression hydrostatique  $P_{grav}$  et un saut de pression de Laplace  $P_{capi}$ . En utilisant les expressions des densités surfaciques d'énergies potentielles de pesanteur  $e_{grav}$  et capillaires  $e_{capi}$  introduites à la section 3.2.4, on peut démontrer que :

$$\begin{aligned}
 h \left( \frac{\partial P_{grav}}{\partial x} \right) &= h \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial e_{grav}}{\partial h} \right) \\
 &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ h \left( \frac{\partial e_{grav}}{\partial h} \right) \right] - \underbrace{\left( \frac{\partial e_{grav}}{\partial h} \right) \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)}_{= \left( \frac{\partial e_{grav}}{\partial x} \right)} \\
 &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ h \left( \frac{\partial e_{grav}}{\partial h} \right) - e_{grav} \right]
 \end{aligned} \tag{3.59}$$

et également que :

$$\begin{aligned}
 h \left( \frac{\partial P_{capi}}{\partial x} \right) &= h \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( -\frac{\partial e_{capi}}{\partial p} \right) \right] \\
 &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[ h \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial e_{capi}}{\partial p} \right) \right] + \overbrace{\left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)}^{= p} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial e_{capi}}{\partial p} \right) \\
 &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[ h \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial e_{capi}}{\partial p} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ p \left( \frac{\partial e_{capi}}{\partial p} \right) \right] - \underbrace{\left( \frac{\partial e_{capi}}{\partial p} \right) \left( \frac{\partial p}{\partial x} \right)}_{= \left( \frac{\partial e_{capi}}{\partial x} \right)} \\
 &= -\frac{\partial}{\partial x} \left[ h \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial e_{capi}}{\partial p} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ p \left( \frac{\partial e_{capi}}{\partial p} \right) - e_{capi} \right]
 \end{aligned} \tag{3.60}$$

La force linéique parallèle au substrat  $\mathcal{F}(x)$  résultante du gradient de pression dans le liquide s'écrit donc :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}(x) &= \left[ h \left( \frac{\partial e_{grav}}{\partial h} \right) - e_{grav} \right] + \left[ p \left( \frac{\partial e_{capi}}{\partial p} \right) - e_{capi} \right] - \left[ h \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial e_{capi}}{\partial p} \right) \right] \\
 &= \rho g^z \frac{h^2}{2} - \gamma_{sl} - \frac{\gamma_{lg}}{\sqrt{1+p^2}} - \underbrace{\gamma_{lg} h \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{p}{\sqrt{1+p^2}} \right)}_{= -K^{xz}}
 \end{aligned} \tag{3.61}$$

Cette force linéique peut s'interpréter de manière physique. Le premier terme est la force de pression hydrostatique, le second est la tension de surface parallèle à l'interface *solide/liquide*, le troisième est la tension de surface parallèle à l'interface *liquide/gaz* projetée sur le substrat (direction  $x$ ), et le dernier terme correspond à la force induite par le saut de pression de Laplace. En introduisant la variable conservative  $\mathbf{U} = {}^t(h, p, \rho q)$ , le système (3.51) peut s'écrire sous la forme vectorielle conservative suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u} \mathbf{U})}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathcal{F}(x) \end{pmatrix} = \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} 0 \\ -h \left( \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathcal{S}(x) \end{pmatrix} \tag{3.62}$$

**Remarque 7**

L'expression (3.61) qui relie la force linéique  $\mathcal{F}(x)$  aux densités surfacique d'énergie du film liquide n'est en réalité qu'une version simplifiée d'une expression plus générale. En remarquant que la densité d'énergie cinétique  $e_{cin}$  du liquide vérifie

$$h \left( \frac{\partial e_{cin}}{\partial h} \right) + \rho q \left( \frac{\partial e_{cin}}{\partial \rho q} \right) - e_{cin} = 0 \quad (3.63)$$

et que les autres densités d'énergies du film vérifient :

$$\left( \frac{\partial e_{grav}}{\partial p} \right) = \left( \frac{\partial e_{grav}}{\partial \rho q} \right) = 0, \quad \left( \frac{\partial e_{capi}}{\partial h} \right) = \left( \frac{\partial e_{capi}}{\partial \rho q} \right) = 0 \quad (3.64)$$

On peut montrer que la force linéique  $\mathcal{F}(x)$  admet comme expression générale :

$$\mathcal{F}(x) = \underbrace{\left[ h \left( \frac{\partial e_{film}}{\partial h} \right) + p \left( \frac{\partial e_{film}}{\partial p} \right) + \rho q \left( \frac{\partial e_{film}}{\partial \rho q} \right) - e_{film} \right]}_{= \mathcal{L}(e_{film})} - \left[ h \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial e_{film}}{\partial p} \right) \right] \quad (3.65)$$

avec  $\mathcal{L}(e_{film})$  appelée dans la littérature [15] la transformée de Legendre de la densité surfacique d'énergie  $e_{film}$  totale du film.

**Remarque 8**

Soit  $e(x)$  la densité surfacique d'énergie associée à une force de pression quelconque agissante sur le film liquide. En se plaçant dans le cas particulier d'une densité surfacique d'énergie uniquement fonction de l'épaisseur  $h$  du film, on vient de montrer à la remarque précédente que si on connaît une expression analytique de cette densité surfacique d'énergie en fonction de la variable conservative  $h$  du système (3.62), alors la force linéique  $\mathcal{F}_e(x)$  et la pression  $P_e(x)$  équivalentes qui s'exercent localement au point  $x$  valent :

$$\mathcal{F}_e(x) = h \left( \frac{\partial e}{\partial h} \right) - e(x) \quad (3.66a)$$

$$P_e(x) = \frac{\partial e}{\partial h} \quad (3.66b)$$

### 3.3 Equation d'énergie associée

Nous souhaitons maintenant prouver que le système augmenté de Saint Venant (3.62) est consistant thermodynamiquement, i.e. montrer qu'il est associé à une grandeur  $\Phi$  qui vérifie :

$$\frac{d\Phi}{dt} \leq 0 \quad (3.67)$$

Nous allons montrer que cette grandeur correspond, en l'absence de forces extérieures motrices, à l'énergie linéique totale du film donnée par :

$$E_{film} = \int_{\Omega} e_{film}(x) dx \quad (3.68)$$

où  $e_{film}$  désigne la densité surfacique d'énergie du film définie à la section 3.2.4 et  $\Omega$  le domaine spatial physique. Dans la littérature mathématique, la grandeur  $\Phi$  est appelée "entropie mathématique" associée au système de lois de conservation, par extension de la notion physique d'entropie. Ici, le fluide est implicitement considéré comme isotherme car la température n'intervient pas dans le modèle et les échanges entre énergie mécanique et énergie interne ne sont pas considérés. Ainsi, du point de vue de la caractérisation des phénomènes irréversibles, l'énergie linéique totale  $E_{film}$  est équivalente à l'énergie libre  $F$  d'un système thermodynamique définie dans la littérature par

$$F = U + E_c + E_p - TS \quad (3.69)$$

avec  $U$  l'énergie interne du système,  $E_c$  son énergie cinétique,  $T$  sa température,  $S$  son entropie, et  $E_p$  l'énergie potentielle associée au travail des forces extérieures conservatives. La variation d'énergie libre du système vaut donc à  $T$  fixée :

$$dF = dU + dE_c + dE_p - TdS \quad (3.70)$$

Selon le premier principe de la thermodynamique, on a :

$$dU + dE_c + dE_p = \delta W + \delta Q \quad (3.71)$$

avec  $\delta Q$  la chaleur échangée par le système avec l'extérieur et  $\delta W$  le travail des forces extérieures non-conservatives. Il vient

$$dF = \delta W + \delta Q - TdS \quad (3.72)$$

Selon le second principe de la thermodynamique, une transformation irréversible vérifie :

$$dS \geq \frac{\delta Q}{T} \implies \delta Q - TdS \leq 0 \quad (3.73)$$

La variation d'énergie libre  $F$  d'un système isotherme vaut donc

$$dF \leq \delta W \quad (3.74)$$

Ainsi, en l'absence de travail de forces extérieures ( $\delta W = 0$ ), on a

$$dF \leq 0 \quad (3.75)$$

Ainsi, selon les deux premiers principes de la thermodynamique, l'énergie libre totale  $F$  de tout système thermodynamique isotherme est décroissante au cours d'une transformation irréversible en l'absence de forces extérieures. L'énergie libre totale  $F$  joue donc le même rôle que l'entropie mathématique  $\Phi$ . Nous allons vérifier que l'énergie linéique totale  $E_{film}$  associée au système de Saint Venant (3.62) vérifie également (3.75).

### 3.3.1 Réécriture du système à l'aide des variables "entropiques"

Nous avons vu à la section 3.2.3 que la résultante des forces linéiques  $\mathcal{F}(x)$  du bilan de quantité de mouvement peut s'écrire en fonction de la densité surfacique d'énergie  $e_{film}(x)$  du film

$$\mathcal{F}(x) = \mathcal{L}(e_{film}) - h \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial e_{film}}{\partial p} \right) \quad (3.76)$$

Le système augmenté de Saint Venant peut donc s'écrire :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u} \mathbf{U})}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathcal{L}(e_{film}) \end{pmatrix} = \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} 0 \\ -h \left[ \frac{\partial}{\partial x} (\bar{u}) \right] \\ h \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial e_{film}}{\partial p} \right) \right] \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathcal{S}(x) \end{pmatrix} \quad (3.77)$$

On introduit la variable thermodynamique  $\varphi$  conjuguée à la variable conservative  $\mathbf{U} = {}^t(h, p, \rho q)$  qui vaut

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi^h \\ \varphi^p \\ \varphi^{\rho q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial e_{film} / \partial h \\ \partial e_{film} / \partial p \\ \partial e_{film} / \partial \rho q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho g^z h - \frac{\rho \bar{u}^2}{2} \\ \gamma l g \frac{p}{\sqrt{1+p^2}} \\ \bar{u} \end{pmatrix} \quad (3.78)$$

La transformée de Legendre s'écrit alors

$$\mathcal{L}(e_{film}) = \{\varphi \mid \mathbf{U}\} - e_{film} \quad (3.79)$$

avec  $\{\cdot \mid \cdot\}$  un produit scalaire dans  $\mathbb{R}^n$ , et le système de Saint Venant est finalement équivalent à :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u} \mathbf{U})}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \{\varphi \mid \mathbf{U}\} - e_{film} \end{pmatrix} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -h \\ 0 & h & 0 \end{pmatrix}}_{=\underline{\underline{A}}} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathcal{S}(x) \end{pmatrix} \quad (3.80)$$

avec  $\underline{\underline{A}}$  une matrice antisymétrique.

### 3.3.2 Equation de conservation de l'énergie

En calculant le produit scalaire du système de Saint Venant (3.80) avec la variable conjuguée  $\varphi$ , on obtient :

$$\begin{aligned} \left\{ \varphi \mid \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right\} &= - \left\{ \varphi \mid \frac{\partial (\bar{u} \mathbf{U})}{\partial x} \right\} - \varphi_q \frac{\partial (\{\varphi \mid \mathbf{U}\} - e_{film})}{\partial x} \\ &+ \left\{ \varphi \mid \frac{\partial}{\partial x} \left( \underline{\underline{A}} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right\} + [\varphi_q \mathcal{S}(x)] \end{aligned} \quad (3.81)$$

La propriété d'antisymétrie de la matrice  $\underline{\underline{A}}$  permet d'obtenir :

$$\left\{ \varphi \mid \frac{\partial}{\partial x} \left( \underline{\underline{A}} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right\} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \varphi \mid \left( \underline{\underline{A}} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right\} - \underbrace{\left\{ \frac{\partial \varphi}{\partial x} \mid \left( \underline{\underline{A}} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right\}}_{=0} \quad (3.82)$$

par antisymétrie de  $\underline{\underline{A}}$

Et en utilisant les relations suivantes :

$$\left\{ \varphi \left| \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right. \right\} = \frac{\partial e_{film}}{\partial t}, \quad \left\{ \varphi \left| \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right. \right\} = \frac{\partial e_{film}}{\partial x}, \quad \varphi_q = \bar{u} \quad (3.83)$$

On établie finalement le bilan d'énergie suivant :

$$\frac{\partial e_{film}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [\bar{u} (e_{film} + \mathcal{L}(e_{film}))] = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \varphi \left| \left( \underline{A} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right. \right\} + [\bar{u} \mathcal{S}(x)] \quad (3.84)$$

qui correspond à une équation différentielle sous forme conservative avec des termes sources. En intégrant cette équation sur l'ensemble du domaine physique  $\Omega$ , et en supposant des conditions aux limites périodiques aux bords du domaine, on obtient

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \frac{\partial e_{film}}{\partial t} dx + \overbrace{\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} [\bar{u} (e_{film} + \mathcal{L}(e_{film}))] dx}^{\substack{\text{car C.L. périodiques} \\ = 0}} \\ &= \underbrace{\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \varphi \left| \left( \underline{A} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right. \right\} dx}_{= 0} + \int_{\Omega} [\bar{u} \mathcal{S}(x)] dx \\ & \quad \text{car C.L. périodiques} \end{aligned} \quad (3.85)$$

Et en utilisant la relation

$$\int_{\Omega} \frac{\partial e_{film}}{\partial t} dx = \frac{\partial}{\partial t} \left( \int_{\Omega} e_{film}(x, t) dx \right) = \frac{dE_{film}}{dt} \quad (3.86)$$

La variation temporelle de l'énergie linéique totale du film s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{dE_{film}}{dt} &= \int_{\Omega} [\bar{u} \mathcal{S}(x)] dx \\ &= \underbrace{\int_{\Omega} \bar{u} \left[ h \left( \rho g^x - \frac{\partial P_g}{\partial x} \right) + \frac{3\tau_i^x}{2} - \frac{\tau_i^x}{2} \left( \frac{b}{h+b} \right) \right] dx}_{\dot{W}} + \underbrace{\int_{\Omega} \left[ -\frac{3\mu \bar{u}^2}{h+b} \right] dx}_{\dot{D} \leq 0} \end{aligned} \quad (3.87)$$

On en déduit que le taux de variation irréversible de l'énergie linéique  $E_{film}$  du système est égal à la somme des puissance des forces extérieures  $\dot{W}$  et des forces de viscosité  $\dot{D}$ . Les forces de viscosité étant dissipatives ( $\dot{D} \leq 0$ ), on a donc :

$$\frac{dE_{film}}{dt} \leq \dot{W} \quad (3.88)$$

En l'absence de forces extérieures motrices, soit dans le cas d'un plan horizontal ( $g^x = 0$ ) et en l'absence d'écoulement d'air ( $\frac{\partial P_g}{\partial x} = 0, \tau_i^x = 0$ ), on obtient

$$\frac{dE_{film}}{dt} \leq 0 \quad (3.89)$$

On vient donc de prouver que notre système (3.62) est consistant thermodynamiquement puisque les relations (3.88) et (3.89) sont respectivement équivalentes aux relations (3.74) et (3.75) données par les principes de la thermodynamique. L'énergie linéique totale  $E_{film}$  étant décroissante en fonction du temps, elle constitue une entropie mathématique du système continu au sens de Lax [82] pour le problème sans forces extérieures.

## 3.4 Prise en compte des phénomènes de mouillage

### 3.4.1 Présentation de la démarche

À ce stade, le système de Saint Venant proposé n'est pas encore capable de simuler la dynamique de démouillage d'un film. En effet, bien que l'ensemble des phénomènes gravitationnels, capillaires et visqueux soient pris en compte dans le modèle, nous avons négligé jusqu'à présent toute interaction entre les interfaces (*liquide/gaz*, *liquide/solide* et *solide/gaz*) lorsque l'épaisseur du film  $h$  tend vers 0. Ce sont ces interactions qui sont à l'origine du mouillage ou du démouillage d'un film liquide. La méthode la plus utilisée dans la littérature afin d'intégrer l'effet de ces interactions consiste à définir une nouvelle condition aux limites à l'interface *liquide/gaz* pour le champ de pression qui s'écrit :

$$P(x, z = h) = P_g(x) + \gamma_{lg} K^{xz}(x) + \Pi_d(h) \quad (3.90)$$

qui correspond à la condition aux limites (3.9) usuelle à laquelle on ajoute un saut de pression de disjonction  $\Pi_d(h)$  induit par les interactions entre les interfaces *solide/liquide* et *liquide/gaz* séparées par l'épaisseur  $h$  du film. La forme d'équilibre macroscopique de l'interface *liquide/gaz* au voisinage du point triple peut de retrouver en calibrant l'expression de  $\Pi_d(h)$  par la méthode de Dejarguin [37].

Dans le cadre de ce travail, l'intégration des effets de mouillage partiel se fait également via une pression de disjonction, on adopte cependant une méthode différente de celle de Dejarguin. Plutôt que de calibrer une pression de disjonction, on propose une méthode équivalente qui consiste à calibrer la densité d'énergie associée aux interactions moléculaires (ou densité d'énergie de disjonction) notée  $e_{disj}(h)$ . Cette méthode présente plusieurs avantages. D'une part, nous allons voir que travailler avec des énergies (plutôt qu'avec des pressions) peut s'expliquer de manière physique. D'autre part, nous avons vu à la remarque 8 que si nous trouvons l'expression de la densité d'énergie de disjonction  $e_{disj}(h)$ , la force linéique  $\mathcal{F}_d(h)$  et la pression  $\Pi_d(h)$  associées aux interactions moléculaires s'écrivent :

$$F^d(h) = h \left( \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right) - e_{disj}(h) \quad (3.91a)$$

$$\Pi^d(h) = \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \quad (3.91b)$$

On garantit également que le système de Saint Venant construit à partir de la densité surfacique d'énergie du film (intégrant celle des interactions moléculaires) donnée par

$$e_{film}(x, h, p, \rho q) = \frac{\rho}{2} h \bar{u}^2 + \frac{\rho}{2} g^z h^2 + \gamma_{sl} + \gamma_{lg} \sqrt{1 + p^2} + e_{disj}(h) \quad (3.92)$$

vérifie toujours le bilan d'énergie (3.84) démontré à la section 3.3.2.

### 3.4.2 Construction de la densité surfacique d'énergie de disjonction

#### Méthode de construction

Nous cherchons à déterminer l'expression  $e_{disj}(h)$  de la densité surfacique d'énergie de disjonction. Il existe plusieurs solutions qui dépendent du degré de précision avec lequel nous souhaitons modéliser l'interface *liquide/gaz* au voisinage du point triple. La première

approche consiste à rechercher une expression exacte jusqu'à des échelles moléculaires  $\mathfrak{R}$  de l'ordre du  $nm$  pour retrouver la forme exacte de l'interface. Cependant, pour capturer numériquement ces échelles, il faut utiliser un pas de maillage extrêmement fin ( $\Delta x \sim \mathfrak{R}$ ), très coûteux en temps de calcul.

La seconde approche, que nous avons adoptée, consiste à trouver une expression simplifiée de  $e_{disj}(h)$  qui permet de modéliser le comportement macroscopique d'un film partiellement mouillant au voisinage du point triple. Ainsi, nous souhaitons seulement retrouver une interface *liquide/gaz* qui forme un angle  $\theta_s$  avec le substrat à l'échelle macroscopique, comme représenté sur la figure 3.8. On fait toutefois l'hypothèse (qui sera vérifiée au chapitre 5) que l'interface rencontre le substrat sec avec une pente nulle, soit :

$$\lim_{h \rightarrow 0} p = \lim_{h \rightarrow 0} h_x = 0 \quad (3.93)$$

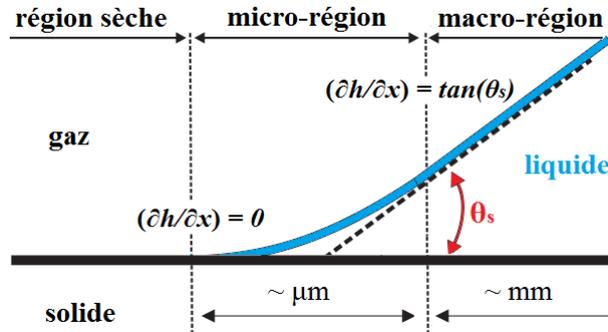


FIGURE 3.4 – Représentation de la ligne triple à différentes échelles d'un liquide partiellement mouillant dans l'hypothèse  $\lim_{h \rightarrow 0} h_x = 0$ .

On se place dans le cas d'un film liquide à l'équilibre sur un plan horizontal, le champ de vitesse en tout point  $x$  du film liquide est donc nul, et sa densité surfacique d'énergie est donnée par :

$$e_{film}(x) = \frac{\rho g h^2}{2} + \gamma_{sl} + \gamma_{lg} \sqrt{1 + p^2} + e_{disj}(h) \quad (3.94)$$

Pour que  $e_{disj}(h)$  modélise une situation de mouillage partiel, caractérisée par la présence de zones mouillées et de zones sèches, il faut qu'elle garantisse que la densité surfacique d'énergie du film  $e_{film}(h, h_x)$  soit égale à celle d'un substrat sec lorsque  $h = 0$  et soit égale à celle d'un substrat mouillé lorsque  $h$  est grand devant le rayon d'action moléculaire  $\mathfrak{R}$ . En s'appuyant sur la figure 3.5 qui décrit ces deux situations, il évident que dans le cas d'un substrat sec ( $h = 0$ ), la densité surfacique d'énergie du film est égale à

$$e_{film}(h = 0) = \gamma_{sg} \quad (3.95)$$

A partir de cette condition aux limites, on a :

$$\begin{aligned} e_{film}(x, h = 0, p \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0) &= \gamma_{sl} + \gamma_{lg} + e_{disj}(h = 0) = \gamma_{sg} \\ \implies e_{disj}(h = 0) &= \gamma_{sg} - \gamma_{sl} - \gamma_{lg} = S \end{aligned} \quad (3.96)$$

avec  $S$  le paramètre d'étalement introduit à la section 1.2.2 qui est lié à l'angle de contact statique  $\theta_s$  par :

$$S = \gamma_{lg} [\cos(\theta_s) - 1] \quad (3.97)$$

Dans le cas d'un substrat mouillé par une épaisseur de film grande devant le rayon d'action moléculaire ( $h \gg \mathfrak{R}$ ), les interfaces *solide/liquide* et *liquide/gaz* sont trop éloignées pour interagir. Il n'existe donc plus de densité surfacique d'énergie associée à l'interaction de ces deux interfaces, ce qui signifie :

$$e_{disj}(h \gg \mathfrak{R}) = 0 \quad (3.98)$$

Sachant que la pression de disjonction induite par les interactions moléculaires dérive par définition de la densité surfacique d'énergie via la relation (3.91a), on a :

$$e_{disj}(h = 0) - e_{disj}(h \gg \mathfrak{R}) = - \int_0^{+\infty} [\Pi_d(h)] dh = \gamma_{lg} [\cos(\theta_s) - 1] \quad (3.99)$$

qui correspond exactement à la relation augmentée de Youg-Dupré (2.48) obtenu par Dejarguin que nous avons introduite à la section 2.2.4 et qui prouve l'équivalence de notre raisonnement.

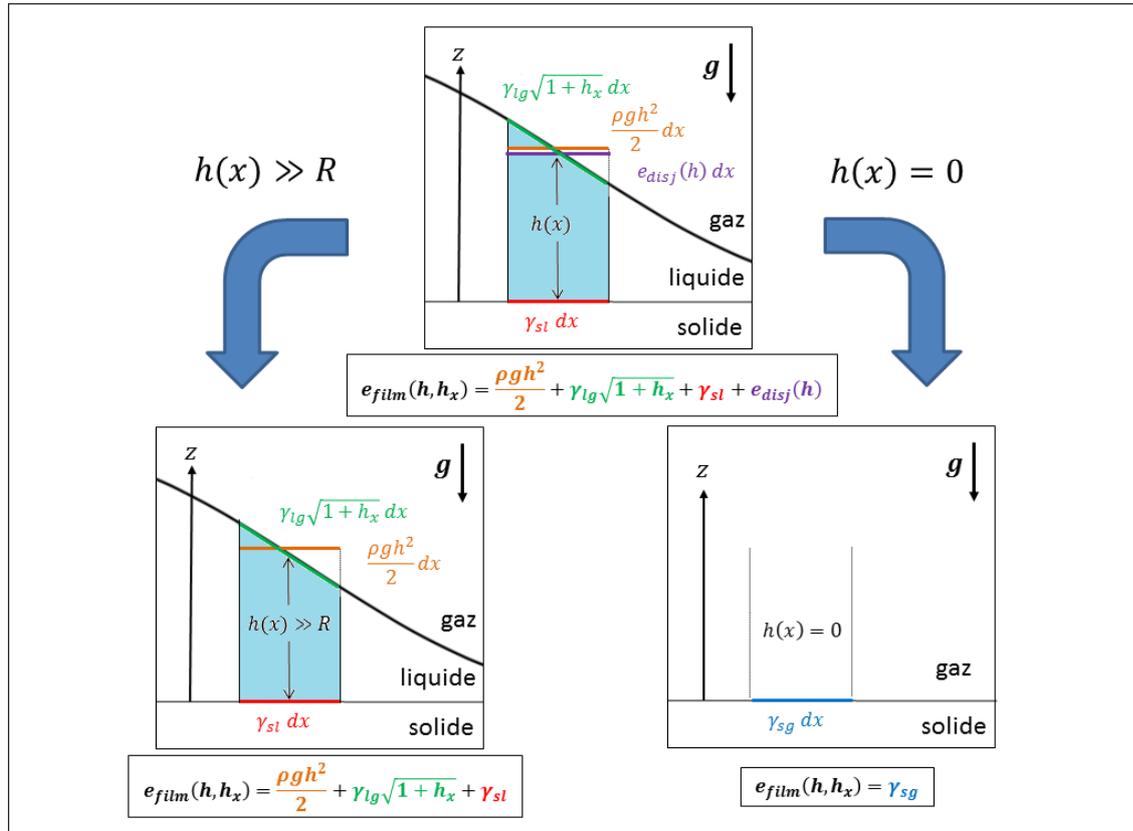


FIGURE 3.5 – Représentation schématique de l'évolution de la densité d'énergie libre d'une tranche infinitésimale de film liquide en fonction de son épaisseur  $h$ .

**Proposition d'un modèle de densité d'énergie de disjonction**

Ainsi, n'importe quelle expression de densité surfacique d'énergie de disjonction respectant les conditions aux limites (3.96) et (3.98) permet de modéliser une interface *liquide/gaz* qui forme un angle macroscopique  $\theta_s$  avec le substrat à l'équilibre. Pour cette raison, nous avons adopté une expression simple :

$$e_{disj}(h) = \gamma_{lg} [\cos(\theta_s) - 1] \exp(-h/h_*) \quad (3.100)$$

qui relie continument la densité surfacique d'énergie d'un substrat sec à celle d'un substrat mouillé entre une épaisseur de film comprise entre  $h = 0$  et  $h \approx 5h_*$ . Le modèle choisi possède donc deux paramètres réglables. Le premier est l'angle de contact statique  $\theta_s$  qui modifie la mouillabilité du liquide. Le deuxième est l'épaisseur  $h_*$  qui joue le rôle de rayon d'action des forces moléculaires, et dont le calibrage pour les applications numériques sera étudié au chapitre 5. Ce modèle induit d'après la relation (3.91a) une force linéique  $F^d(h)$  parallèle au substrat ou une pression  $\Pi^d(h)$  données par :

$$F^d(h) = h \left( \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right) - e_{disj}(h) = \gamma_{lg} [1 - \cos(\theta_s)] \left[ 1 + \frac{h}{h_*} \right] \exp(-h/h_*) \quad (3.101a)$$

$$\Pi^d(h) = \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} = \gamma_{lg} [1 - \cos(\theta_s)] \frac{\exp(-h/h_*)}{h_*} \quad (3.101b)$$

et qui sont tracées sur la figure 3.6.

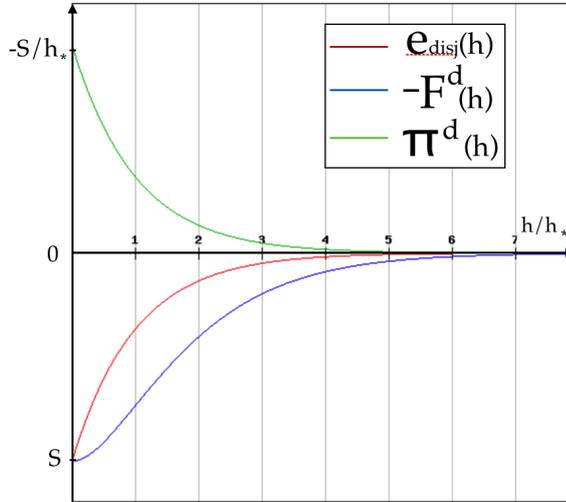


FIGURE 3.6 – Tracé de la densité d'énergie de disjonction  $e_{disj}(h)$ , de la force linéique  $F^d(h)$  et de la pression de disjonction  $\Pi^d(h)$ .

Le bilan de quantité de mouvement (3.51c) du système augmenté de Saint Venant s'écrit donc en tout point  $x$  :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho q)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\bar{u} \rho q) + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \rho g^z \frac{h^2}{2} + F^d(h) - \frac{\gamma_{lg}}{\sqrt{1+p^2}} - \gamma_{sl} \right] \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left[ -\gamma_{lg} h \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{p}{\sqrt{1+p^2}} \right) \right] + \mathcal{S}(x, h, \rho q) \end{aligned} \quad (3.102)$$

### Justification du modèle de densité d'énergie de disjonction

Le respect des conditions (3.96) et (3.98) garantit au modèle (3.100) de densité surfacique d'énergie de disjonction de représenter une situation de mouillage partiel statique. Nous souhaitons alors justifier qu'il est également valable pour une situation dynamique, c'est-à-dire que lorsqu'un film démouille (ou se rétracte) sur un substrat, il laisse derrière lui un vrai substrat sec et non un film résiduel d'épaisseur non-nulle. On se place au voisinage d'un point triple gauche, comme représenté sur la figure 3.8 où l'épaisseur du film croît en s'éloignant de ce point, on a alors  $\partial h / \partial x \geq 0$ . Si on calcul le gradient spatial de la force linéique associé aux interactions moléculaires, on a :

$$\frac{\partial F^d}{\partial x} = \left( \frac{\partial F^d}{\partial h} \right) \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial h} \left[ h \left( \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right) - e_{disj}(h) \right] \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right) = h \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right) \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right) \quad (3.103)$$

Le modèle (3.100) de densité d'énergie de disjonction que nous avons choisi est une fonction strictement concave de  $h$ , soit :

$$\left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right)_{(h=h_o)} = \frac{S}{(h_*)^2} \exp\left(-\frac{h_o}{h_*}\right) < 0 \quad (3.104)$$

car le paramètre d'étalement  $S$  est strictement négatif dans le cas d'un mouillage partiel. On en déduit que le gradient de force linéique vérifie

$$\forall x, \frac{\partial F^d}{\partial x} = h \underbrace{\left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right)}_{< 0} \underbrace{\left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)}_{\geq 0} \leq 0 \quad (3.105)$$

et est tracé sur la figure 3.7 dans le cas particulier d'un profil d'épaisseur en forme de dièdre au voisinage du point triple.

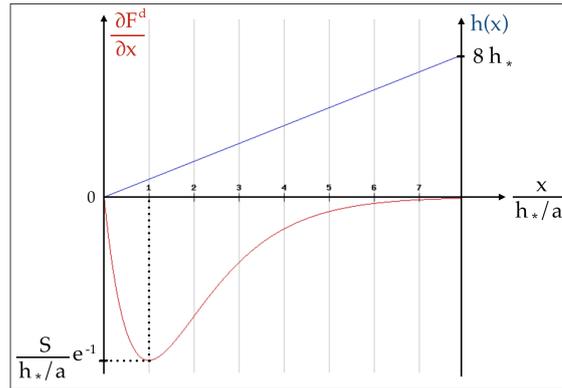


FIGURE 3.7 – Tracé du gradient de force linéique  $\partial F^d / \partial x$  au voisinage d'une ligne triple en forme de dièdre donnée par  $h(x) = a x$ .

Ainsi, la variation de quantité de mouvement induite uniquement par les forces moléculaires au voisinage du point triple est donnée d'après (3.102) par

$$\frac{\partial(\rho q)}{\partial t} = -\frac{\partial F^d}{\partial x} \geq 0 \quad (3.106)$$

Ce résultat prouve donc que pour n'importe quelle épaisseur de film au voisinage du point triple, le modèle proposé de densité d'énergie de disjonction génère une accélération positive (vers la droite sur la figure 3.8). Ainsi, toutes les épaisseurs de film se rétractent sans laisser de film résiduel. On en conclut que l'on modélise bien un mouillage partiel.

### 3.4.3 Vérification de la relation de Young-Dupré à l'échelle macroscopique pour un film statique

Nous vérifions que le modèle augmenté de Saint Venant (3.51), auquel nous avons intégré les effets du mouillage via la densité surfacique d'énergie de disjonction (3.100), permet bien de retrouver qu'une interface *liquide/gaz* forme avec le substrat un angle de contact statique  $\theta_s$  à l'équilibre. Soit  $\theta(x)$  l'angle que fait localement l'interface *liquide/gaz* avec le substrat, on souhaite vérifier que l'angle au niveau du point B sur la figure 3.8 vérifie  $\theta(x_B) = \theta_s$ .

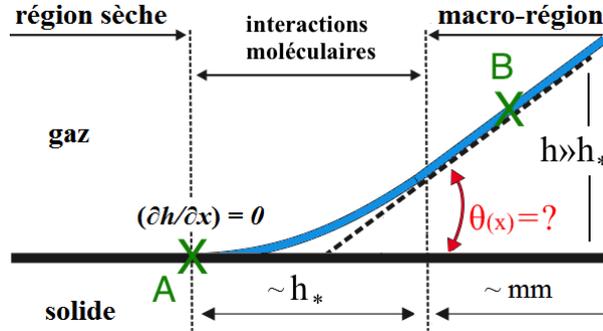


FIGURE 3.8 – Représentation d'un point à l'équilibre à différentes échelles.

On suppose que la pente de l'interface *liquide/gaz* est nulle au point A, soit

$$p(x_A) = h_x(x_A) = 0 \quad (3.107)$$

et uniforme au voisinage du point B, soit

$$K^{xz}(x_B) = 0 \quad (3.108)$$

A l'équilibre sur un plan horizontal, le bilan de quantité de mouvement (3.102) du système de Saint Venant s'écrit en tout point  $x$  :

$$\begin{aligned} & \overbrace{\frac{\partial(\rho q)}{\partial t}}^{=0} + \overbrace{\frac{\partial(\bar{u} \rho q)}{\partial x}}^{=0} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \rho g \frac{h^2}{2} + F^d(h) - \frac{\gamma_{lg}}{\sqrt{1+p^2}} - \gamma_{sl} \right] \\ & = \frac{\partial}{\partial x} [\gamma_{lg} h K^{xz}(x)] + \underbrace{\mathcal{S}(x, h, \rho q)}_{=0} \end{aligned} \quad (3.109)$$

On se place au voisinage du point triple où l'on suppose que l'épaisseur du film  $h$  est petite devant la longueur capillaire  $l_c$  du liquide. Les forces de pression hydrostatique sont donc négligeables devant les forces capillaires, et on a :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ F^d(h) - \frac{\gamma_{lg}}{\sqrt{1+p^2}} - \gamma_{sl} - \gamma_{lg} h K^{xz}(x) \right] = 0 \quad (3.110)$$

En exprimant l'angle  $\theta(x)$  en fonction de la pente locale  $p = h_x$  de l'interface par :

$$\cos [\theta(x)] = \frac{1}{\sqrt{1+p^2}} \quad (3.111a)$$

$$\tan [\theta(x)] = p \quad (3.111b)$$

Et en intégrant (3.110) entre le point triple  $A$  où l'épaisseur  $h$  du film est nulle ( $h = 0$ ), et le point  $B$  où l'épaisseur est grande devant le rayon d'action moléculaire ( $h \gg h_*$ ), on obtient :

$$\begin{aligned} \underbrace{\gamma_{lg} [1-\cos(\theta_s)]}_{=1} - \underbrace{\gamma_{lg} \cos [\theta(x_A)]}_{=1} - \gamma_{sl} - \underbrace{\gamma_{lg} h}_{=0} K^{xz}(x_A) \\ = \\ \underbrace{F^d(h \gg h_*)}_{=0} - \gamma_{lg} \cos [\theta(x_B)] - \gamma_{sl} - \underbrace{\gamma_{lg} h}_{=0} K^{xz}(x_B) \end{aligned} \quad (3.112)$$

Après simplification, il vient

$$\cos [\theta(x_B)] = \cos (\theta_s) \quad (3.113)$$

L'angle  $\theta(x_B)$  étant compris entre  $0^\circ$  et  $90^\circ$ , on obtient  $\theta(x) = \theta_s$ . Ce résultat confirme bien que l'interface forme un angle  $\theta_s$  avec le substrat au voisinage du point triple.

### 3.4.4 Vérification du bon comportement du modèle pour des situations de mouillage dynamique

Nous avons vu à la section 2.2.5 que l'angle formé par l'interface *liquide/gaz* avec le substrat au voisinage du point triple varie dynamiquement lorsque le film mouille ou démouille. Cet angle dynamique, noté  $\theta_d$ , est égal à l'angle de contact statique  $\theta_s$  à l'équilibre, i.e. lorsque la vitesse  $V_{CP}$  du point triple est nulle. Dans le cas d'un démouillage où le point triple recule ( $V_{CP} < 0$ ), on constate expérimentalement que  $\theta_d < \theta_s$ . Dans le cas d'un mouillage où le point triple avance ( $V_{CP} > 0$ ), on observe inversement que  $\theta_d > \theta_s$ . Cette dernière situation est schématisée sur la figure 3.9.

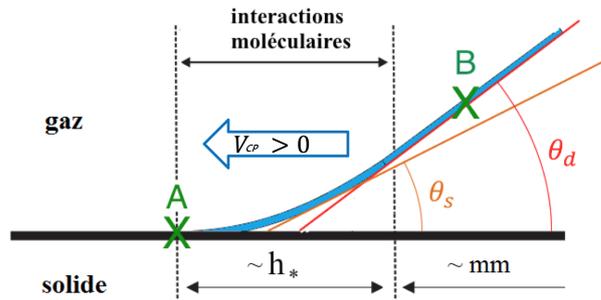


FIGURE 3.9 – Représentation d'un point triple en mouvement à différentes échelles.

Cox et Voïnov, ainsi que De Gennes ont proposé des modèles théoriques donnant l'évolution de l'angle dynamique en fonction de la vitesse du point triple qui s'accordent bien avec les résultats expérimentaux. Les deux modèles conduisent au fait que, dans le

cas d'un film non soumis à un cisaillement gazeux ( $\tau_i^x = 0$ ) ou à un gradient de pression externe ( $\frac{\partial P_g}{\partial x} = 0$ ), le cube de  $\theta_d$  varie proportionnellement à la vitesse du point triple  $V_{CP}$  et logarithmiquement avec la longueur de glissement  $b$ . Nous vérifions que le modèle proposé est capable de reproduire ce comportement.

On se place toujours au voisinage du point triple ( $h \ll l_c$ ) et on suppose que le liquide avance uniformément à une vitesse  $V_{CP}$  constante, on a alors :

$$\forall t, \forall x, \bar{u}(x, t) = V_{CP} \quad (3.114)$$

Sous ces hypothèses, le bilan de quantité de mouvement (3.51c) du système de Saint Venant s'écrit :

$$\begin{aligned} & \overbrace{\rho h \frac{D V_{CP}}{Dt}}^{=0} + \rho V_{CP} \overbrace{\left[ \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} \right]}^{=(3.43a)=0} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \overbrace{\rho g \frac{h^2}{2}}^{=0} + F^d(h) - \gamma_{lg} \cos[\theta(x)] - \gamma_{sl} \right] \\ & = \frac{\partial}{\partial x} [\gamma_{lg} h K^{xz}(x)] + \underbrace{h \rho g^x}_{=0} - \frac{3 \mu V_{CP}}{h + b} \end{aligned} \quad (3.115)$$

En intégrant ce bilan entre le point triple  $A$  qui vérifie

$$\theta(x_A) = 0 \quad (3.116)$$

et le point  $B$  qui vérifie

$$h(x_B) = H \gg h_* \quad (3.117a)$$

$$\theta(x_B) = \theta_d \quad (3.117b)$$

$$K^{xz}(x_B) = 0 \quad (3.117c)$$

on obtient

$$\cos(\theta_s) - \cos(\theta_d) = 3 \frac{\mu V_{CP}}{\gamma_{lg}} \int_{x_A}^{x_B} \left[ \frac{1}{h(x) + b} \right] dx \quad (3.118)$$

Nous souhaitons exprimer analytiquement l'intégrale présente dans (3.118). Puisque le rayon d'action moléculaire  $h_*$  est petit devant l'épaisseur macroscopique  $H$ , la zone d'interactions moléculaires, où l'angle  $\theta(x)$  est différent de  $\theta_d$ , est très mince par rapport au domaine d'intégration. On peut alors approximer le profil d'épaisseur au voisinage du point triple par :

$$\forall x \in [x_A, x_B], h(x) = \tan(\theta_d) [x - x_A] \quad (3.119)$$

qui correspond à la même hypothèse que celle faite par De Gennes [15], à savoir que l'interface *liquide/gaz* forme approximativement un dièdre d'angle  $\theta_d$  avec le substrat. En définissant  $C_a = \mu V_{CP}/\gamma_{lg}$  le nombre capillaire, la relation (3.118) devient :

$$\tan(\theta_d) [\cos(\theta_s) - \cos(\theta_d)] = 3 C_a \ln \left( \frac{H}{b} \right) \quad (3.120)$$

qui correspond exactement à la loi (2.56) obtenue par De Gennes.

### 3.5 Analyse de stabilité linéaire

Dans cette section, on s'intéresse à l'analyse de stabilité linéaire du modèle proposé. Elle permet de déterminer sous quelles conditions un film liquide transitionne d'un régime stable (où l'amplitude d'une petite perturbation de l'écoulement s'atténue dans le temps) à un régime instable (où la perturbation croît dans le temps). Nous comparerons cette analyse avec des résultats de la littérature et nous discuterons de l'influence des propriétés de mouillage (piloté par le rayon d'action  $h_*$  et l'angle de contact statique  $\theta_s$ ) sur la stabilité du film.

#### 3.5.1 Linéarisation du système autour d'un état d'équilibre

On souhaite étudier la stabilité d'un film à l'équilibre caractérisé par une épaisseur  $h_o$ , une pente locale  $p_o$ , un débit massique linéique  $(\rho q)_o$ , et une vitesse moyenne  $u_o = q_o/h_o$ . L'épaisseur  $h_o$  est supposée non nulle et suffisamment grande devant la longueur de glissement  $b$  pour que l'on puisse supposer que  $b \ll h_o$  et donc écrire que  $h_o + b \simeq h_o$ . La perturbation de cet équilibre est modélisée en imposant la décomposition suivante :

$$h = h_o + \varepsilon h_1, \quad p = \underbrace{p_o}_{=0} + \varepsilon p_1, \quad \rho q = (\rho q)_o + \varepsilon (\rho q)_1 \quad (3.121)$$

où  $h_1$ ,  $p_1$  et  $(\rho q)_1$  correspondent respectivement à la perturbation de l'épaisseur, de la pente et du débit massique linéique, et  $\varepsilon \ll 1$  désigne l'amplitude infinitésimale de la perturbation. En injectant cette décomposition dans le système augmenté de Saint Venant (3.51), on obtient le système linéarisé suivant :

$$\frac{\partial}{\partial t} [\varepsilon h_1] + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} [\varepsilon (\rho q)_1] + O(\varepsilon^2) = 0 \quad (3.122a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [\varepsilon p_1] + \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [\varepsilon (\rho q)_1] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \varepsilon \underbrace{\left( p_1 - \frac{\partial h_1}{\partial x} \right)}_{=0} \right] + O(\varepsilon^2) = 0 \quad (3.122b)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} [\varepsilon (\rho q)_1] + \left[ -\rho u_o^2 + \rho g^z h_o + h_o \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right)_{(h=h_o)} \right] \frac{\partial}{\partial x} [\varepsilon h_1] + 2u_o \frac{\partial}{\partial x} [\varepsilon q_1] \\ & = \gamma_l g h_o \frac{\partial^2}{\partial x^2} [\varepsilon p_1] - \frac{3\nu}{h_o^2} [(\rho q)_o + \varepsilon (\rho q)_1 - 2\rho u_o (\varepsilon h_1)] \\ & + \left[ \rho g^x - \frac{\partial P_g}{\partial x} \right] [h_o + \varepsilon h_1] + \frac{3\tau_i^x}{2} + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (3.122c)$$

On remarque que nous avons supposé que  $p_1 = \frac{\partial h_1}{\partial x}$  dans l'équation (3.122b). En effet, puisque le système augmenté de Saint Venant (3.51) vérifie l'hypothèse  $p = \frac{\partial h}{\partial x}$ , le système linéarisé (3.122) la vérifie aussi, et on a

$$p = \frac{\partial h}{\partial x} \implies \varepsilon p_1 = \underbrace{\frac{\partial h_o}{\partial x}}_{=0} + \varepsilon \frac{\partial h_1}{\partial x} \implies p_1 = \frac{\partial h_1}{\partial x} \quad (3.123)$$

On peut écrire le système linéarisé (3.122) sous la forme matricielle

$$\frac{\partial \mathbf{U}_1}{\partial t} + \underline{\underline{A}}_o \frac{\partial \mathbf{U}_1}{\partial x} = \underline{\underline{B}}_o \frac{\partial^2 \mathbf{U}_1}{\partial x^2} + \underline{\underline{S}}_o \mathbf{U}_1 + \mathbf{C}_o \quad (3.124)$$

avec  $\mathbf{U}_1 = {}^t(\varepsilon h_1, \varepsilon p_1, \varepsilon(\rho q)_1)$  la perturbation, et les matrices  $\underline{\underline{A}}_o$ ,  $\underline{\underline{B}}_o$  et  $\underline{\underline{S}}_o$  et la variable  $\mathbf{C}_o$  donnés par

$$\begin{aligned} \underline{\underline{A}}_o &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & (1/\rho) \\ 0 & 0 & 0 \\ a_{31} & 0 & (2u_o) \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{B}}_o = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (-1/\rho) \\ 0 & (\gamma_l g h_o) & 0 \end{bmatrix}, \\ \underline{\underline{S}}_o &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ s_{31} & 0 & -\frac{3\nu}{h_o^2} \end{bmatrix}, \\ \mathbf{C}_o &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{3\nu}{h_o^2}(\rho q)_o + \left(\rho g^x - \frac{\partial P_g}{\partial x}\right) h_o + \frac{3\tau_i^x}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.125)$$

où  $a_{31}$  et  $s_{31}$  s'écrivent :

$$a_{31} = -\rho u_o^2 + \rho g^z h_o + h_o \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right)_{(h=h_o)} \quad (3.126a)$$

$$s_{31} = \frac{6 \rho \nu u_o}{h_o^2} + \rho g^x - \left( \frac{\partial P_g}{\partial x} \right) \quad (3.126b)$$

En l'absence de perturbation, soit  $\mathbf{U}_1 = \mathbf{0}$ , on a :

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_o = \mathbf{0} &\implies u_o = \frac{h_o^2}{3\mu} \left[ \left( \rho g^x - \frac{\partial P_g}{\partial x} \right) + \frac{3\tau_i^x}{2 h_o} \right] \\ &\implies s_{31} = \frac{3\mu}{h_o^2} \left[ 3 u_o - u_{\tau_i^x} \right] \end{aligned} \quad (3.127)$$

avec  $u_{\tau_i^x}$  la vitesse moyenne d'un écoulement stationnaire uniquement piloté par le cisaillement de la couche limite gazeuse donnée par

$$u_{\tau_i^x} = \frac{h_o^2}{3\mu} \left[ \frac{3\tau_i^x}{2 h_o} \right] \quad (3.128)$$

On retrouve le fait que la vitesse moyenne  $u_o$  de l'écoulement stationnaire non-perturbé correspond à celle d'un écoulement de Nusselt piloté par la gravité, le cisaillement et le gradient de pression dans la couche limite gazeuse.

### 3.5.2 Relation de dispersion

La stabilité du film liquide est étudiée en cherchant la perturbation sous la forme suivante :

$$\mathbf{U}_1 = \hat{U} \exp[i k(x - c t)] \quad (3.129)$$

avec  $k = 2\pi/\lambda$  le nombre d'onde de la perturbation sinusoidale,  $\lambda$  sa longueur d'onde, et  $c = c_r + i c_i$  la vitesse (réelle ou imaginaire) de propagation de la perturbation. En injectant (3.129) dans le système matriciel linéarisé, on obtient :

$$\underbrace{\left[ -i k c \underline{I} + i k \underline{A}_o + k^2 \underline{B}_o - \underline{S}_o \right]}_{= \underline{D}_o} \mathbf{U}_1 = \mathbf{0} \quad (3.130)$$

avec  $\underline{I}$  la matrice identité. Les solutions non triviales de (3.130) correspondent à une matrice  $\underline{D}_o$  non inversible dont le déterminant est donc nul. La relation de dispersion s'écrit par conséquent :

$$kc \left[ kc - 2 u_o k + \left( \frac{3\nu}{h_o^2} \right) i \right] - \frac{s_{31}}{\rho} i k - \frac{a_{31}}{\rho} k^2 - \frac{\gamma l g}{\rho} h_o k^4 = 0 \quad (3.131)$$

La résolution de cette équation de dispersion peut se faire numériquement et permet d'obtenir l'expression  $c = f(k)$  de la vitesse de propagation en fonction du nombre d'onde de la perturbation. Cependant, on peut obtenir une solution analytique en se plaçant dans l'hypothèse des petits (resp. grandes) nombres d'ondes (reps. longueur d'ondes) de perturbation, soit  $k \ll 1$ . En décomposant la célérité sous forme réelle et imaginaire, on obtient le système d'équation suivant

$$\left[ (c_r)^2 - (c_i)^2 \right] k - 2 u_o c_r k - \frac{3\nu}{h_o^2} c_i - \frac{a_{31}}{\rho} - \frac{\gamma l g}{\rho} h_o k^3 = 0 \quad (3.132a)$$

$$2 c_r c_i k + \frac{3\nu}{h_o^2} c_r - 2 u_o c_i k - \frac{s_{31}}{\rho} = 0 \quad (3.132b)$$

et en écrivant la célérité réelle et imaginaire sous la forme d'un développement asymptotique en puissance du nombre d'onde  $k \ll 1$ , soit

$$c_r = (c_r)_o + k (c_r)_1 \quad (3.133a)$$

$$c_i = (c_i)_o + k (c_i)_1 \quad (3.133b)$$

le système d'équation (3.132) devient :

$$\left[ -\frac{3\nu}{h_o^2} (c_i)_o \right] + \left[ \begin{array}{l} -\frac{3\nu}{h_o^2} (c_i)_1 - 2 u_o (c_r)_o \\ + (c_r)_o^2 - (c_i)_o^2 - \frac{a_{31}}{\rho} \end{array} \right] k + O(k^2) = 0 \quad (3.134a)$$

$$\left[ \frac{3\nu}{h_o^2} (c_r)_o - \frac{s_{31}}{\rho} \right] + \left[ \begin{array}{l} 2 (c_r)_o (c_i)_o + \frac{3\nu}{h_o^2} (c_r)_1 \\ - 2 u_o (c_r)_o \end{array} \right] k + O(k^2) = 0 \quad (3.134b)$$

On obtient après résolution de l'ordre 0 en  $k$  :

$$(c_r)_o = 3 u_o - u_{\tau_i^x} \quad (3.135a)$$

$$(c_i)_o = 0 \quad (3.135b)$$

et de l'ordre 1 en  $k$  :

$$(c_r)_1 = 0 \quad (3.136a)$$

$$(c_i)_1 = \frac{h_o^2}{3\mu} \left[ \begin{array}{l} 4 \rho u_o^2 \left( 1 - \left( \frac{u_{\tau_i^x}}{u_o} \right) + \frac{1}{4} \left( \frac{u_{\tau_i^x}}{u_o} \right)^2 \right) \\ -\rho g^z h_o - h_o \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right)_{(h=h_o)} \end{array} \right] \quad (3.136b)$$

La célérité des ondes s'écrit donc finalement :

$$c_r = 3 u_o - u_{\tau_i^x} \quad (3.137a)$$

$$c_i = \frac{h_o^2}{3\mu} \left[ \begin{array}{l} 4 \rho u_o^2 \left( 1 - \left( \frac{u_{\tau_i^x}}{u_o} \right) + \frac{1}{4} \left( \frac{u_{\tau_i^x}}{u_o} \right)^2 \right) \\ -\rho g^z h_o - h_o \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right)_{(h=h_o)} \end{array} \right] k \quad (3.137b)$$

La partie réelle  $c_r$  donne la vitesse de propagation des vagues à l'interface *liquide/gaz*. Dans le cas d'un film liquide non-cisillé s'écoulant à l'équilibre sur un plan incliné avec une vitesse moyenne  $u_o$ , les vagues se propagent donc trois fois plus vite. La partie imaginaire  $c_i$  pilote la stabilité du film. Si  $c_i$  est négatif, le film est stable en réponse à une perturbation de grande longueur d'onde, et une perturbation du film décroît dans le temps. Inversement, si  $c_i$  est positif, le film est instable et une perturbation s'amplifie. On retrouve ainsi les résultats bien connus de la littérature qu'un film liquide est déstabilisé par l'inertie et stabilisé par la pesanteur. La stabilité vis-à-vis des interactions moléculaires dépend de l'expression de la densité surfacique d'énergie de disjonction  $e_{disj}(h)$ .

#### Remarque 9

L'expression (3.137b) de la célérité imaginaire  $c_i$  des ondes ne tient pas compte des effets capillaires qui sont proportionnels à  $k^3$ . Il faut pour cela effectuer un développement limité en puissance du nombre d'onde  $k$  jusqu'à l'ordre 3. Ils apportent une contribution négative à  $c_i$  qui stabilise les petites (resp. les grands) longueurs d'ondes (resp. nombres d'ondes) de perturbation.

### 3.5.3 Stabilité d'un film dans différentes configurations

Nous souhaitons déterminer les différents régimes critiques qui font passer le film d'un régime stable à un régime instable. La limite de stabilité du film en réponse à une perturbation de grande longueur d'onde ( $k \ll 1$ ) est donnée par  $c_i = 0$ . Nous allons nous intéresser à deux cas particuliers (film liquide sur plan incliné et horizontal) et ainsi vérifier que l'on retrouve bien des résultats de la littérature.

#### Stabilité d'un film à l'équilibre sur un plan horizontal

Nous souhaitons étudier la stabilité d'un film liquide d'épaisseur  $h_o$  à l'équilibre sur un plan horizontal en fonction des propriétés de mouillage (angle de contact statique  $\theta_s$ , rayon d'action moléculaire  $h_*$ ). Le liquide est supposé statique ( $u_o = 0$ ) et l'air est au

repos ( $\tau_i^x = 0, \frac{\partial P_g}{\partial x} = 0$ ). Dans ce cas, la célérité  $c_i$  vaut :

$$c_i = \frac{h_o^2}{3\mu} \left[ -\rho g h_o - h_o \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right)_{(h=h_o)} - h_o \gamma_{lg} k^2 \right] k$$

$$= \frac{h_o^3}{3\mu} \gamma_{lg} \left[ \underbrace{-\frac{\rho g}{\gamma_{lg}} - \frac{1}{\gamma_{lg}} \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right)_{(h=h_o)}}_{=k_c^2} - k^2 \right] k \quad (3.138)$$

Dans notre cas, la densité d'énergie de disjonction  $e_{disj}(h)$  est donnée par (3.100), qui est une fonction strictement concave de  $h$  car :

$$\left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right)_{(h=h_o)} = \frac{S}{(h_*)^2} \exp\left(-\frac{h_o}{h_*}\right) < 0 \quad (3.139)$$

La stabilité du film est alors régie par une compétition entre la gravité stabilisante et les interactions moléculaires déstabilisantes. La limite de stabilité du film liquide est donnée par la résolution de l'équation  $k_c^2 = 0$ . Elle peut se faire analytiquement dans le cas du modèle (3.100) et correspond à :

$$\left( \frac{h_o}{l_c} \right) = \left( \frac{h_*}{l_c} \right) \ln \left[ [1 - \cos(\theta_s)] \frac{1}{(h_*/l_c)^2} \right] \quad (3.140)$$

dont nous allons commenter la courbe tracée sur la figure 3.10.

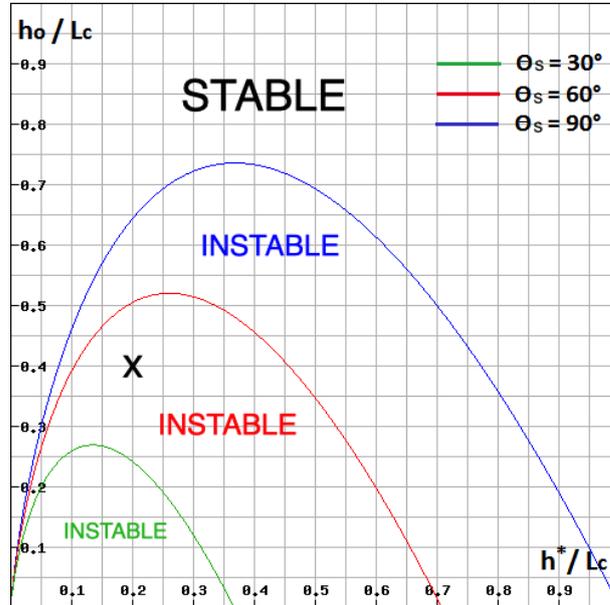


FIGURE 3.10 – Limite de stabilité d'un film d'épaisseur  $h_o$  à l'équilibre sur un plan horizontal en fonction du paramètre  $h_*$  et de l'angle de contact statique  $\theta_s$ . Le domaine stable se situe au-dessus de la courbe, et le domaine instable en-dessous. Les épaisseur  $h_o$  et  $h_*$  sont adimensionnées par la longueur capillaire  $l_c$ . La croix correspond à  $(h_*/l_c ; h_o/l_c) = (0, 2 ; 0, 4)$ .

On rappelle que le paramètre  $h_*$  joue le rôle de rayon d'action moléculaire et définie donc à partir de quelle épaisseur de film  $h_o$  les interfaces *solide/liquide* et *liquide/gaz* interagissent. Ainsi, à épaisseur  $h_o$  de film fixée, on voit sur la figure 3.10 que si  $h_*$  est petit devant  $h_o$ , le film est stable. Ce résultat est bien en accord avec le fait que les interfaces sont trop éloignées pour interagir et elles ne peuvent donc pas déstabiliser le film. Par contre, si  $h_*$  est comparable à  $h_o$ , on voit sur la figure que le film est instable, cohérent car les interfaces interagissent à ces épaisseurs. Enfin, si  $h_*$  est grand devant  $h_o$ , le film redevient stable. En effet, bien que les interfaces puissent toujours interagir, on a :

$$\lim_{h_*/h_o \rightarrow +\infty} \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right)_{(h=h_o)} = 0 \quad (3.141)$$

Les forces moléculaires deviennent donc de moins en moins déstabilisantes quand le rayon d'action  $h_*$  devient très grand, et le film est à nouveau stabilisé par la gravité. La valeur de l'angle de contact  $\theta_s$  influence également fortement la stabilité du film puisque le domaine où il est instable se réduit lorsque  $\theta_s$  diminue, et disparaît complètement lorsque  $\theta_s = 0^\circ$ . Ce résultat était prévisible car le cas  $\theta_s = 0^\circ$  correspond à un mouillage total. Le film ne subit donc aucune interaction moléculaire et est uniquement stabilisé par la gravité.

Cette analyse de stabilité linéaire permet également de définir une valeur limite pour le paramètre  $h_*$  qu'il ne faut pas dépasser, au risque de générer des instabilités de film non-physiques. En effet, les instabilités décrites ci-dessus sont des instabilités spinodales que nous avons introduites à la section 2.2.4. Elles n'apparaissent normalement que dans le cas de films très minces dont les épaisseurs sont proches du vrai rayon d'action des forces moléculaires  $\mathfrak{R}$ , de l'ordre du nanomètre. On rappelle que le modèle de densité surfacique d'énergie de disjonction proposé induit un rayon d'action égal à  $h_*$  qui sera généralement pris plus grand que sa vraie valeur  $\mathfrak{R}$  pour des raisons numériques (qui seront expliquées au chapitre 5). Puisque l'on s'intéresse ici à des films macroscopiques, ces instabilités sont normalement absentes. Nous devons alors nous assurer que le rayon d'action  $h_*$  choisi reste suffisamment petit devant l'épaisseur  $h_o$  du film afin de ne pas générer d'instabilités non-physiques, soit :

$$\mathfrak{R} \ll h_* \ll h_o \quad (3.142)$$

Pour illustrer un mauvais choix de  $h_*$ , on prend l'exemple d'un film d'eau à température ambiante ( $l_c = 2,633 \text{ mm}$ ) à l'équilibre sur un plan horizontal. On suppose que son angle de contact statique avec le substrat est égal à  $\theta_s = 60^\circ$ . On voit donc que si l'on prend le cas représenté par la croix sur la figure 3.10 d'une épaisseur d'équilibre macroscopique  $h_o = 0,4 l_c$  et d'un rayon d'action  $h_* = h_o/2$ , le film est instable alors que son épaisseur  $h_o = 1,08 \text{ mm}$  est très loin des échelles moléculaires  $\mathfrak{R}$ .

### Stabilité d'un film à l'équilibre sur un plan incliné

Nous souhaitons à présent étudier la stabilité d'un film s'écoulant sous l'effet de la gravité et/ou du cisaillement d'un gaz sur un plan incliné d'un angle  $\beta$ . On suppose que l'épaisseur  $h_o$  est suffisamment grande devant le rayon d'action  $h_*$  pour que les interfaces *solide/liquide* et *liquide/gaz* n'interagissent pas ( $e_{disj} = 0$ ). La partie imaginaire  $c_i$  de la célérité des ondes vaut alors :

$$c_i = \frac{h_o^3}{3\mu} \gamma_{lg} \left[ \underbrace{\frac{4 \rho u_o^2}{h_o \gamma_{lg}} \left( 1 - \left( \frac{u_{\tau_i^x}}{u_o} \right) + \frac{1}{4} \left( \frac{u_{\tau_i^x}}{u_o} \right)^2 \right) - \frac{\rho g}{\gamma_{lg}} \cos(\beta) - k^2}_{=k_c^2} \right] k \quad (3.143)$$

La stabilité du film est régie par une compétition entre la gravité stabilisante et l'inertie déstabilisante, dont la limite de stabilité est donnée par la résolution de l'équation  $k_c^2 = 0$ , soit :

$$4 u_o^2 \left( 1 - \left( \frac{u_{\tau_i^x}}{u_o} \right) + \frac{1}{4} \left( \frac{u_{\tau_i^x}}{u_o} \right)^2 \right) - g \cos(\beta) h_o = 0 \quad (3.144)$$

qui peut se ré-écrire

$$(Fr)_{cr} = \frac{u_o^2}{g h_o} = \frac{1}{4 \left( 1 - \left( \frac{u_{\tau_i^x}}{u_o} \right) + \frac{1}{4} \left( \frac{u_{\tau_i^x}}{u_o} \right)^2 \right)} \cos(\beta) \quad (3.145)$$

Le modèle proposé retrouve les résultats connus de la littérature [11] qu'un film liquide sera toujours instable sur un plan vertical ( $\beta = 90^\circ \implies (Fr)_{cr} = 0$ ) et qu'un cisaillement du gaz dans le sens de l'écoulement ( $\tau_i^x > 0$ ) augmente le nombre de Froude critique d'apparition des instabilités en "Roll-Waves". Le nombre de Froude critique dans le cas particulier d'un film tombant ( $u_{\tau_i^x} = 0$ ) est donné par

$$\lim_{u_{\tau_i^x} \rightarrow 0} (Fr)_{cr} = \frac{1}{4} \cos(\beta) \quad (3.146)$$

qui diffère du bon régime donné par  $(Fr)_{cr} = 5/18 \cos(\beta)$ . Cependant, puisque que nous ne nous intéressons pas réellement aux cas des films tombants dans le cadre de ce travail, cette erreur n'est pas importante. On s'intéresse plutôt au nombre de Froude critique dans le cas particulier d'un film majoritairement cisailé ( $u_{\tau_i^x} = u_o$ ) qui est donné par

$$\lim_{u_{\tau_i^x} \rightarrow u_o} (Fr)_{cr} = \cos(\beta) \quad (3.147)$$

qui diffère également du bon régime prédit par [11] et qui vaut  $(Fr)_{cr} = 5/12 \cos(\beta)$ . On rappelle toutefois que les régimes étudiés dans le cadre de ce travail se caractérisent par des nombres de Froude de l'ordre de 50, bien plus grands que le nombre de Froude critique de l'ordre de 1. La modélisation exacte du régime critique n'est donc pas nécessaire dans une première approche puisque nous nous situons toujours dans le régime instable.

### 3.5.4 Remarques sur la partie réelle de la célérité des ondes

Il peut être intéressant de déterminer la vitesse de propagation maximale des ondes  $c_r$  à la surface du film. Dans le cas d'écoulements avec capillarité, la vitesse de propagation maximale est associée aux vagues de petites longueurs d'ondes. En effet, on constate que les effets capillaires apparaissent dans la relation de dispersion (3.132a) comme un terme proportionnel à  $k^3$ , dominant dans la limite  $k \gg 1$ . En se plaçant dans cette limite, et en

ne conservant que les termes au moins d'ordre 1 en  $k$  de la relation de dispersion (3.134), on obtient après résolution analytique

$$c_r \underset{k \gg 1}{=} u_o \pm \sqrt{g^z h_o + \frac{h_o}{\rho} \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right)_{(h=h_o)} + \frac{h_o}{\rho} \gamma_l g k^2} \quad (3.148)$$

Lorsque nous discrétiserons les équations au chapitre 4, le domaine spatial sera décomposé en  $N$  cellules de longueur  $\Delta x$ . Le nombre d'onde maximal qu'il est possible d'observer à l'échelle du maillage vaut donc  $\pi/\Delta x$ , et la célérité maximale des ondes vaut alors

$$(c_r)_{max} = u_o \pm \sqrt{g^z h_o + \frac{h_o}{\rho} \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right)_{(h=h_o)} + \frac{h_o}{\rho} \gamma_l g \left( \frac{\pi}{\Delta x} \right)^2} \quad (3.149)$$

Une condition nécessaire de stabilité numérique [12] du système discrétisé explicitement en temps est :

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{(c_r)_{max}} \quad (3.150)$$

avec  $\Delta t$  le pas de temps de simulation, et qui assure que les erreurs numériques se propagent moins rapidement que la solution physique. En supposant que la vitesse de propagation est dominée par celle des ondes capillaires, soit

$$(c_r)_{max} \sim \sqrt{\frac{h_o}{\rho} \gamma_l g} \left( \frac{\pi}{\Delta x} \right) \quad (3.151)$$

La condition de stabilité s'écrit

$$\Delta t < \frac{\Delta x^2}{\pi \sqrt{\frac{h_o}{\rho} \gamma_l g}} \quad (3.152)$$

Une discrétisation explicite en temps du système augmenté de Saint Venant impose donc une contrainte sur le pas de temps, du type  $\Delta t = O(\Delta x^2)$ , qui est très restrictive.

## 3.6 Hyperbolicité

### 3.6.1 Calcul des valeurs propres du système linéarisé du premier ordre

Pour terminer, nous allons étudier les conditions d'hyperbolicité du modèle proposé, plus exactement du système obtenu en ne conservant que ces les termes du premier ordre. Le système correspondant s'écrit :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\begin{pmatrix} F^h \\ F^p \\ F^{\rho q} \end{pmatrix}}_{= \mathbf{F}} = \mathbf{0} \quad (3.153)$$

où les composantes du flux sont données par

$$F^h = \bar{u} h, \quad F^p = \bar{u} p, \quad F^{\rho q} = \bar{u} \rho q + \mathcal{L}(e_{film}) \quad (3.154)$$

avec  $\bar{u} = q/h$  la vitesse moyenne et  $\mathcal{L}(e_{film})$  la transformée de Legendre de la densité surfacique d'énergie du film qui s'écrit

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(e_{film}) &= h \frac{\partial e_{film}}{\partial h} + p \frac{\partial e_{film}}{\partial p} + (\rho q) \frac{\partial e_{film}}{\partial(\rho q)} - e_{film}(h, p, \rho q) \\ &= \rho g^z \frac{h^2}{2} - \gamma_{sl} - \frac{\gamma_{lg}}{\sqrt{1+p^2}} + \left[ h \left( \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right) - e_{disj}(h) \right]\end{aligned}\quad (3.155)$$

On cherche à déterminer les valeurs propres de la jacobienne  $\underline{\underline{M}}$  du flux  $\mathbf{F}$  qui s'écrit :

$$\underline{\underline{M}} = \nabla_{\mathbf{U}} \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \frac{\partial F^h}{\partial h} & \frac{\partial F^h}{\partial p} & \frac{\partial F^h}{\partial(\rho q)} \\ \frac{\partial F^p}{\partial h} & \frac{\partial F^p}{\partial p} & \frac{\partial F^p}{\partial(\rho q)} \\ \frac{\partial F^{\rho q}}{\partial h} & \frac{\partial F^{\rho q}}{\partial p} & \frac{\partial F^{\rho q}}{\partial(\rho q)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \left( \frac{1}{\rho} \right) \\ -\left( \frac{\bar{u} p}{h} \right) & \bar{u} & \left( \frac{p}{\rho h} \right) \\ j_{31} & j_{32} & 2\bar{u} \end{bmatrix}\quad (3.156)$$

avec  $j_{31}$  et  $j_{32}$  donnés par :

$$j_{31} = -\rho \bar{u}^2 + \rho g^z h + h \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right)\quad (3.157a)$$

$$j_{32} = \gamma_{lg} \frac{p}{(1+p^2)^{3/2}}\quad (3.157b)$$

Les valeurs propres  $\Lambda$  de la jacobienne  $\underline{\underline{M}}$  sont solutions de l'équation

$$\det(\underline{\underline{M}} - \Lambda \underline{\underline{I}}) = 0\quad (3.158)$$

avec  $\underline{\underline{I}}$  la matrice identité, et qui s'exprime sous forme factorisée par

$$[\Lambda - \bar{u}] \underbrace{\left[ \Lambda^2 - 2\bar{u} \Lambda + \left( \bar{u}^2 - g^z h - \frac{h}{\rho} \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right) - \frac{\gamma_{lg}}{\rho} \frac{1}{h} \frac{p^2}{(1+p^2)^{3/2}} \right) \right]}_{\text{polynome du 2}^{nd} \text{ degré en } \Lambda} = 0\quad (3.159)$$

Une solution évidente est

$$\Lambda_1 = \bar{u}\quad (3.160)$$

Les deux autres solutions vont dépendre du signe du discriminant  $\mathcal{D}$  du polynôme du second degré qui vaut :

$$\mathcal{D} = 4 \left[ g^z h + \frac{h}{\rho} \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right) + \frac{\gamma_{lg}}{\rho} \frac{1}{h} \frac{p^2}{(1+p^2)^{3/2}} \right]\quad (3.161)$$

Si le discriminant est positif, le système est hyperbolique et les valeurs propres réelles s'écrivent

$$\Lambda_{2,3} = \bar{u} \pm \sqrt{g^z h + \frac{h}{\rho} \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right) + \frac{\gamma_{lg}}{\rho} \frac{1}{h} \frac{p^2}{(1+p^2)^{3/2}}}\quad (3.162)$$

Si le discriminant est négatif, le système n'est pas hyperbolique et les valeurs propres sont imaginaires et données par

$$\Lambda_{2,3} = \bar{u} \pm i \sqrt{\left| g^z h + \frac{h}{\rho} \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right) + \frac{\gamma_{lg}}{\rho} \frac{1}{h} \frac{p^2}{(1+p^2)^{3/2}} \right|}\quad (3.163)$$

**Remarque 10**

On peut montrer qu'il existe un lien direct entre l'expression de la densité surfacique d'énergie du film et l'hyperbolicité du modèle. En effet, si on ré-écrit le discriminant sous la forme :

$$\mathcal{D} = \frac{4}{\rho h} \left[ h^2 \left( g^z + \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right) \right) + p^2 \left( \frac{\gamma_{lg}}{(1+p^2)^{3/2}} \right) \right] \quad (3.164)$$

Et si on se rappelle que les densités d'énergie potentielle  $e_{grav}$  et capillaire  $e_{capi}$  du film s'écrivent :

$$e_{grav}(h) = \frac{\rho g^z h^2}{2}, \quad e_{capi}(p) = \gamma_{sl} + \gamma_{lg} \sqrt{1+p^2} \quad (3.165)$$

Alors on voit que le discriminant peut s'écrire :

$$\mathcal{D} = \frac{4}{\rho h} \left[ h^2 \left( \left( \frac{\partial^2 e_{grav}}{\partial h^2} \right) + \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right) \right) + p^2 \left( \frac{\partial^2 e_{capi}}{\partial p^2} \right) \right] \quad (3.166)$$

dont le signe varie selon que les densités surfaciques d'énergie soient des fonctions convexes ou concaves des variables conservatives  $h$  et  $p$ . On voit qu'il existe un lien étroit entre l'hyperbolicité et l'énergie linéique du système (entropie mathématique).

**3.6.2 Analyse de l'hyperbolicité du système**

On rappelle que le modèle de densité surfacique d'énergie de disjonction est une fonction concave de l'épaisseur  $h$ , car :

$$\left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right)_{(h=h_o)} = \frac{\gamma_{lg} [\cos(\theta_s) - 1]}{(h_*)^2} \exp\left(-\frac{h}{h_*}\right) \leq 0 \quad (3.167)$$

On voit donc qu'il est possible que le discriminant  $\mathcal{D}$  devienne négatif et que le système ne soit pas hyperbolique. Cette non-hyperbolicité est susceptible d'apparaître en particulier au niveau du point triple lorsque l'épaisseur du film  $h$  est de l'ordre de grandeur du rayon d'action moléculaire  $h_*$  de notre modèle. Par contre, loin du point triple ( $h \gg h_*$ ), le discriminant s'écrit :

$$\mathcal{D} \simeq 4 \left[ g^z h + \frac{\gamma_{lg}}{\rho} \frac{1}{h} \frac{p^2}{(1+p^2)^{3/2}} \right] > 0 \quad (3.168)$$

garantissant l'hyperbolicité du système. Le modèle d'énergie de disjonction (3.100) induit donc un système localement non-hyperbolique au voisinage du point triple qui pourrait éventuellement entraîner des problèmes de stabilité numérique dans le cas des équations discrétisées.

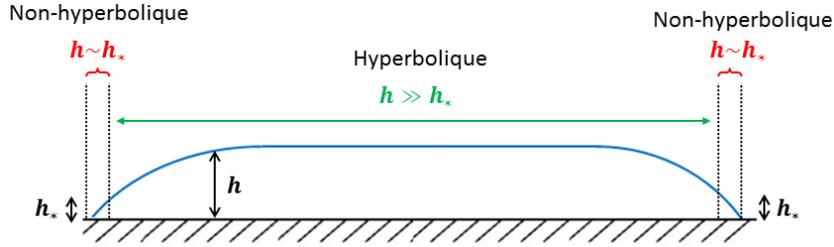


FIGURE 3.11 – Représentation schématique des zones potentiellement non-hyperboliques du modèle proposé.

Il faut toutefois tenir compte que cette analyse d'hyperbolicité ne tient pas compte du terme capillaire d'ordre 2 alors que nous avons vu (voir remarque 9) qu'il joue un rôle stabilisateur à hautes fréquences. De plus, l'instabilité intrinsèque liée à la concavité du terme d'énergie de disjonction est cruciale pour rendre compte du phénomène de mouillage partiel sur un substrat sec (sans film précurseur), démontré à la section 3.4.2 et souhaité dans nos applications.

### 3.7 Conclusion du chapitre

Nous avons proposé un système augmenté de type Saint Venant dédié à la modélisation d'écoulements de films minces dans l'hypothèse de lubrification ( $Re \sim 1$  et écoulement quasi-parallèle). Ce système a l'avantage d'être uniquement du second ordre en espace et peut donc être discrétisé par la méthode des Volumes Finis, propriété souhaitée pour des applications industrielles. Il se distingue en particulier par sa capacité à pouvoir prendre en compte les forces capillaires et d'interactions moléculaires sans limite de validité en terme de pente  $p = h_x$  de surface libre et d'angle de contact dynamique  $\theta_d$ , contrairement à l'équation classique de lubrification avec approximation "onde longue" des forces capillaires.

Par l'intermédiaire d'une analyse de stabilité linéaire du modèle proposé, nous avons identifié un régime pouvant mener à une rupture de film, appelé dans la littérature régime "d'instabilités spinodales". Ce régime, qui apparaît normalement dans le cas de films liquides très fins (de l'ordre du  $nm$ ), apparaît ici pour des épaisseurs  $h$  de films proches du paramètre  $h_*$  qui permet de régulariser les forces moléculaires. Ce paramètre devra donc être choisi avec prudence.

Enfin, certaines propriétés théoriques du système ont été démontrées. Bien que celui-ci ne soit hyperbolique que sous certaines conditions (lorsque seuls les termes du 1<sup>er</sup> ordre sont pris en compte), nous avons prouvé qu'il vérifie inconditionnellement une équation de bilan d'énergie qui garantit que le problème est à priori bien posé mathématiquement.



# Chapitre 4

## Schéma de discrétisation numérique

On propose dans ce chapitre une discrétisation spatiale et temporelle du système augmenté de Saint Venant (3.51) présenté au chapitre précédent. D'un point de vue numérique, il est souhaitable que le système discrétisé vérifie, comme le système continu, une équation de bilan d'énergie. Ce bilan discret est relié à la stabilité non-linéaire du schéma, et l'on parle de schéma "énergie-conservatif" si l'énergie est conservée et de schéma "énergie-dissipatif" si l'énergie se dissipe. Nous verrons qu'il est effectivement possible d'obtenir un bilan discret d'énergie et nous discuterons de la stabilité non-linéaire du modèle discrétisé.

### Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Discrétisation spatiale . . . . .</b>	<b>119</b>
4.1.1	Intégration par la méthode des Volume Finis . . . . .	119
4.1.2	Schéma de discrétisation proposé . . . . .	121
<b>4.2</b>	<b>Discrétisation temporelle . . . . .</b>	<b>121</b>
<b>4.3</b>	<b>Stabilité du schéma de discrétisation . . . . .</b>	<b>122</b>
4.3.1	Critère de stabilité non-linéaire . . . . .	122
4.3.2	Bilan d'énergie discret . . . . .	122
4.3.3	Conclusion du bilan énergétique discret . . . . .	126
<b>4.4</b>	<b>Mise en oeuvre du calcul et des conditions aux limites . . . . .</b>	<b>126</b>
4.4.1	Définition des cellules fantômes . . . . .	126
4.4.2	Initialisation de la variable conservative $p$ dans le domaine physique	127
4.4.3	Conditions aux bords du domaine . . . . .	127
4.4.4	Définition et évaluation du point triple macroscopique . . . . .	128

---

### 4.1 Discrétisation spatiale

#### 4.1.1 Intégration par la méthode des Volume Finis

On rappelle l'expression continue du système augmenté de Saint Venant :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = \frac{\partial B}{\partial x} + S \quad (4.1)$$

avec la variable conservative  $\mathbf{U}$ , les flux  $\mathbf{F}$  et  $\mathbf{B}$ , et le terme source  $\mathbf{S}$  donnés par

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} h \\ p \\ \rho q \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \bar{u} \mathbf{U} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathcal{L}(h, p) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -h \\ 0 & h & 0 \end{bmatrix}}_{=\underline{A}} \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathcal{S}(h, \rho q) \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

et la force linéique  $\mathcal{L}(h, p)$ , le terme source  $\mathcal{S}(h, \rho q)$  et la variable thermodynamique conjuguée  $\varphi$  donnés par

$$\mathcal{L}(h, p) = \rho g^z \frac{h^2}{2} - \gamma_{sl} - \frac{\gamma_{lg}}{\sqrt{1+p^2}} + \gamma_{lg} [1 - \cos(\theta_s)] \left[ 1 + \frac{h}{h_*} \right] e^{-\frac{h}{h_*}} \quad (4.3a)$$

$$\mathcal{S}(h, \rho q) = h \left[ \rho g^x - \frac{\partial P_g}{\partial x} \right] - \frac{3\mu q}{h(h+b)} + \frac{3\tau_i^x}{2} - \frac{\tau_i^x}{2} \left( \frac{b}{h+b} \right) \quad (4.3b)$$

$$\varphi = {}^t \left( \rho g^z h - \rho \frac{\bar{u}^2}{2}, \gamma_{lg} \frac{p}{\sqrt{1+p^2}}, \bar{u} \right) \quad (4.3c)$$

Puisque le système de Saint Venant 2D se compose d'équations intégrales (équations déjà intégrées suivant la direction  $z$ ), le domaine spatial d'étude est uni-dimensionnel dans la direction  $x$ . On décompose ce domaine en  $N$  cellules de longueur  $\Delta x^1$  et on désigne par  $i \in \llbracket 1; N \rrbracket$  l'indice d'une cellule. En se référant à la figure 4.1, on définit alors  $i+1$  et  $i-1$  respectivement l'indice de la cellule voisine droite et gauche, et  $i+1/2$  et  $i-1/2$  respectivement l'indice de l'interface avec la cellule voisine droite et gauche.

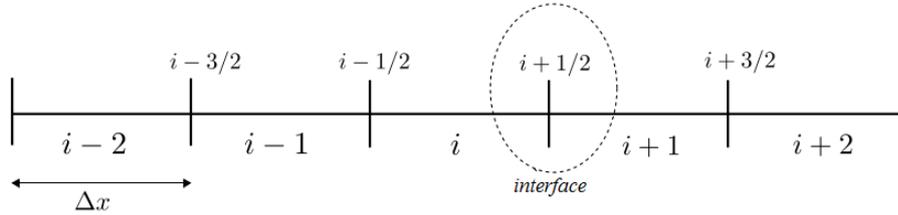


FIGURE 4.1 – Représentation du domaine spatial discrétisé, des cellules et des interfaces.

On applique la méthode des Volume Finis en intégrant spatialement le système (4.1) sur une cellule  $i$ , ce qui donne

$$\frac{\partial \mathbf{U}_i}{\partial t} + \frac{1}{\Delta x} (\mathbf{F}_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2}) = \frac{1}{\Delta x} (\mathbf{B}_{i+1/2} - \mathbf{B}_{i-1/2}) + \mathbf{S}_i \quad (4.4)$$

avec  $\mathbf{U}_i$  et  $\mathbf{S}_i$  des termes moyennés sur la cellule  $i$  qui s'écrivent :

$$\mathbf{U}_i = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [\mathbf{U}(x, t)] dx, \quad \mathbf{S}_i = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [\mathbf{S}(x, t)] dx \quad (4.5)$$

et avec  $\mathbf{F}_{i+1/2}$  et  $\mathbf{B}_{i+1/2}$  les flux à l'interface  $i+1/2$  dont nous allons proposer une discrétisation.

1. Ici  $\Delta x$  est pris constant, mais ce n'est pas une nécessité.

### 4.1.2 Schéma de discrétisation proposé

Nous avons vu à la section 3.6 que le modèle de densité surfacique d'énergie de disjonction utilisé pour modéliser les effets du mouillage partiel peut induire que la partie du premier ordre du système (4.1) admet des valeurs propres complexes. Par conséquent, le flux  $\mathbf{F}_{i+1/2}$  ne peut pas être discrétisé par les schémas classiques (de Godunov [79], de Lax [80], de Roe [81]) utilisés pour les systèmes hyperboliques, car ils supposent que les valeurs propres sont strictement réelles. On propose alors une discrétisation qui s'inspire du schéma AUSM (Advection Upstream Splitting Method) introduit par Liou and Steffen [78]. La méthode consiste à traiter séparément les termes convectifs et les termes de force de pression, et s'écrit

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \underbrace{(\bar{u} \mathbf{U})_{i+1/2}}_{\text{flux convectif}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathcal{L}_{i+1/2} \end{pmatrix}}_{\text{flux de force de pression}} \quad (4.6)$$

On choisit d'appliquer un schéma "upwind" pour le flux convectif, soit un décentrement suivant le signe de la vitesse  $\bar{u}_{i+1/2}$  à l'interface, et qui s'écrit

$$\begin{aligned} (\bar{u} \mathbf{U})_{i+1/2} &= \underbrace{\bar{u}_{i+1/2}^+}_{= \max(\bar{u}_{i+1/2}, 0)} \mathbf{U}_i + \underbrace{\bar{u}_{i+1/2}^-}_{= \min(\bar{u}_{i+1/2}, 0)} \mathbf{U}_{i+1} \end{aligned} \quad (4.7)$$

avec la vitesse moyenne  $\bar{u}_{i+1/2}$  à l'interface donnée par

$$\bar{u}_{i+1/2} = \frac{\bar{u}_i + \bar{u}_{i+1}}{2} \quad (4.8)$$

Et on applique un schéma centré pour le flux de force de pression, soit

$$\mathcal{L}_{i+1/2} = \frac{\mathcal{L}_i + \mathcal{L}_{i+1}}{2} \quad (4.9)$$

Concernant la partie du second ordre du système (4.1), elle est également discrétisée de manière centrée, et s'écrit :

$$\mathbf{B}_{i+1/2} = \frac{1}{\Delta x} \underline{\underline{A_{i+1/2}}} (\boldsymbol{\varphi}_{i+1} - \boldsymbol{\varphi}_i) \quad (4.10a)$$

$$\underline{\underline{A_{i+1/2}}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2}(h_i + h_{i+1}) \\ 0 & \frac{1}{2}(h_i + h_{i+1}) & 0 \end{pmatrix} \quad (4.10b)$$

## 4.2 Discrétisation temporelle

La méthode la plus simple pour résoudre le système discrétisé (4.4) consiste à utiliser un méthode d'Euler explicite. Cette méthode est très utilisée dans la littérature, car à partir des variables  $\mathbf{U}_i^n$  à l'instant  $t^n$ , on peut calculer directement les variables  $\mathbf{U}_i^{n+1}$  à l'instant suivant  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$  dans chaque cellule  $i$ , avec  $\Delta t$  le pas de temps. Cette méthode n'est toutefois pas adaptée à nos applications car elle impose une condition sévère sur le pas de temps  $\Delta t$  pour garantir la stabilité numérique de la simulation. En effet,

nous avons montré à la section 3.5.4 que la prise en compte des forces capillaires, qui jouent un rôle essentiel dans les applications visées, entraîne une condition de la forme  $\Delta t \sim \Delta x^2$ . Par conséquent, on a préféré adopter une méthode d'Euler implicite pour s'affranchir de cette contrainte sur le pas de temps. Contrairement, à la méthode explicite, on ne peut pas calculer directement l'inconnue  $\mathbf{U}_i^{n+1}$  dans chaque cellule  $i$ . Il faut résoudre un système d'équations linéaire à  $N$  équations pour  $N$  inconnues, avec  $N$  le nombre de cellules du domaine. Ce système est résolu avec un algorithme de Newton itératif dont la méthode est détaillée dans l'annexe B.

## 4.3 Stabilité du schéma de discrétisation

### 4.3.1 Critère de stabilité non-linéaire

On s'intéresse à la stabilité du système de Saint Venant discrétisé implicitement en temps, et spatialement avec le schéma proposé à la section 4.1.2. Nous avons vu au chapitre 3 que l'énergie linéique  $E_{film}$  du film constitue une entropie mathématique du système continu au sens de Lax [82] pour le problème sans forces extérieures ( $g^t = 0$ ,  $\tau_i^x = 0$ ,  $\frac{\partial P_g}{\partial x} = 0$ ), i.e. décroissante en fonction du temps. Ainsi, si on peut prouver que la version discrète de cette énergie linéique donnée par

$$E_{film} = \int [e_{film}(x, h, p, \rho q)] dx = \sum_{i=1}^{N_{cell}} e_i \Delta x \quad (4.11)$$

avec  $e_i$  la densité surfacique d'énergie du film moyennées sur la cellule  $i$  qui s'exprime par

$$e_i = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} [e_{film}(x)] dx = \frac{\rho h_i \bar{u}_i^2}{2} + \rho g^z \frac{h_i^2}{2} + \gamma_{lg} \sqrt{1 + p_i^2} + \gamma_{sl} + e_{disj}(h_i) \quad (4.12)$$

est également préservée ou dissipée en fonction du temps, on prouve alors qu'elle reste bornée, ce qui constitue une preuve de stabilité. Puisque nous avons adopté une discrétisation implicite en temps, il suffit de le prouver dans le cas du système continu en temps et discret en espace.

### 4.3.2 Bilan d'énergie discret

#### Détermination de l'équation discrète

On introduit la variable thermodynamique  $\varphi_i$  conjuguée à la variable conservative  $U_i = {}^t(h_i, p_i, (\rho q)_i)$  qui s'écrit

$$\varphi_i = \begin{pmatrix} (\varphi^h)_i \\ (\varphi^p)_i \\ (\varphi^{\rho q})_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial e_i / \partial h_i \\ \partial e_i / \partial p_i \\ \partial e_i / \partial (\rho q)_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho g^z h_i - \frac{1}{2\rho} \frac{(\rho q)_i^2}{h_i^2} \\ \gamma_{lg} \frac{p_i}{\sqrt{1+p_i^2}} \\ \bar{u}_i \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

Le produit scalaire du système de Saint Venant (4.4) continu en temps et discret en espace avec la variable conjuguée  $\varphi_i$  donne

$$\begin{aligned} \Delta x \left\{ \varphi_i \left| \frac{\partial U_i}{\partial t} \right. \right\} + \left\{ \varphi_i \left| \mathbf{F}_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2} \right. \right\} \\ = \left\{ \varphi_i \left| \mathbf{B}_{i+1/2} - \mathbf{B}_{i-1/2} \right. \right\} + \Delta x \left\{ \varphi_i \left| \mathbf{S}_i \right. \right\} \end{aligned} \quad (4.14)$$

On a la relation :

$$\left\{ \varphi_i \mid \frac{\partial \mathbf{U}_i}{\partial t} \right\} = \frac{\partial e_i}{\partial t} \quad (4.15)$$

et comme pour le système continu, on obtient une équation locale d'évolution temporelle de la densité surfacique d'énergie  $e_i$  dans la cellule  $i$

$$\Delta x \frac{\partial e_i}{\partial t} + \left\{ \varphi_i \mid \mathbf{F}_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2} \right\} = \left\{ \varphi_i \mid \mathbf{B}_{i+1/2} - \mathbf{B}_{i-1/2} \right\} + \Delta x \left\{ \varphi_i \mid \mathbf{S}_i \right\} \quad (4.16)$$

Par linéarité, on peut écrire :

$$\sum_{i=1}^N \frac{\partial e_i}{\partial t} \Delta x = \frac{\partial}{\partial t} \left[ \sum_{i=1}^N e_i \Delta x \right] = \frac{\partial E_{film}}{\partial t} \quad (4.17)$$

La variation temporelle de l'énergie linéique totale du film, s'obtient donc en sommant (B.10) sur l'ensemble des  $N$  cellules du domaine :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial E_{film}}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left\{ \varphi_i \mid \mathbf{F}_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2} \right\} \\ &= \sum_{i=1}^N \left\{ \varphi_i \mid \mathbf{B}_{i+1/2} - \mathbf{B}_{i-1/2} \right\} + \sum_{i=1}^N \left\{ \varphi_i \mid \mathbf{S}_i \right\} \Delta x \end{aligned} \quad (4.18)$$

Il reste maintenant à étudier séparément les trois derniers termes de l'équation (4.18).

#### Etude de la partie gauche du bilan (4.18)

En utilisant la relation (3.79) qui permet d'exprimer la force linéique  $\mathcal{L}_i$  en fonction de la densité d'énergie  $e_i$  dans la cellule  $i$  :

$$\mathcal{L}_i = \left\{ \varphi_i \mid \mathbf{U}_i \right\} - e_i \quad (4.19)$$

On peut montrer que la partie gauche de (4.18) peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned} \left\{ \varphi_i \mid \mathbf{F}_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2} \right\} &= \left[ (\bar{u} e)_{i+1/2} - (\bar{u} e)_{i-1/2} \right]_{1L} \\ &+ \left[ (\bar{u} \mathcal{L})_{i+1/2} - (\bar{u} \mathcal{L})_{i-1/2} \right]_{2L} \\ &+ \left[ -\bar{u}_{i+1/2}^- (e_{i+1} - e_i - \left\{ \varphi_i \mid \mathbf{U}_{i+1} - \mathbf{U}_i \right\}) \right]_{3L} \\ &+ \left[ \bar{u}_{i-1/2}^+ (e_{i-1} - e_i - \left\{ \varphi_i \mid \mathbf{U}_{i-1} - \mathbf{U}_i \right\}) \right]_{4L} \end{aligned} \quad (4.20)$$

où les flux  $(\bar{u} e)_{i+1/2}$  et  $(\bar{u} \mathcal{L})_{i+1/2}$  sont donnés par :

$$(\bar{u} e)_{i+1/2} = \bar{u}_{i+1/2}^+ e_i + \bar{u}_{i+1/2}^- e_{i+1} \quad (4.21a)$$

$$(\bar{u} \mathcal{L})_{i+1/2} = \frac{1}{2} (\bar{u}_{i+1} \mathcal{L}_i + \bar{u}_i \mathcal{L}_{i+1}) \quad (4.21b)$$

On voit clairement que les termes  $[ ]_{1L}$  et  $[ ]_{2L}$  de (4.20) ont la forme d'une différence de

flux entre deux interfaces. En supposant des conditions aux limites périodiques au bord du domaine, i.e. des flux aux interfaces  $1/2$  et  $N + 1/2$  égaux, on a :

$$\sum_{i=1}^N \{ [ ]_{1L} + [ ]_{2L} \} = 0 \quad (4.22)$$

En faisant l'hypothèse que la densité d'énergie du film est une fonction convexe des variables conservatives  $h$ ,  $p$  et  $\rho q$  (cette hypothèse sera discutée à la fin de la section), on a alors :

$$\forall i \in \llbracket 1; N \rrbracket, \quad \begin{aligned} e_{i+1} - e_i - \{ \varphi_i \mid \mathbf{U}_{i+1} - \mathbf{U}_i \} &\geq 0 \\ e_{i-1} - e_i - \{ \varphi_i \mid \mathbf{U}_{i-1} - \mathbf{U}_i \} &\geq 0 \end{aligned} \quad (4.23)$$

Les termes  $[ ]_{3L}$  and  $[ ]_{4L}$  de (4.20) sont donc positifs, soit

$$\sum_{i=1}^N \{ [ ]_{3L} + [ ]_{4L} \} \geq 0 \quad (4.24)$$

Et on vient donc de prouver que :

$$\sum_{i=1}^N \{ \varphi_i \mid \mathbf{F}_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2} \} \geq 0 \quad (4.25)$$

et donc que la discrétisation du flux du premier ordre est dissipative à condition que la densité surfacique d'énergie soit une fonction convexe des variables conservatives.

### Remarque 11

*La démonstration précédente peut se généraliser à une plus grande famille de schémas de discrétisation spatiale. Soit  $\mathbf{F}_{i+1/2}$  le flux du premier ordre discrétisé par :*

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \bar{u}_{i+1/2}^+ \mathbf{U}_i + \bar{u}_{i+1/2}^- \mathbf{U}_{i+1} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathcal{L}_{i+1/2} \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

*avec la vitesse moyenne  $\bar{u}_{i+1/2}$  à l'interface donnée par*

$$\bar{u}_{i+1/2} = \frac{\bar{u}_i + \bar{u}_{i+1}}{2} - \frac{(\alpha_u)_{i+1/2}}{2} (\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i) - \frac{(\alpha_\pi)_{i+1/2}}{2} (\mathcal{L}_{i+1} - \mathcal{L}_i) \quad (4.27)$$

*et la force linéique  $\mathcal{L}_{i+1/2}$  à l'interface donnée par*

$$\mathcal{L}_{i+1/2} = \frac{\mathcal{L}_i + \mathcal{L}_{i+1}}{2} - \frac{(\beta_u)_{i+1/2}}{2} (\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i) - \frac{(\beta_\pi)_{i+1/2}}{2} (\mathcal{L}_{i+1} - \mathcal{L}_i) \quad (4.28)$$

*où  $\alpha_u$ ,  $\alpha_\pi$ ,  $\beta_u$  et  $\beta_\pi$  sont des termes de décentrement pour la vitesse moyenne  $\bar{u}_{i+1/2}$  et la force linéique  $\mathcal{L}_{i+1/2}$ . On peut montrer que ce schéma est dissipatif à condition que les termes de décentrement vérifient :*

$$(\alpha_\pi)_{i+1/2} (\beta_u)_{i+1/2} \geq \frac{1}{4} [(\alpha_u)_{i+1/2} + (\beta_\pi)_{i+1/2}]^2 \quad (4.29)$$

$$(\alpha_\pi)_{i+1/2} + (\beta_u)_{i+1/2} \geq 0 \quad (4.30)$$

**Etude du premier terme de la partie droite du bilan** (4.18)

En développant le terme du second ordre de (4.18), on obtient :

$$\begin{aligned} \left\{ \varphi_i \mid \mathbf{B}_{i+1/2} - \mathbf{B}_{i-1/2} \right\} &= \left\{ \varphi_i \mid \frac{1}{\Delta x} \left[ \underline{\underline{A_{i+1/2}}} (\varphi_{i+1} - \varphi_i) - \underline{\underline{A_{i-1/2}}} (\varphi_i - \varphi_{i-1}) \right] \right\} \\ &= \frac{1}{\Delta x} \left[ \left\{ \varphi \mid \left( \underline{\underline{A}} \Delta \varphi \right) \right\}_{i+1/2} - \left\{ \varphi \mid \left( \underline{\underline{A}} \Delta \varphi \right) \right\}_{i-1/2} \right] \\ &\quad - \frac{1}{2\Delta x} \left[ \left\{ \Delta \varphi \mid \left( \underline{\underline{A}} \Delta \varphi \right) \right\}_{i+1/2} + \left\{ \Delta \varphi \mid \left( \underline{\underline{A}} \Delta \varphi \right) \right\}_{i-1/2} \right] \end{aligned} \quad (4.31)$$

où on a posé :

$$\left\{ \varphi \mid \left( \underline{\underline{A}} \Delta \varphi \right) \right\}_{i+1/2} = \left\{ \varphi_{i+1/2} \mid \left( \underline{\underline{A_{i+1/2}}} \Delta \varphi_{i+1/2} \right) \right\} \quad (4.32a)$$

$$\left\{ \Delta \varphi \mid \left( \underline{\underline{A}} \Delta \varphi \right) \right\}_{i+1/2} = \left\{ \Delta \varphi_{i+1/2} \mid \left( \underline{\underline{A_{i+1/2}}} \Delta \varphi_{i+1/2} \right) \right\} \quad (4.32b)$$

et où les variables  $\Delta \varphi_{i+1/2}$  et  $\varphi_{i+1/2}$  sont définies par :

$$\Delta \varphi_{i+1/2} = \varphi_{i+1} - \varphi_i, \quad \varphi_{i+1/2} = \frac{\varphi_{i+1} + \varphi_i}{2} \quad (4.33)$$

En utilisant la propriété d'antisymétrie de la matrices  $\underline{\underline{A_{i+1/2}}}$ , on a :

$$\forall i \in \llbracket 1; N \rrbracket, \quad \left\{ \Delta \varphi \mid \left( \underline{\underline{A}} \Delta \varphi \right) \right\}_{i+1/2} = 0 \quad (4.34)$$

Le terme discrétisé du second ordre s'écrit finalement :

$$\left\{ \varphi_i \mid \mathbf{B}_{i+1/2} - \mathbf{B}_{i-1/2} \right\} = \frac{1}{\Delta x} \left[ \left\{ \varphi \mid \left( \underline{\underline{A}} \Delta \varphi \right) \right\}_{i+1/2} - \left\{ \varphi \mid \left( \underline{\underline{A}} \Delta \varphi \right) \right\}_{i-1/2} \right] \quad (4.35)$$

et correspond à une différence de flux entre deux interfaces. On en déduit que :

$$\sum_{i=1}^N \left\{ \varphi_i \mid \mathbf{B}_{i+1/2} - \mathbf{B}_{i-1/2} \right\} = 0 \quad (4.36)$$

ce qui prouve la conservativité de la discrétisation du flux du second ordre.

**Etude du second terme de la partie droite du bilan** (4.18)

Dans le cas d'un plan horizontal ( $g^x = 0$ ) et en l'absence d'écoulement d'air ( $\frac{\partial P_g}{\partial x} = 0, \tau_i^x = 0$ ), seule la dissipation des forces visqueuses rentre en jeu, et on a :

$$\left\{ \varphi_i \mid \mathbf{S}_i \right\} = -\frac{3\mu (\bar{u}_i)^2}{(h_i + b)} \leq 0 \quad (4.37)$$

### 4.3.3 Conclusion du bilan énergétique discret

Nous avons démontré qu'en l'absence de forces motrices extérieures et sous la condition que la densité surfacique d'énergie du film soit une fonction convexe des variables  $h$ ,  $p$  et  $\rho q$ , que l'énergie linéique totale du film vérifie :

$$\frac{\partial E_{film}}{\partial t} = - \underbrace{\sum_{i=1}^N \{\varphi_i \mid \mathbf{F}_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2}\}}_{\leq 0} + \underbrace{\sum_{i=1}^N \{\varphi_i \mid \mathbf{S}_i\}}_{\leq 0} \Delta x \leq 0 \quad (4.38)$$

La condition de convexité a déjà été évoquée à la section 3.6 lorsque nous avons étudié l'hyperbolicité du système continu, et on comprend donc que la discrétisation du flux du premier ordre  $\mathbf{F}_{i+1/2}$  est dissipative lorsque le système est hyperbolique et ne l'est pas dans le cas contraire. Or, nous avons montré que la densité surfacique d'énergie de disjonction  $h \mapsto e_{disj}(h)$  est une fonction concave qui tend exponentiellement vers 0 quand  $h/h_*$  tend vers l'infini. Il en résulte que  $(h, p, \rho q) \mapsto e_{film}(h, p, \rho q)$  est une fonction convexe sauf dans un voisinage de  $h = 0$ . La démonstration ci-dessus ne permet donc de prouver la décroissance de l'énergie totale au niveau discret que pour un film totalement mouillant. Dans le cas d'un film partiellement mouillant pour lequel  $h$  tend vers 0 au voisinage du point triple dans certaines cellules du maillage, il n'est à priori pas exclu que le schéma puisse être instable au sens où l'énergie puisse croître.

Cependant, on rappelle que les forces visqueuses génèrent une dissipation du schéma donnée par (4.37) qui est inversement proportionnelle à  $h + b$ . Les forces visqueuses constituent donc un mécanisme stabilisateur fort, surtout au voisinage du point triple quand  $h$  tend vers 0, qui va atténuer les potentielles instabilités numériques liées à la concavité de la fonction  $e_{disj}(h)$ . Lors des simulations numériques, nous avons constaté qu'aucune instabilité n'apparaissait au voisinage du point triple à condition que la longueur de glissement  $b$  soit petite devant le rayon d'action moléculaire  $h_*$ . Cette condition ne pose pas de problème car nous verrons au chapitre suivant que le rayon d'action  $h_*$  a seulement besoin d'être pris petit par rapport aux épaisseurs de films loin du point triple ( $\sim mm$  ou  $\mu m$ ) afin de retrouver le comportement statique et dynamique d'un film à l'échelle macroscopique. Puisque la longueur de glissement  $b$  est un paramètre moléculaire ( $\sim nm$ ), on vérifiera donc toujours  $b \ll h_*$  en pratique.

## 4.4 Généralités sur la mise en oeuvre des calculs et des conditions aux limites

### 4.4.1 Définition des cellules fantômes

On rappelle que le domaine spatial est unidimensionnel et qu'il se décompose en  $N$  cellules de longueur  $\Delta x$  et d'indice  $i \in \llbracket 1; N \rrbracket$ . Afin de pouvoir modéliser des conditions aux limites aux bords du domaine, on introduit des cellules dites fictives (ou fantômes) d'indice  $i = 0$  et  $i = N + 1$  qui sont construites en effectuant respectivement une symétrie de la cellules d'indice  $i = 1$  et  $i = N$  par rapport au bord du domaine physique. On assigne à ces cellules fictives des variables conservatives  $\mathbf{U}_0 = {}^t(h_0, p_0, (\rho q)_0)$  et  $\mathbf{U}_{N+1} = {}^t(h_{N+1}, p_{N+1}, (\rho q)_{N+1})$  en fonction de la condition aux limites désirée.

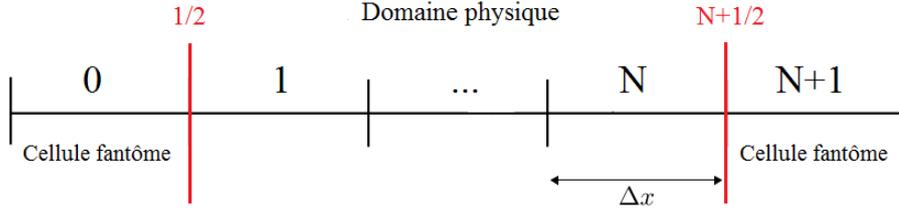


FIGURE 4.2 – Représentation du domaine spatial discrétisé, des cellules physiques, et des cellules fantômes.

#### 4.4.2 Initialisation de la variable conservative $p$ dans le domaine physique

La variable conservative  $p$ , qui est sensée être égale au gradient d'épaisseur du film  $h_x$ , est initialisée au début de la simulation par la dérivée centrée suivante :

$$\forall i \in \llbracket 1; N \rrbracket, \quad p_i = \frac{h_{i+1} - h_{i-1}}{2 \Delta x} \quad (4.39)$$

#### 4.4.3 Conditions aux bords du domaine

Différentes conditions aux limites peuvent être rencontrées selon le type de simulation réalisé. Dans le cas d'étude d'un liquide s'étalant sur un plan horizontal, nous prendrons généralement des conditions aux limites périodiques. Celles-ci sont satisfaites en imposant dans les cellules fantômes les relations suivantes :

$$\mathbf{U}_o = \mathbf{U}_N, \quad \mathbf{U}_{N+1} = \mathbf{U}_1 \quad (4.40)$$

Dans le cas d'étude d'un film liquide injecté sur le substrat, on imposera d'un côté (ici à gauche) une condition d'entrée et de l'autre côté (ici à droite) une condition de sortie, données par :

$$h_o = h_{inject}, \quad (\rho q)_o = \rho h_{inject} \bar{u}_{inject} \quad (4.41a)$$

$$h_{N+1} = h_N, \quad (\rho q)_{N+1} = (\rho q)_N \quad (4.41b)$$

avec  $h_{inject}$  l'épaisseur de la fente d'injection et  $\bar{u}_{inject}$  la vitesse moyenne du liquide injecté. Afin de s'assurer que les variables  $p_o$  et  $p_{N+1}$  représentent bien une discrétisation de  $h_x$  aux bords du domaine, on impose qu'elles vérifient :

$$p_{1/2} = (h_x)_{1/2} = \frac{h_1 - h_o}{\Delta x}, \quad p_{N+1/2} = (h_x)_{N+1/2} = \frac{h_{N+1} - h_N}{\Delta x} \quad (4.42)$$

En utilisant l'approximation discrète au centre des faces limites suivante :

$$p_{1/2} = \frac{1}{2} (p_o + p_1), \quad p_{N+1/2} = \frac{1}{2} (p_N + p_{N+1}) \quad (4.43)$$

Les variables  $p_o$  et  $p_{N+1}$  au centre des cellules fantômes valent

$$p_o = 2 \underbrace{\frac{h_1 - h_o}{\Delta x}}_{p_{1/2} = (h_x)_{1/2}} - p_1, \quad p_{N+1} = 2 \underbrace{\frac{h_{N+1} - h_N}{\Delta x}}_{p_{N+1/2} = (h_x)_{N+1/2}} - p_N \quad (4.44)$$

#### 4.4.4 Définition et évaluation du point triple macroscopique

Afin d'évaluer numériquement l'angle de contact apparent  $\theta_{num}$  entre l'interface et le substrat au voisinage du point triple, nous ne calculons pas la tangente entre le liquide et le substrat en  $h = 0$ . En effet, nous verrons que le profil d'épaisseur du film rejoint le substrat avec une pente nulle ( $h_x = 0$ ) en raison de l'influence des forces moléculaires. À la place, on calcule la tangente au point d'inflexion d'abscisse  $x_\theta$  pour obtenir l'angle de contact apparent donné par

$$\theta_{num} = \tan^{-1} \left[ \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)_{(x=x_\theta)} \right] \quad (4.45)$$

comme représenté sur la figure 4.3. La position du point triple macroscopique  $x_{CP}$  est alors obtenu par la reconstruction linéaire suivante :

$$x_{CP} = x_\theta - \frac{h(x_\theta)}{\tan(\theta_{num})} \quad (4.46)$$

Et la vitesse d'avancement du point triple (ou vitesse d'étalement) est calculé par

$$V_{CP} = \frac{\Delta x_{CP}}{\Delta t} \quad (4.47)$$

avec  $\Delta x_{CP}$  le déplacement du point triple au cours d'un pas de temps de simulation  $\Delta t$ .

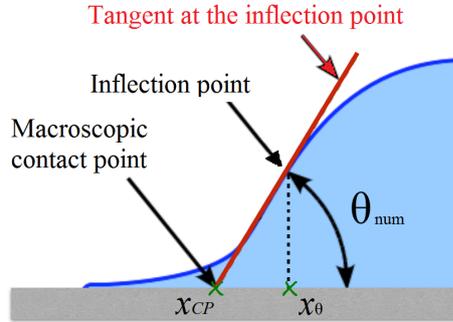


FIGURE 4.3 – Profil d'épaisseur d'un film liquide au voisinage du point triple. L'angle  $\theta_{num}$  représente l'angle de contact apparent mesuré lors d'une simulation,  $x_\theta$  est l'abscisse du point d'inflexion, et  $x_{CP}$  est l'abscisse du point triple macroscopique reconstruit linéairement.

# Chapitre 5

## Validations

Dans ce chapitre, nous réalisons des simulations numériques 2D en utilisant le système augmenté de type Saint Venant (3.51) avec la discrétisation proposée au chapitre 4. Pour chaque cas et pour chaque pas de maillage  $\Delta x$ , nous donnerons le pas de temps  $\Delta t$  maximal que nous avons pu utilisé tout en garantissant une simulation numériquement stable. Nous pourrons ainsi évaluer la contrainte qu'impose le maillage sur le pas de temps dans le cadre d'une discrétisation implicite, et la comparer à celle d'une discrétisation explicite (prédite en  $\Delta t \sim \Delta x^2$ ).

D'abord, nous allons vérifier la capacité de notre modèle à reproduire des configurations à volume constant. Nous étudierons la dépendance de l'étalement d'une goutte sur un plan horizontal en fonction du paramètre  $h_*$  qui permet d'ajuster le rayon d'action des forces moléculaires au voisinage du point triple, de la longueur de glissement  $b$ , et du pas de maillage  $\Delta x$ . L'objectif est de déterminer le calibrage de ces trois paramètres afin de retrouver la surface mouillée, donnée recherchée dans le cadre de la modélisation des systèmes de dégivrage. Nous validerons des étalements statiques à la section 5.1 et des étalements dynamiques à la section 5.2. Nous présentons également une étude comparative entre notre modèle et ceux utilisés dans la littérature qui utilisent une approximation onde longue de la courbure de la surface libre ( $K^{xz} \simeq -\partial^2 h / \partial x^2$ ).

Ensuite, nous présentons à la section 5.3 des simulations numériques de film liquide injecté sur un plan incliné. L'influence du trio de paramètres  $(h_*, b, \Delta x)$  sur le profil d'épaisseur est à nouveau étudiée, et nous vérifions que nous retrouvons des résultats de la littérature.

Enfin, nous vérifions à la section 5.4 que le modèle discrétisé est capable de reproduire les régimes instables obtenus via l'analyse de stabilité de notre modèle à la section 3.5, et nous discuterons de l'importance de bien choisir le paramètre  $h_*$  pour ne pas fausser la stabilité d'un film d'épaisseur macroscopique.

### Sommaire

---

<b>5.1</b>	<b>Position d'équilibre statique d'un film bidimensionnel . . . . .</b>	<b>130</b>
5.1.1	Film liquide soumis à la gravité . . . . .	130
5.1.2	Film liquide en micro-gravité . . . . .	137
<b>5.2</b>	<b>Etude en dynamique de l'étalement d'un film 2D . . . . .</b>	<b>141</b>
5.2.1	Cas d'un film totalement mouillant . . . . .	141
5.2.2	Cas d'un film partiellement mouillant . . . . .	147
5.2.3	Discussion des résultats . . . . .	150

<b>5.3</b>	<b>Film liquide injecté sur un plan incliné</b>	<b>150</b>
5.3.1	Intérêt de l'étude	150
5.3.2	Données numériques et expérimentales	151
5.3.3	Cas totalement mouillant	152
5.3.4	Cas partiellement mouillant	154
5.3.5	Discussion des résultats	158
<b>5.4</b>	<b>Comparaison Simulation/LSA 2D</b>	<b>158</b>
<b>5.5</b>	<b>Conclusion du chapitre</b>	<b>160</b>

## 5.1 Position d'équilibre statique d'un film bidimensionnel sur un plan horizontal

On souhaite vérifier dans cette section que le modèle proposé est capable de retrouver le profil théorique d'un film à l'équilibre sur un plan horizontal. On s'intéresse à deux cas d'étude académiques : le film liquide soumis à la gravité et en micro-gravité.

### 5.1.1 Film liquide soumis à la gravité

#### Données numériques et expérimentales

On considère un film liquide initialisé à  $t = 0$  avec un profil d'épaisseur parabolique donné par

$$\forall i \in [1; N], h(x_i, 0) = \max \left[ \sqrt{\max \left[ \frac{R_i^2}{\sin^2(\theta_i)} - x_i^2, 0 \right]} - \frac{R_i}{\tan(\theta_i)}, 0 \right] \quad (5.1)$$

avec  $R_i = 10^{-2}m$  le rayon initial de la goutte et  $\theta_i = 80^\circ$  l'angle de contact initial entre le liquide et le substrat. Les propriétés du liquide, proches de celles de l'huile de silicone très utilisé dans les études expérimentales, sont

TABLE 5.1 – Propriétés à température ambiante du liquide étudié.

Liquide	$\rho$ ( $kg.m^{-3}$ )	$\nu$ ( $m^2.s^{-1}$ )	$\gamma_{lg}$ ( $N.m$ )
Huile de silicone	1000	$10^{-5}$	0,03

On suppose que le liquide forme un angle de contact statique  $\theta_s = 60^\circ$  avec le substrat à l'équilibre. Enfin, la longueur de glissement  $b$  est fixée à  $10^{-8}m$ . La valeur de ce paramètre dynamique n'a pas d'importance puisque l'objectif de cette étude est seulement d'analyser des profils stationnaires. Le profil théorique d'équilibre, schématisé sur la figure 5.1, peut se calculer numériquement (voir [13] pour plus de détails), il a une forme de flaque caractérisée par une épaisseur  $h_{puddle} = 1.749 \times 10^{-3}m$  loin du point triple et par un étalement  $W_s = 6.598 \times 10^{-2}m$ . L'étalement de la zone où le film liquide passe de  $h = 0$  à  $h = h_{puddle}$  est de l'ordre de la longueur capillaire  $l_c$ .

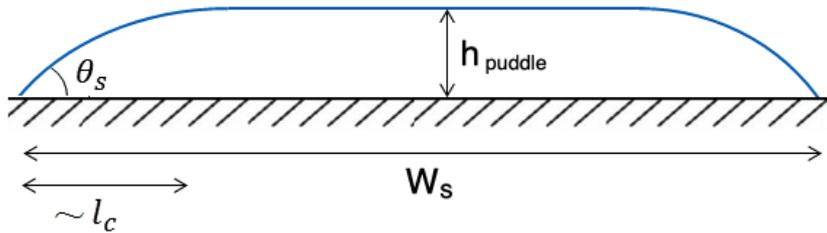


FIGURE 5.1 – Représentation schématique d'un film liquide à l'équilibre sur un plan horizontal.

Un exemple de simulation numérique est montré sur la figure 5.2.

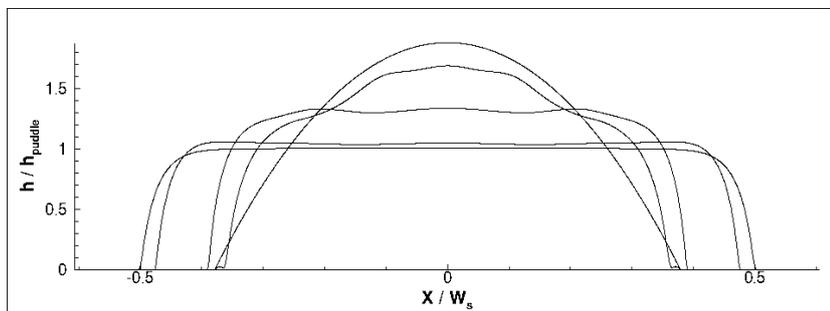
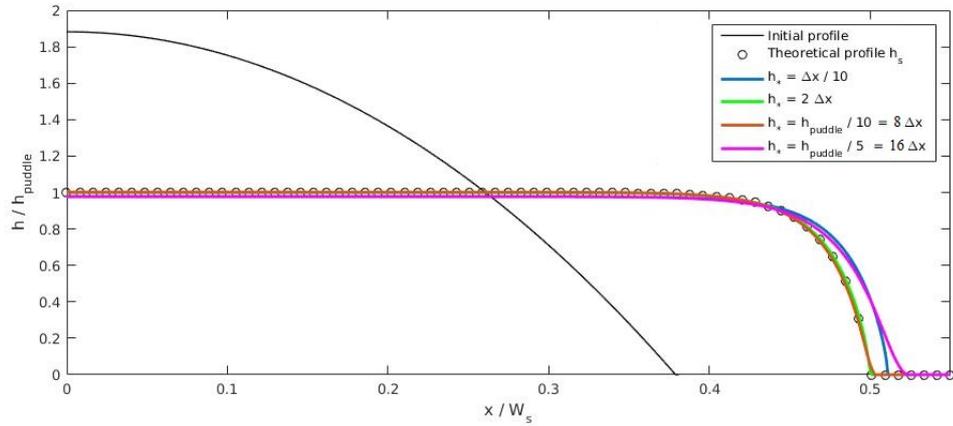


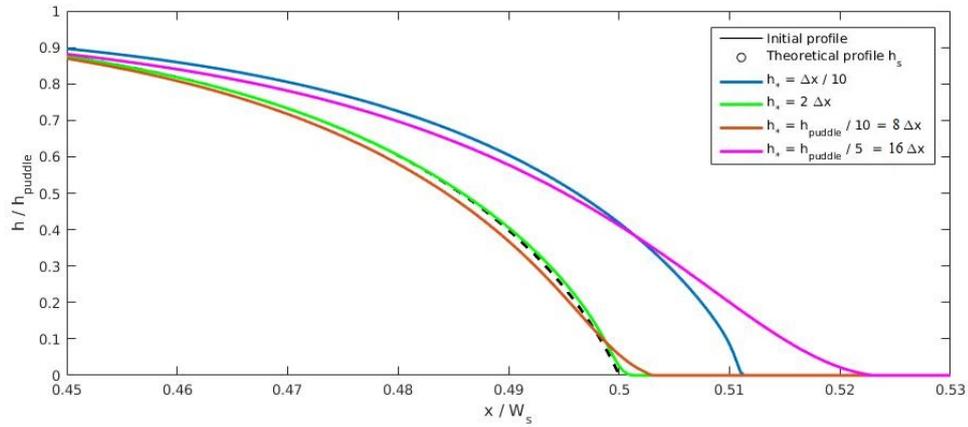
FIGURE 5.2 – Simulation numérique obtenue avec  $\Delta t = 10^{-4} s$ ,  $\Delta x = 2.22 \times 10^{-5} m$ ,  $h_* = 1.749 \times 10^{-4} m$  et  $b = 10^{-8} m$ . Les profils d'épaisseur sont tracés aux instants  $t = 0, 0.05, 0.1, 0.25, 1 s$ . L'épaisseur du film  $h$  et l'abscisse  $x$  sont respectivement adimensionnés par l'épaisseur  $h_{puddle}$  et par l'étalement  $W_s$  du profil théorique à l'équilibre.

### Influence du paramètre $h_*$ à pas de maillage $\Delta x$ fixé

On s'intéresse dans un premier temps uniquement à l'influence du paramètre  $h_*$ , qui joue le rôle de rayon d'action moléculaire, sur le profil d'équilibre. Le pas de maillage est fixé à  $\Delta x = 2.22 \times 10^{-5} m$ , petit par rapport à la longueur capillaire  $l_c = 1.749 \times 10^{-3} m$  du liquide. On garantit ainsi que la zone où l'épaisseur du film passe de  $h = 0$  à  $h = h_{puddle}$  est bien modélisée. La simulation numérique est arrêtée à  $t = 10 s$  où on considère que le film a atteint son état d'équilibre car la vitesse d'étalement est très faible ( $V_{CP} < 10^{-6} m.s^{-1}$ ). Nous allons comparer l'angle de contact apparent  $\theta_{num}$  et l'étalement du liquide  $W_{num} = 2 x_{CP}$  obtenus par simulation numérique respectivement avec l'angle de contact statique  $\theta_s$  et l'étalement théorique  $W_s$ . La figure 5.3a montre que les profils d'épaisseur à l'équilibre pour différentes valeurs de  $h_*$  ont tous une forme de flaque. Par contre, on constate sur la figure 5.3b que les profils diffèrent au voisinage du point triple. En effet, ils se rapprochent du profil théorique quand le paramètre  $h_*$  diminue jusqu'à une certaine limite.



(a) Vue globale de l'épaisseur



(b) Vue au voisinage du point triple de l'épaisseur

FIGURE 5.3 – Profil à l'équilibre de l'épaisseur  $h(x)$  en fonction du paramètre  $h_*$ . L'épaisseur du film  $h(x)$  et l'abscisse  $x$  sont respectivement adimensionnés par l'épaisseur  $h_{puddle}$  et par l'étalement  $W_s$  du profil théorique à l'équilibre.

Ces observations sont confirmées par les erreurs, tracées sur la figure 5.4 et regroupées dans le tableau 5.3, sur l'angle de contact  $\theta_{num}$  et l'étalement  $W_{num}$ . Elles diminuent toutes avec le paramètre  $h_*$ . Par contre, si  $h_*$  est pris trop petit par rapport au pas de maillage  $\Delta x$ , les erreurs augmentent.

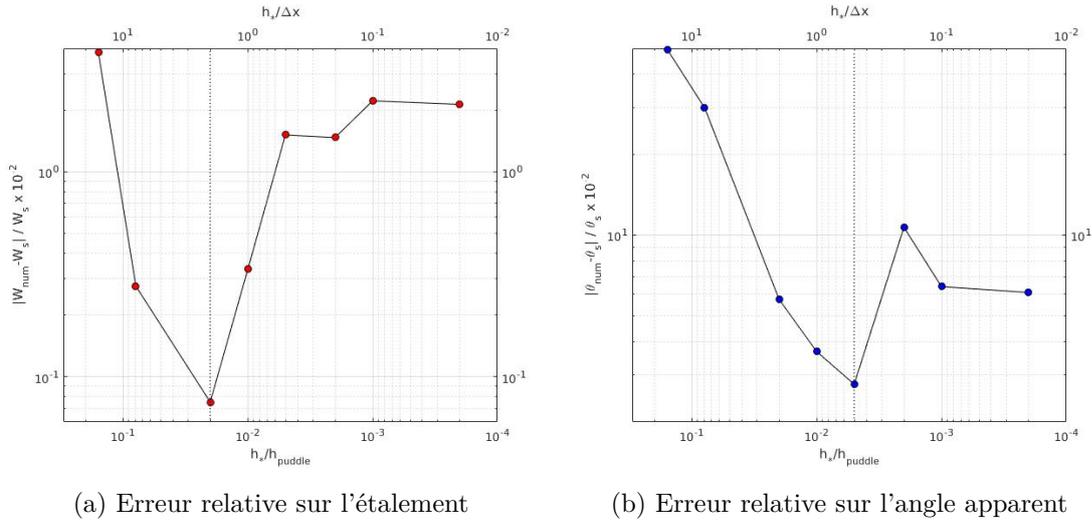


FIGURE 5.4 – Influence du rayon d'action  $h_*$  sur l'étalement et l'angle de contact apparent à l'équilibre. Les données sont regroupées dans le tableau 5.3.

TABLE 5.2 – Evolution de l'angle  $\theta_{num}$ , de l'étalement  $W_{num}$ , et de l'erreur  $E_{h_*}$  obtenus numériquement à  $t = 10s$  en fonction du paramètre  $h_*$ . Le pas de maillage est fixé à  $\Delta x = 2.22 \times 10^{-5} m$ . Le pas de temps est de  $\Delta t = 10^{-4} s$  pour l'ensemble des simulations.

$h_*$ (m)	$\frac{h_*}{h_{puddle}}$	$\frac{h_*}{\Delta x}$	$\frac{ \theta_{num} - \theta_s }{\theta_s} \times 10^{-2}$	$\frac{ W_{num} - W_s }{W_s} \times 10^{-2}$
$3,498 \times 10^{-4}$	1/5	$\simeq 16$	49,56	3,815
$1,749 \times 10^{-4}$	1/10	$\simeq 8$	29,9	0,276
$4,44 \times 10^{-5}$	$\simeq 1/40$	2	5,74	0,075
$2,22 \times 10^{-5}$	$\simeq 1/80$	1	3,67	0,333
$1,11 \times 10^{-5}$	$\simeq 1/160$	1/2	2,77	1,51
$4,44 \times 10^{-6}$	$\simeq 1/400$	1/5	10,7	1,4671
$2,22 \times 10^{-6}$	$\simeq 1/800$	1/10	6,42	2,218
$4,44 \times 10^{-7}$	$\simeq 1/4000$	1/50	6,1	2,131

Ces résultats sont cohérents car en traçant l'évolution de la force linéique de disjonction  $F^d(x)$  sur la figure 5.5, on voit que l'étalement des forces moléculaires au voisinage du point triple diminue avec  $h_*$ . Par contre si  $h_*$  devient petit par rapport au pas de maillage  $\Delta x$ , ces forces ne sont plus régularisées (car sous-résolues à l'échelle du maillage) et apparaissent comme discontinues. Elles peuvent donc conduire à des résultats moins précis dans le voisinage de la ligne triple. Ce manque de précision peut toutefois être relativisé car les résultats montrent que l'étalement (donnée principale recherchée dans les applications visées) est retrouvé avec une erreur de moins de 3% et ceux, même pour un rayon d'action  $h_*$  50 fois plus petit que le pas de maillage  $\Delta x$ . La bonne représentation de l'étalement statique ne semble donc pas vraiment dépendre de la résolution du maillage.

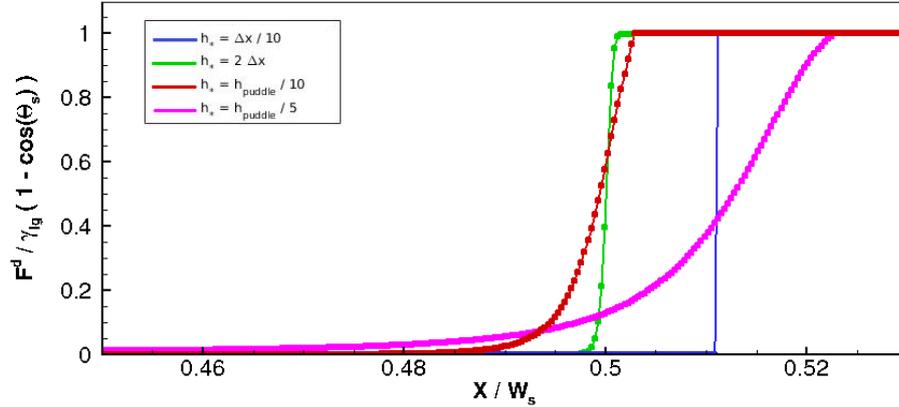


FIGURE 5.5 – Vue au voisinage du point triple de la force linéique de disjonction  $F^d(x)$  adimensionnée par  $\gamma_{lg} [1 - \cos(\theta_s)]$ .

En conclusion, si nous souhaitons retrouver très fidèlement le profil d'équilibre à des échelles beaucoup plus petites que celles macroscopiques, il faut faire tendre  $h_*$  et  $\Delta x$  vers 0. En effet, l'angle de contact statique  $\theta_s$  est d'autant mieux retrouvé que la régularisation des forces moléculaires est faiblement étalée, et le pas de maillage doit pouvoir capturer ce phénomène physique. Par contre, si nous souhaitons seulement retrouver les caractéristiques macroscopiques du profil d'équilibre, tel que sa surface d'étalement, il suffit de prendre  $h_* = h_{puddle}/10$ . Les forces moléculaires seront trop étalées pour retrouver l'angle de contact statique  $\theta_s$ , mais suffisamment peu étalées pour retrouver le bon bilan de force et surtout le bon bilan d'énergie à l'échelle macroscopique. En effet, nous avons montré à la section 3.3 que l'énergie totale du film associée au modèle continu proposé était décroissante dans une configuration sans forces extérieures (cas étudié ici). Par conséquent, le film ne peut évoluer que vers un état stationnaire qui va minimiser son énergie totale, et ce, indépendamment de la bonne représentation ou non des forces moléculaires à l'échelle du maillage.

#### Remarque 12

*En pratique, pour des simulations dans un cadre académique où des maillages très fins peuvent être utilisés, nous prendrons toujours la plus petite valeur de  $h_*$  possible dans la limite de temps de calcul raisonnable, car nous devons respecter  $\Delta x \simeq h_*$  pour garantir la convergence numérique des forces moléculaires. Pour des applications industrielles, nous prendrons plutôt  $h_* \leq h_o/10$ , avec  $h_o$  l'ordre de grandeur de l'épaisseur du film loin du point triple. Bien que nous ne respecterons par nécessairement la condition  $\Delta x \leq h_o$  et à fortiori  $\Delta x \simeq h_*$ , la surface d'étalement stationnaire sera tout de même bien retrouvée.*

#### Convergence en maillage

On étudie maintenant l'influence du pas de maillage  $\Delta x$  sur la solution stationnaire à paramètre  $h_* = h_{puddle}/10$  fixé. L'intérêt de cette étude est de vérifier qu'il existe un pas de maillage  $\Delta x$  à partir duquel la solution calculée numériquement ne varie plus. Afin de

vérifier la convergence en maillage du modèle, nous calculons la norme suivante :

$$\begin{aligned} E_h(\Delta x) &= \left( \frac{1}{l} \int_{-l/2}^{l/2} \left| \frac{h_{\Delta x}(x, 10) - h_s(x)}{h_{puddle}} \right|^2 dx \right)^{1/2} \\ &= \left( \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{N=l/\Delta x} \left| \frac{h_{\Delta x}(x_i, 10) - h_s(x_i)}{h_{puddle}} \right|^2 \Delta x \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (5.2)$$

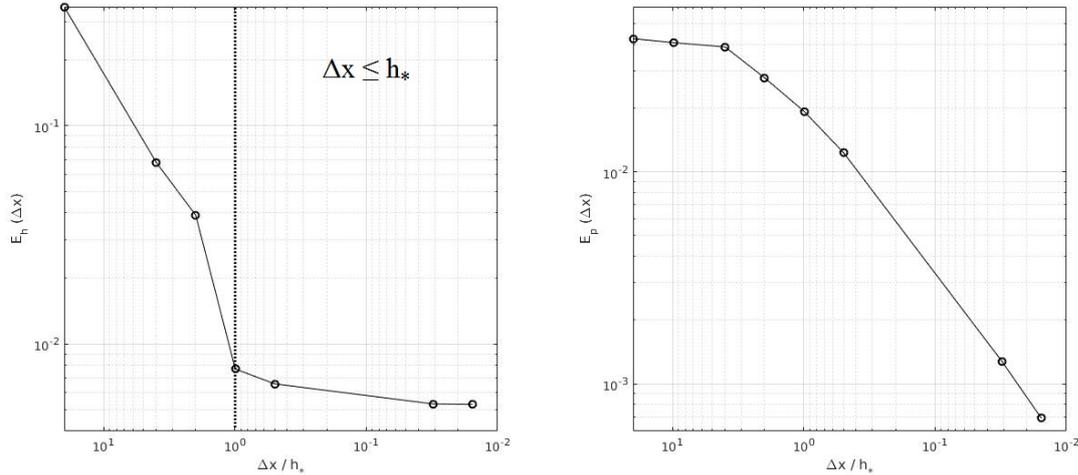
qui évalue à  $t = 10s$  l'écart entre le profil  $h_{\Delta x}(x, 10)$  obtenu par simulation numérique avec un pas de maillage  $\Delta x$  et le profil théorique d'équilibre  $h_s(x)$ . Nous introduisons également une autre norme :

$$\begin{aligned} E_p(\Delta x) &= \left( \frac{1}{l} \int_{-l/2}^{l/2} \left| p_{\Delta x}(x, 10) - \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)_{\Delta x}(x, 10) \right|^2 dx \right)^{1/2} \\ &= \left( \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{N=l/\Delta x} \left| p_{\Delta x}(x_i, 10) - \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)_{\Delta x}(x_i, 10) \right|^2 \Delta x \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (5.3)$$

qui évalue à  $t = 10s$  l'écart entre la variable  $p_{\Delta x}$  obtenu par simulation numérique avec un pas de maillage  $\Delta x$  et sa valeur théorique  $(\partial h / \partial x)_{\Delta x}$  égale à la dérivée spatiale de l'épaisseur du film

$$\left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)_{\Delta x} = \frac{h(x_{i+1}) - h(x_{i-1}))}{2 \Delta x} \quad (5.4)$$

L'évolution de ces deux normes en fonction du pas maillage est tracée sur la figure 5.6.



(a) Convergence de la norme  $E_h(\Delta x)$ .

(b) Convergence de la norme  $E_p(\Delta x)$ .

FIGURE 5.6 – Evolution de différentes normes  $L^2$  en fonction du pas de maillage  $\Delta x$  uniforme. Une échelle logarithmique est utilisée.

TABLE 5.3 – Evolution de l'angle  $\theta_{num}$ , de l'étalement  $W_{num}$ , et de l'erreur  $E_{h_*}$  obtenus numériquement à  $t = 10s$  en fonction du pas de maillage  $\Delta x$ . Le rayon d'action  $h_*$  est fixé à  $\Delta x = 1.749 \times 10^{-4} m$ . Le pas de temps moyen  $\Delta t$  est d'environ  $10^{-4} s$ .

$\Delta x$ (m)	$\frac{\Delta x}{h_*}$	$\frac{\Delta x}{h_{puddle}}$	$\frac{ W_{num} - W_s }{W_s} \times 10^{-2}$	$E_h \times 10^{-2}$	$E_p \times 10^{-2}$
$2,733 \times 10^{-6}$	1/64	$\simeq 1/640$	$4,774 \times 10^{-1}$	$5,3 \times 10^{-1}$	$6,9 \times 10^{-2}$
$5,466 \times 10^{-6}$	1/32	$\simeq 1/320$	$4,82 \times 10^{-1}$	$5,33 \times 10^{-1}$	$1,28 \times 10^{-1}$
$8,742 \times 10^{-5}$	1/2	$\simeq 1/20$	$4,471 \times 10^{-1}$	$6,58 \times 10^{-1}$	1,23
$1,749 \times 10^{-4}$	1	$\simeq 0,1$	$3,668 \times 10^{-1}$	$7,69 \times 10^{-1}$	1,93
$3,498 \times 10^{-4}$	2	$\simeq 0,2$	$8,715 \times 10^{-1}$	3,89	2,77
$6,996 \times 10^{-4}$	4	$\simeq 0,4$	4,655	6,79	3,88
$3,748 \times 10^{-3}$	10	$\simeq 0,2$	$1,478 \times 10^1$	–	4,07
$1,749 \times 10^{-2}$	20	$\simeq 1$	$2,463 \times 10^1$	$3,48 \times 10^1$	4,25

On voit que les deux normes  $E_h(\Delta x)$  et  $E_p(\Delta x)$  diminuent de façon monotone avec le pas de maillage  $\Delta x$ . De plus, on constate qu'à partir de  $\Delta x = h_*$ , la norme  $E_h(\Delta x)$  varie très peu, traduisant qu'il n'est pas nécessaire de raffiner davantage le maillage. En effet, à partir de  $\Delta x = h_*$ , les forces moléculaires sont bien discrétisées. Un maillage plus fin n'apporte donc que très peu de précision supplémentaire au voisinage du point triple.

Si on s'intéresse à présent à l'évolution de l'étalement stationnaire du film en fonction de  $\Delta x$ , on constate que celui-ci est toujours bien retrouvé, et ce même pour des pas de maillage du même ordre que l'épaisseur  $h_{puddle}$  du film. En effet, bien que l'erreur de 25 % avec le pas de maillage le plus grossier  $\Delta x = h_{puddle}$  semble grande, on voit sur la figure 5.7 que l'étalement est en fait retrouvé à l'échelle du maillage. On en vient à la même conclusion formulée au paragraphe précédent que l'étalement stationnaire est toujours bien retrouvé indépendamment du pas de maillage utilisé.

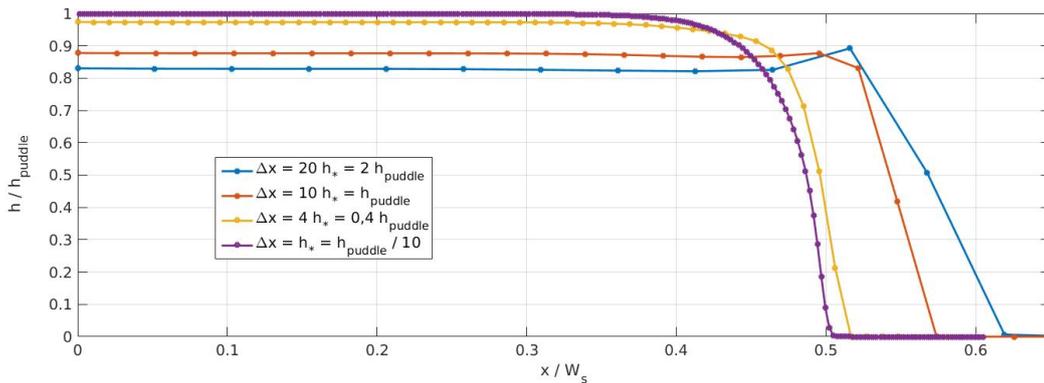


FIGURE 5.7 – Vue au voisinage du point triple du profil à l'équilibre de l'épaisseur  $h(x)$  en fonction du pas de maillage  $\Delta x$ . L'épaisseur du film  $h(x)$  et l'abscisse  $x$  sont respectivement adimensionnés par l'épaisseur  $h_{puddle}$  et par l'étalement  $W_s$  du profil théorique à l'équilibre.

**Remarque 13**

Au fil de cette section, nous avons démontré deux résultats très importants qui nous permettent à présent de valider une hypothèse forte de notre modèle, qui a servi à construire notre modèle de forces moléculaires, et qui s'écrit :

$$p \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0 \quad (5.5)$$

En effet, on voit clairement sur la figure 5.3b que le profil d'épaisseur du film a une forme circulaire au voisinage du point triple qui transitionne continûment d'une pente nulle en  $h = 0$  à une pente maximale au point d'inflexion. On a donc :

$$h_x \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0 \quad (5.6)$$

De plus, nous constatons sur la figure 5.6b que la norme  $E_p(\Delta x)$ , qui évalue l'écart entre  $p$  et  $h_x$ , est faible et diminue monotonement avec le maillage. On vérifie donc  $p = h_x$  et par conséquent l'hypothèse (5.5).

**5.1.2 Film liquide en micro-gravité****Présentation de l'étude**

Nous souhaitons vérifier que le modèle proposé dans ce travail est capable de retrouver le profil d'équilibre d'un film en micro-gravité ( $g = 0 \text{ m.s}^{-2}$ ) pour n'importe quel angle de contact statique  $\theta_s$ , même proche de  $90^\circ$ . Nous souhaitons également démontrer que ce modèle constitue une amélioration de ceux généralement utilisés dans la littérature avec l'approximation onde longue des termes capillaires. Si nous appliquons cette approximation à notre modèle, soit :

$$p \ll 1, \quad \theta_s \ll 1 \quad (5.7)$$

alors la densité d'énergie de disjonction s'écrit :

$$e_{disj}(h) \simeq -\gamma_l g \left( \frac{\theta_s^2}{2} \right) e^{-h/h_*} \quad (5.8)$$

et la force linéique du bilan de quantité de mouvement (3.51c) devient :

$$\mathcal{F}(h, p) \simeq \rho g^z \frac{h^2}{2} - \gamma_{sl} - \gamma_l g \left[ 1 - \frac{p^2}{2} \right] - \gamma_l g h \left( \frac{\partial p}{\partial x} \right) + \gamma_l g \left( \frac{\theta_s^2}{2} \right) \left[ 1 + \frac{h}{h_*} \right] e^{-\frac{h}{h_*}} \quad (5.9)$$

Nous allons ainsi comparer les simulations numériques de notre modèle avec et sans approximation onde longue des termes capillaires.

**Données numériques et expérimentales**

On considère toujours un film liquide initialisé à  $t = 0$  avec un profil d'épaisseur parabolique. Son rayon initial est  $R_i = 5 \times 10^{-3} \text{ m}$  et il forme un angle de contact initial  $\theta_i$  entre le liquide et le substrat. Les propriétés du liquide sont celles de l'eau à température ambiante

TABLE 5.4 – Propriétés à température ambiante du liquide étudié.

Liquide	$\rho$ ( $kg.m^{-3}$ )	$\nu$ ( $m^2.s^{-1}$ )	$\gamma_{lg}$ ( $N.m$ )
Eau	1000	$10^{-6}$	0,068

Le liquide n'est pas soumis à la gravité et on suppose que l'on connaît l'angle de contact  $\theta_s$  qu'il forme à l'équilibre avec le substrat. Le profil théorique à l'équilibre d'un film en micro-gravité est connu [13], il a une forme parabolique de même surface  $A$  que le profil initial et est donné par :

$$\forall x, h_s(x) = \max \left[ \sqrt{\max \left[ \frac{R_s^2}{\sin^2(\theta_s)} - x^2, 0 \right]} - \frac{R_s}{\tan(\theta_s)}, 0 \right] \quad (5.10a)$$

$$R_s = \sin(\theta_s) \sqrt{\frac{2A}{2\theta_s - \sin(2\theta_s)}} \quad (5.10b)$$

Plusieurs simulations numériques avec des angles de contact initiaux  $\theta_i$  et de contact statique  $\theta_s$  différents ont été réalisées. Nous avons simulé deux configurations de mouillage en prenant le couple d'angle  $(\theta_i, \theta_s)$  égal à  $(45^\circ, 15^\circ)$  et  $(45^\circ, 30^\circ)$ , et trois configurations de démouillage avec les couples  $(30^\circ, 45^\circ)$ ,  $(30^\circ, 60^\circ)$  et  $(30^\circ, 80^\circ)$ . Chaque simulation numérique est arrêtée à l'instant où on considère que le film a atteint son état d'équilibre car la vitesse d'étalement est très faible. Un exemple de simulation numérique est montré sur la figure 5.8.

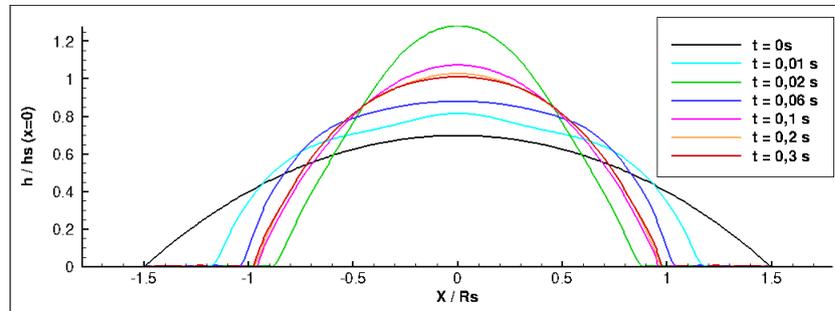


FIGURE 5.8 – Simulation numérique du cas  $(\theta_i, \theta_s) = (30^\circ, 60^\circ)$  obtenue avec  $\Delta t = 2.0 \times 10^{-4}$  s,  $\Delta x = 2.5 \times 10^{-5}$  m,  $h_* = 3.75 \times 10^{-5}$  m et  $b = \times 10^{-6}$  m. L'épaisseur du film  $h$  et l'abscisse  $x$  sont respectivement adimensionnés par l'épaisseur  $h_s(x=0)$  et par le rayon  $R_s$  du profil parabolique théorique à l'équilibre.

Afin de modéliser correctement les forces moléculaires au voisinage du point triple, nous choisissons pour chaque simulation un couple de paramètres  $(h_*, \Delta x)$  qui respecte les conditions déterminées à l'étude précédente, soit :

$$h_* \leq h_o/10, \quad \Delta x \leq h_* \quad (5.11)$$

où  $h_o$  représente dans ce cas d'étude l'épaisseur maximale du profil théorique d'équilibre qui vaut :

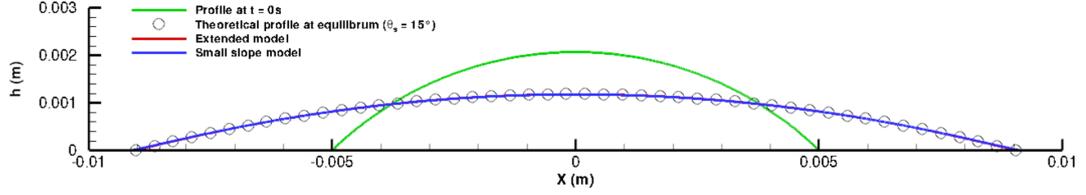
$$h_o = h_s(x=0) = R_s \left( \frac{1}{\sin(\theta_s)} - \frac{1}{\tan(\theta_s)} \right) \quad (5.12)$$

### Résultats de simulation numérique

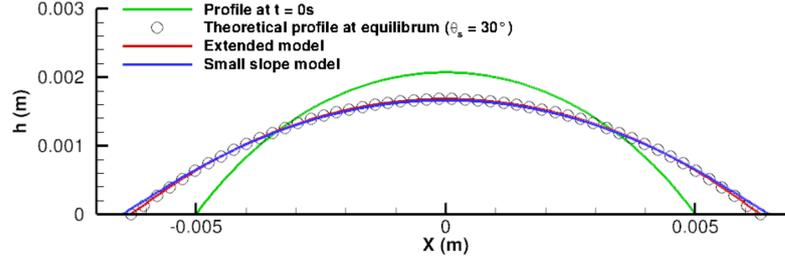
La figure 5.9 présente les profils de film à l'équilibre obtenus par simulation numérique pour différents couples d'angles  $(\theta_i, \theta_s)$ . On remarque que tant que l'angle de contact statique  $\theta_s$  reste inférieur à  $30^\circ$ , les profils obtenus avec ("Small slope model" en bleu) ou sans ("Extended model" en rouge) approximation onde longue des termes capillaires sont superposés. Les différences sont plus significatives pour des angles  $\theta_s$  plus élevés. Alors que le modèle sans approximation retrouve correctement le profil théorique d'équilibre même pour des cas très peu mouillants ( $\theta_s = 80^\circ$ ), le modèle approché s'éloigne grandement de la solution attendue. On voit en effet dans le tableau 5.5 que l'erreur sur la surface mouillée passe de 3,58% à 24,2% entre  $\theta_s = 30^\circ$  et  $\theta_s = 80^\circ$  avec le modèle onde longue, alors que cette erreur ne dépasse jamais 3% avec le modèle proposé dans ce travail.

TABLE 5.5 – Evolution de l'angle apparent  $\theta_{num}$  et de l'étalement  $x_{CP}$  obtenus par simulation numérique en fonction du couple d'angle  $(\theta_i, \theta_s)$ .

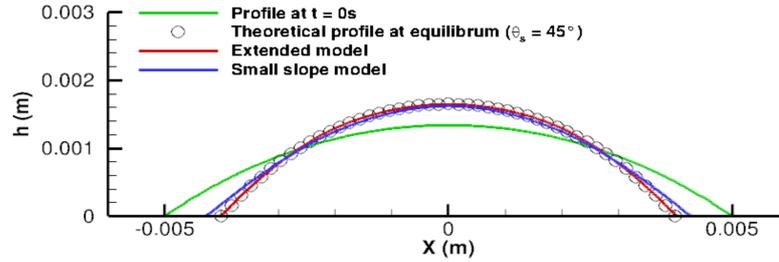
$(\theta_i, \theta_s)$	$h_* \times 10^{-5}$ (m)	$\Delta t$ (s)	$\Delta x$ (m)	$\frac{ \theta_{num} - \theta_s }{\theta_s}$	$\frac{ x_{CP} - R_s }{R_s}$
Modèle augmenté de type Saint Venant (3.51)					
$(45^\circ, 15^\circ)$	2,5			$8,87 \times 10^{-2}$	$1,09 \times 10^{-2}$
$(45^\circ, 30^\circ)$	2,5			$8,0 \times 10^{-2}$	$0,795 \times 10^{-2}$
$(30^\circ, 45^\circ)$	3,75	$2,0 \times 10^{-4}$	$2,5 \times 10^{-5}$	$8,89 \times 10^{-2}$	$1,23 \times 10^{-2}$
$(30^\circ, 60^\circ)$	3,75			$2,33 \times 10^{-2}$	$2,22 \times 10^{-2}$
$(30^\circ, 80^\circ)$	7,5			$9,5 \times 10^{-2}$	$1,38 \times 10^{-2}$
Modèle augmenté (3.51) avec approximation onde longue (5.9)					
$(45^\circ, 15^\circ)$	2,5			$1,09 \times 10^{-1}$	$1,25 \times 10^{-2}$
$(45^\circ, 30^\circ)$	2,5			$1,62 \times 10^{-1}$	$3,58 \times 10^{-2}$
$(30^\circ, 45^\circ)$	3,75	$2,0 \times 10^{-4}$	$2,5 \times 10^{-5}$	$2,36 \times 10^{-1}$	$7,52 \times 10^{-2}$
$(30^\circ, 60^\circ)$	3,75			$2,43 \times 10^{-1}$	$7,61 \times 10^{-2}$
$(30^\circ, 80^\circ)$	7,5			$3,99 \times 10^{-1}$	$2,42 \times 10^{-1}$



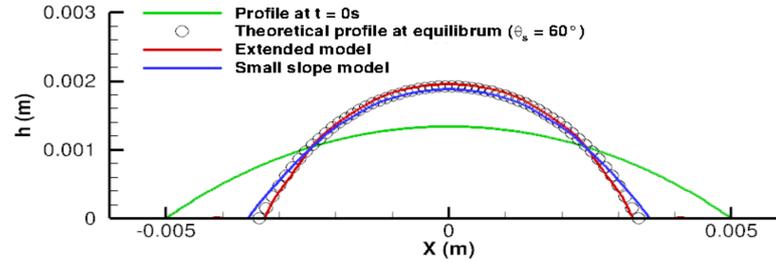
(a) Profil à  $t = 1s$  du cas  $(\theta_i, \theta_s) = (45^\circ, 15^\circ)$  avec  $h_* = 2,5 \times 10^{-5}m$  et  $\Delta x = 2,5 \times 10^{-5}m$ .



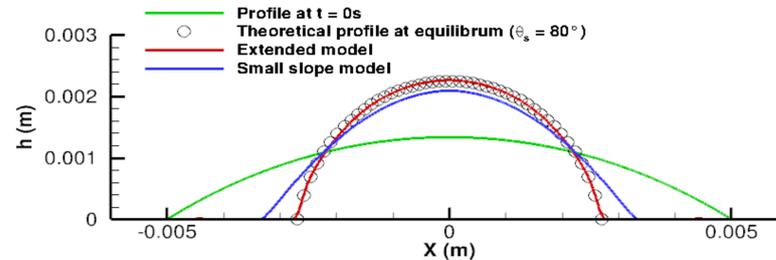
(b) Profil à  $t = 0,5s$  du cas  $(\theta_i, \theta_s) = (45^\circ, 30^\circ)$  avec  $h_* = 2,5 \times 10^{-5}m$  et  $\Delta x = 2,5 \times 10^{-5}m$ .



(c) Profil à  $t = 0,25s$  du cas  $(\theta_i, \theta_s) = (30^\circ, 45^\circ)$  avec  $h_* = 3,75 \times 10^{-5}m$  et  $\Delta x = 2,5 \times 10^{-5}m$ .



(d) Profil à  $t = 0,3s$  du cas  $(\theta_i, \theta_s) = (45^\circ, 60^\circ)$  avec  $h_* = 3,75 \times 10^{-5}m$  et  $\Delta x = 2,5 \times 10^{-5}m$ .



(e) Profil à  $t = 0,3s$  du cas  $(\theta_i, \theta_s) = (45^\circ, 80^\circ)$  avec  $h_* = 7,5 \times 10^{-5}m$  et  $\Delta x = 2,5 \times 10^{-5}m$ .

FIGURE 5.9 – Dépendance du profil à l'équilibre en fonction de la modélisation des termes capillaires. Les courbes rouges désignent les profils obtenus sans approximation des termes capillaires, et les courbes bleus ceux obtenus avec l'approximation (5.9).

Cette étude a permis de démontrer qu'une modélisation exacte des termes capillaires, via une prise en compte exacte du terme de courbure, est nécessaire afin de pouvoir retrouver la forme et (surtout) la surface mouillée d'un film très peu mouillant à l'équilibre sur un substrat.

## 5.2 Etude en dynamique de l'étalement d'un film 2D

Comme première étude dynamique, nous simulons dans cette section l'étalement d'un film 2D sur un plan horizontal. Nous allons vérifier que la dynamique du film au voisinage du point triple est en accord avec la loi de Cox-Voïnov [66]. En supposant une faible pente ( $p \ll 1$ ), un faible angle de contact statique ( $\theta_s \ll 1$ ), et de petits nombres capillaires ( $C_a \ll 1$ ), l'angle dynamique apparent  $\theta_d$  au point triple doit vérifier la loi suivante :

$$\theta_d^3 - \theta_s^3 = a \underbrace{\frac{\mu V_{CP}}{\gamma l_g}}_{= C_a} \ln(H/b) \quad (5.13)$$

avec  $a$  une constante. La dépendence logarithmique provient de la divergence des contraintes visqueuses au niveau du point triple et dépend du rapport  $H/b$  entre une échelle macroscopique  $H$  et la longueur de glissement  $b$  d'échelle microscopique.

Nous allons considérer le cas d'un film totalement mouillant ( $\theta_s = 0^\circ$ ) et partiellement mouillant ( $\theta_s = 4^\circ$ ) et pourrons ainsi discuter en fin de section de l'importance des paramètres physiques et numériques ( $h_*$ ,  $\theta_s$ ,  $b$ ,  $\Delta x$ ) sur la modélisation de leur dynamique d'étalement. Les cas que nous allons étudier dans cette section sont représentatifs des applications de givrage en aéronautique, car nous allons étudier l'étalement de films d'épaisseur comprises entre 10 et 100  $\mu m$ .

### 5.2.1 Cas d'un film totalement mouillant

#### Présentation de l'étude

Nous souhaitons dans un premier temps vérifier que le modèle discrétisé est capable de retrouver le comportement logarithmique de la loi (5.13) en considérant le cas d'un film totalement mouillant ( $\theta_s = 0^\circ$ ). De plus, dans la cas d'un film suffisamment mince (gravité négligeable), on peut montrer pour les temps grands les lois asymptotiques suivantes :

$$h(x=0, t) - h(x=0, 0) = \frac{K_h(b)}{t^{1/7}} \quad (5.14a)$$

$$x_{CP}(t) - x_{CP}(0) = K_x(b) \times t^{1/7} \quad (5.14b)$$

appelées lois de Tanner [68]. Nous vérifierons donc également que l'épaisseur centrale  $h(0, t)$  et que l'étalement  $x_{CP}(t)$  de la goutte vérifient cette loi.

#### Données numériques et expérimentales

On considère un film liquide initialisé à  $t = 0$  avec un profil d'épaisseur parabolique de rayon initial  $R_i = 5 \times 10^{-4}$  m et formant un angle de contact initial  $\theta_i = 50^\circ$  avec le substrat. Les propriétés du liquide sont celles de l'eau à température ambiante

TABLE 5.6 – Propriétés à température ambiante du liquide étudié.

Liquide	$\rho$ ( $kg.m^{-3}$ )	$\nu$ ( $m^2.s^{-1}$ )	$\gamma_{lg}$ ( $N.m$ )
Eau	1000	$10^{-6}$	0,068

Les forces de gravité sont par conséquent négligeables devant les forces capillaires puisque l'épaisseur maximale initiale du film  $h(0, 0) = 2.332 \times 10^{-4}m$  est petite devant la longueur capillaire  $l_c = 2,63 \times 10^{-3}m$ . Nous sommes donc bien dans les hypothèses de la loi de Tanner. Un exemple de simulation numérique est montré sur la figure 5.10.

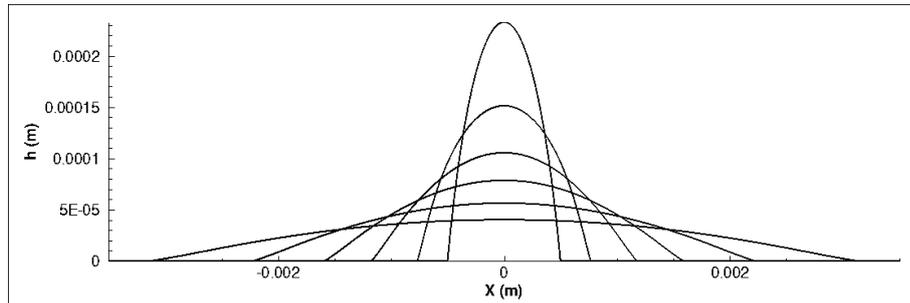


FIGURE 5.10 – Simulation numérique obtenue avec  $\Delta t = 1,5 \times 10^{-6} s$ ,  $\Delta x = 10^{-6} m$  et  $b = 4 \times 10^{-6} m$ . Les profils d'épaisseurs sont tracés aux instants  $t = 0, 0.001, 0.01, 0.1, 1, 10 s$ .

### Influence de la longueur de glissement $b$ à pas de maillage $\Delta x$ fixé

Nous fixons le pas de maillage  $\Delta x$  à  $10^{-6}m$  et réalisons plusieurs simulations avec des longueurs de glissement  $b$  différentes. A l'aide de la méthode décrite à la section 4.4.4 qui nous permet d'évaluer numériquement l'angle de contact apparent  $\theta_{num}$  et la vitesse  $V_{CP}$  du point triple au cours de la simulation, on peut tracer sur la figure 5.11 l'évolution de  $\theta_{num}^3$  en fonction du nombre capillaire  $C_a$  et constater qu'ils sont proportionnels pour n'importe quelle valeur de  $b$  dans la limite  $C_a \ll 1$ .

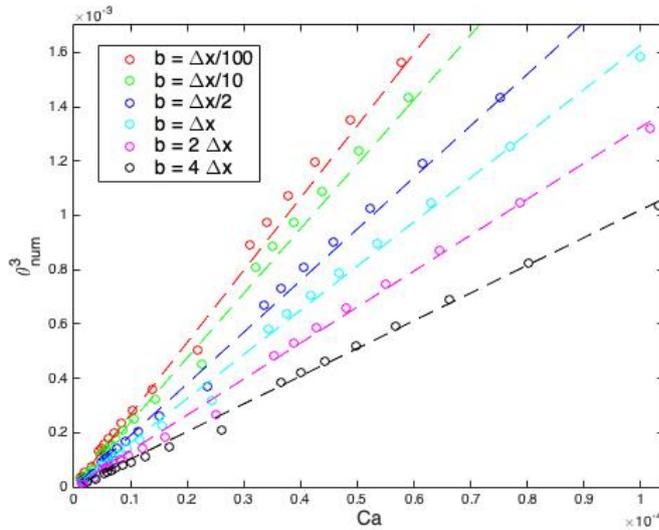


FIGURE 5.11 – Angle de contact apparent  $\theta_{num}$  en fonction du nombre capillaire  $Ca$  obtenu par simulation numérique de l'étalement symétrique d'un film totalement mouillant pour différentes longueurs de glissement  $b$ . Les lignes en pointillées correspondent aux régressions linéaires dont les données sont regroupées dans le tableau 5.7.

Par contre, en calculant les coefficients de proportionnalité  $r$  par régression linéaire pour chaque cas (voir tableau 5.7) et en traçant leur évolution en fonction de la longueur de glissement  $b$  (en échelle log) sur la figure 5.12, on en déduit que la dépendance logarithmique n'est retrouvée que si  $b$  est correctement discrétisé, soit si  $b \geq \Delta x$ .

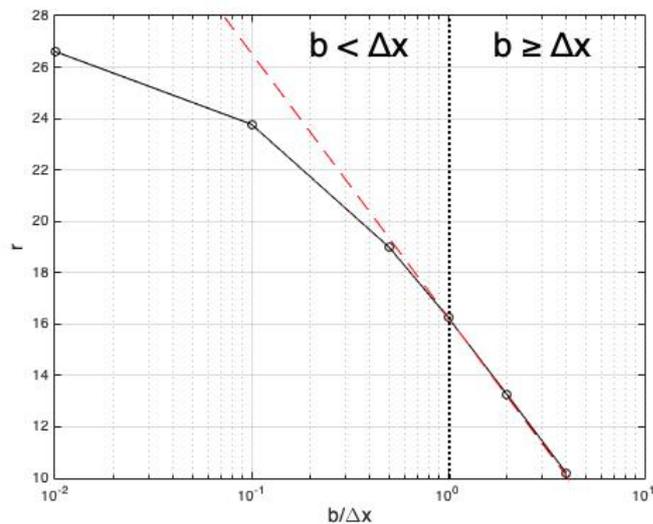


FIGURE 5.12 – Evolution de la constante de proportionnalité  $r$  en fonction de la longueur de glissement  $b$ . Une échelle logarithmique est utilisée pour l'axe des abscisses. La ligne en pointillée rouge est proportionnelle à  $\log(b)$ .

TABLE 5.7 – Evolution de la régression linéaire  $\theta_{num}^3 = r \times C_a$  en fonction de la longueur de glissement  $b$ .

$b$ (m)	$\Delta x$ (m)	$b/\Delta x$	$\Delta t$ (s)	$r$
$10^{-8}$		1/100		26,61
$10^{-7}$		1/10		23,78
$5 \times 10^{-7}$	$10^{-6}$	1/2	$1,5 \times 10^{-6}$	19,0
$10^{-6}$		1		16,27
$2 \times 10^{-6}$		2		13,25
$4 \times 10^{-6}$		4		10,2

Puisque nous venons de démontrer que l'angle apparent  $\theta_{num}$  au cube est toujours proportionnel aux petits nombres capillaires, on peut vérifier que la hauteur centrale  $h(0, t)$  et l'étalement  $x_{CP}(t)$  du film respectent respectivement les lois de Tanner (5.14a) et (5.14b). En traçant l'évolution temporelle en échelle logarithmique de ces deux paramètres en fonction du temps, on voit sur les figures 5.13a et 5.13b que toutes les courbes adoptent après un cours régime transitoire une forme de droite, prouvant qu'elles évoluent en  $K \times t^n$ . La longueur de glissement  $b$  n'influence pas la valeur de l'exposant  $n$  qui est proche du  $1/7$  pour l'étalement  $x_{CP}(t)$  (resp. du  $-1/7$  pour la hauteur  $h(0, t)$ ), et modifie seulement la constante de proportionnalité  $K$ , comme prédit par Tanner.

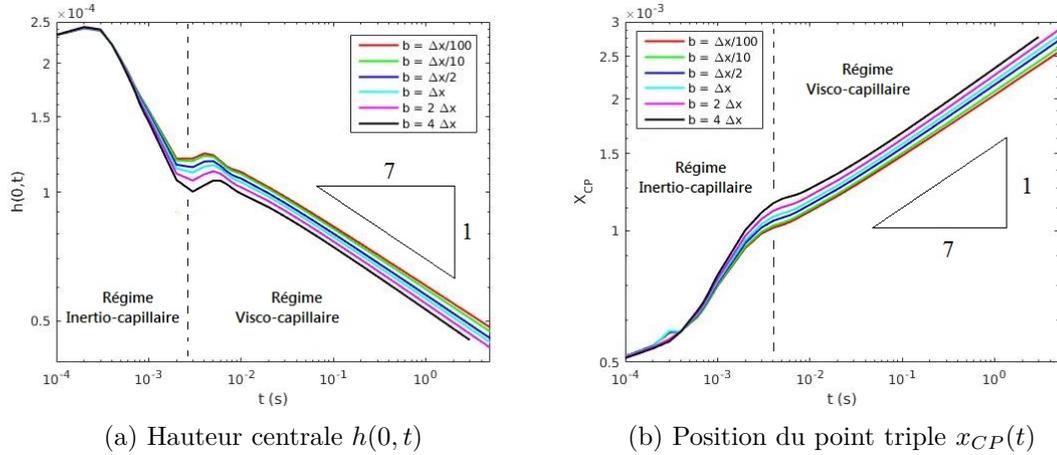


FIGURE 5.13 – Evolution temporelle de la hauteur centrale  $h(0, t)$  et de l'étalement  $x_{CP}(t)$  pour différentes longueurs de glissement  $b$ . Une échelle logarithmique est utilisée.

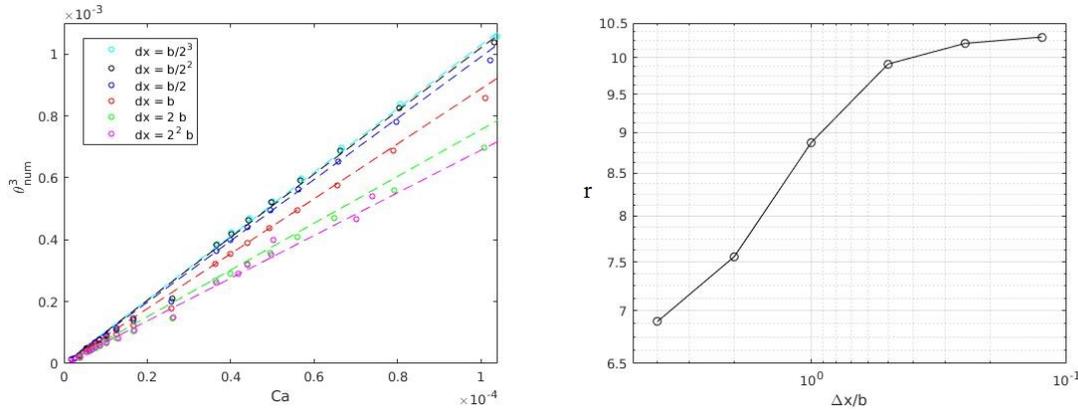
Pour résumer, nous venons de montrer que nous reproduisons fidèlement le comportement logarithmique de la loi d'angle de contact dynamique (5.13) à condition que la longueur de glissement  $b$  reste grande par rapport au pas de maillage  $\Delta x$ . On remarque également le résultat intéressant sur les figures 5.13a et 5.13b que si la longueur  $b$  est prise petite par rapport au pas maillage, la dynamique ne varie plus (les courbes  $b = \Delta x/10$  et  $b = \Delta x/100$  sont presque confondues). Ce résultat vient du fait que le frottement pariétal du bilan de quantité de mouvement (3.51c) est fonction de  $h + b$ . Si la longueur de glissement  $b$  est petite devant  $\Delta x$ , son effet ne varie plus car elle devient négligeable devant  $h$  dans les cellules situées au voisinage du point triple.

**Remarque 14**

On voit sur les figures 5.13a et 5.13b qu'il apparaît deux régimes d'étalement du film liquide. Puisque la goutte est initialisée avec une forme très loin de sa forme d'équilibre, la vitesse d'étalement, et donc les forces d'inertie, vont croître très rapidement aux premiers instants. Il apparaît un régime d'étalement très court ( $t \sim 10^{-3}$  m) que l'on peut qualifier "d'inertio-capillaire" où les forces de frottement sont négligeables devant les forces d'inertie, ce qui explique pourquoi les courbes sont indépendantes de la longueur de glissement  $b$ . Aux instants plus long, la vitesse d'étalement diminue et on entre dans un régime "visco-capillaire" où les forces de frottements deviennent dominantes. On retrouve ainsi les évolutions temporelles prédites par Tanner.

**Convergence en maillage**

Par analogie avec la convergence en maillage réalisée dans le cas statique à la section 5.1.1, nous souhaitons vérifier qu'il existe un pas de maillage  $\Delta x$  à partir duquel la dynamique d'étalement du film ne varie plus. En fixant la longueur de glissement  $b$  à  $4 \times 10^{-6}$  m et en faisant varier le pas de maillage, on constate sur la figure 5.14 que la régression linéaire  $\theta_{num}^3 = r \times C_a$  ne varie presque plus si  $\Delta x \leq b/2$ .



(a) Evolution du cube de l'angle de contact apparent  $\theta_{num}$  (b) Evolution de la constante de proportionnalité  $r$

FIGURE 5.14 – Angle de contact apparent  $\theta_{num}$  en fonction du nombre capillaire  $C_a$  obtenu par simulation numérique de l'étalement symétrique d'un film totalement mouillant pour différents pas de maillage  $\Delta x$ . Les lignes en pointillées correspondent aux régressions linéaires dont les données sont regroupées dans le tableau 5.8.

Puisque nous venons de montrer que la loi (5.13) de De Gennes converge en maillage, il devrait également en être le cas pour la loi (5.14a) de Tanner qui en dérive. On montre bien sur la figure 5.15 que la hauteur centrale  $h(0, t)$  vérifie une loi en  $K/t^n$  avec  $n$  qui converge vers  $1/7$  avec le maillage dans le régime visco-capillaire.

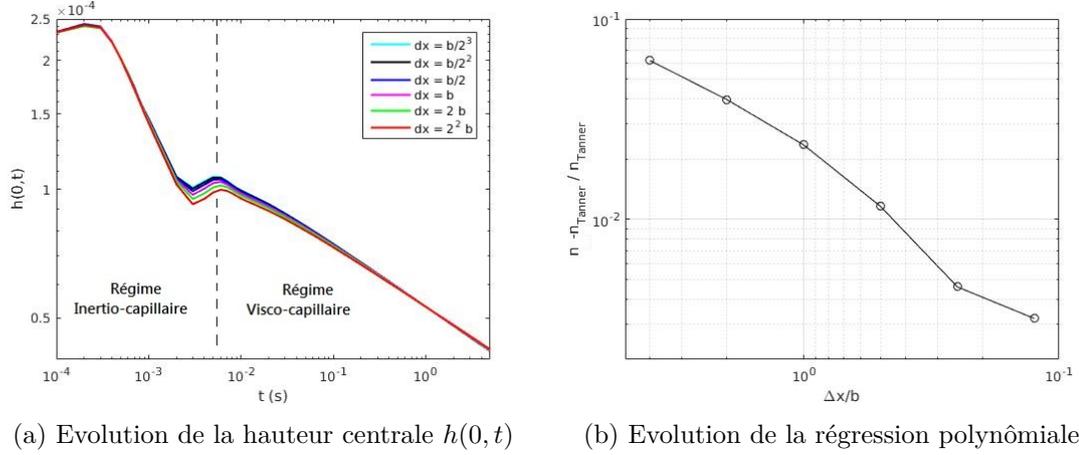


FIGURE 5.15 – Evolution temporelle de la hauteur centrale  $h(0, t)$  pour différents pas de maillage  $\Delta x$ . Une échelle logarithmique est utilisée. Les données sont regroupées dans le tableau 5.8.

TABLE 5.8 – Influence du pas de maillage  $\Delta x$  sur la régression linéaire  $\theta_{num}^3 = r \times C_a$  et sur la régression polynômiale  $h(0, t) - h(0, 0) = K/t^n$ . La longueur de glissement est fixée à  $b = 4 \times 10^{-6} m$ .

$\Delta x \times 10^{-6} (m)$	$\frac{\Delta x}{b}$	$\Delta t (s)$	$r$	$\frac{ n - 1/7 }{1/7} \times 10^{-2}$
16	$2^2$	$3,5 \times 10^{-5}$	6,896	6,20
8	2	$1,5 \times 10^{-5}$	7,557	3,96
4	1	$5,1 \times 10^{-6}$	8,639	2,35
2	1/2	$2,5 \times 10^{-6}$	9,746	1,16
1	1/2 <sup>2</sup>	$1,5 \times 10^{-6}$	10,2	0,46
0,5	1/2 <sup>3</sup>	$8,0 \times 10^{-7}$	10,31	0,35

Pour conclure sur cette première étude dynamique d'un film totalement mouillant, nous avons démontré que notre modèle discrétisé est capable de reproduire la dynamique théorique d'un film au voisinage du point triple piloté exclusivement par la capillarité et les forces visqueuses à condition d'utiliser un maillage  $\Delta x$  proche de la longueur de glissement  $b$ . L'utilisation d'un maillage très raffiné par rapport à  $b$  n'apporte aucune précision supplémentaire.

De plus, à l'aide des résultats de l'étude de convergence en maillage dans le tableau 5.8, on peut tracer sur la figure 5.16 l'évolution du pas de temps moyen  $\Delta t$  maximal que nous avons pu prendre lors d'une simulation en fonction du pas de maillage  $\Delta x$ . On en conclut que le pas de temps vérifie une loi de type  $K \times \Delta x^n$  avec  $n = 1.093$ . L'utilisation d'une discrétisation implicite en temps apporte donc un gain en temps de calcul important par rapport à une discrétisation explicite où le pas de temps évolue en  $\Delta x^2$ .

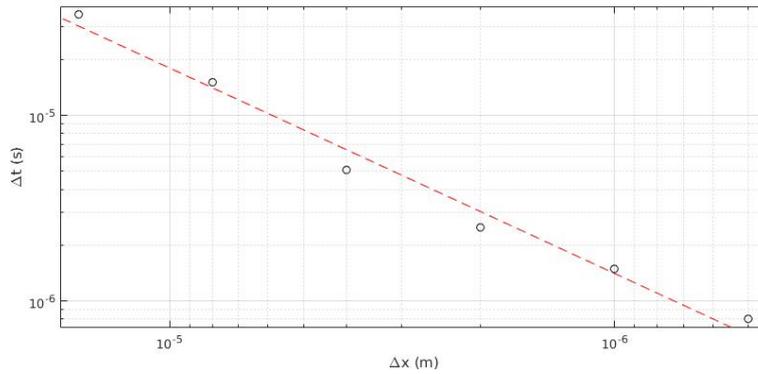


FIGURE 5.16 – Evolution du pas de temps de simulation  $\Delta t$  en fonction du pas de maillage  $\Delta x$ . Une échelle logarithmique est utilisée. La ligne en pointillée rouge est proportionnelle à  $\Delta x^{1.093}$ .

## 5.2.2 Cas d'un film partiellement mouillant

### Présentation de l'étude

On cherche à présent à vérifier que le modèle est capable de retrouver la loi (5.13) de Cox-Voïnov dans le cas d'un mouillage partiel, avec un petit angle de contact statique  $\theta_s = 4^\circ$  pour rester dans les hypothèses de la loi. On ne s'intéresse qu'à l'influence du rayon d'action  $h_*$ , et on fixe le pas de maillage  $\Delta x$  à  $10^{-6}$  m et la longueur de glissement  $b$  à  $10^{-7}$  m. Le fait que  $b$  soit pris petit devant  $\Delta x$  ne pose d'une part pas de problème dans le cadre de cette étude dont le but n'est pas de re-démontrer son influence logarithmique sur la loi de Tanner, et d'autre part permet d'éviter l'apparition d'éventuelles instabilités numériques (voir conclusion de la section 4.3). On cherche ainsi à déterminer les conditions sur  $h_*$  qui permettent de retrouver le comportement dynamique théorique au voisinage du point triple.

### Données numériques et expérimentales

On considère les mêmes propriétés physiques et la même initialisation de film à  $t = 0$  que dans la cas précédent de la section 5.2.1. Mais contrairement au film totalement mouillant qui s'étale à l'infini sur le substrat, le film partiellement mouillant admet un profil d'équilibre circulaire (de forme parabolique car le film est très mince) de rayon  $R_s = 1,865 \times 10^{-3}$  m donné par

$$\forall x, h_s(x) = \max \left[ \sqrt{\max \left[ \frac{R_s^2}{\sin^2(\theta_s)} - x^2, 0 \right]} - \frac{R_s}{\tan(\theta_s)}, 0 \right] \quad (5.15)$$

Un exemple de simulation numérique est montré sur la figure 5.17.

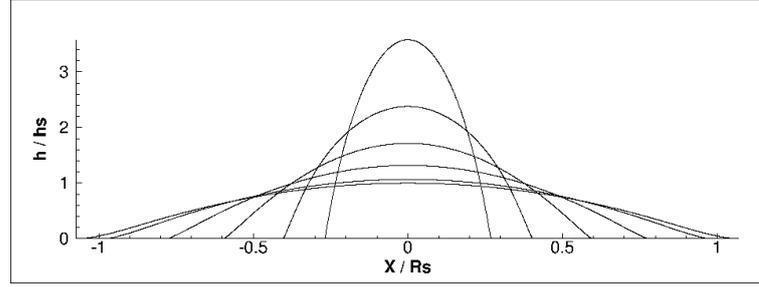


FIGURE 5.17 – Simulation numérique obtenu avec  $h_* = 6.51 \times 10^{-6} \text{ m}$ ,  $\Delta x = 10^{-6} \text{ m}$ ,  $b = 10^{-7} \text{ m}$  et  $\theta_s = 4^\circ$ . Les profils d'épaisseurs sont tracés aux instants  $t = 0, 0.001, 0.01, 0.1, 1, 10 \text{ s}$ . L'épaisseur du film  $h$  et l'abscisse  $x$  sont respectivement adimensionnés par l'épaisseur  $h_s(x = 0)$  et par le rayon  $R_s$  du profil parabolique théorique à l'équilibre.

### Influence du rayon d'action $h_*$ à pas de maillage $\Delta x$ fixé

En faisant varier le rayon d'action  $h_*$ , on constate sur la figure 5.18 que pour l'ensemble des cas, l'angle apparent  $\theta_{num}$  augmente avec le nombre capillaire  $Ca$ .

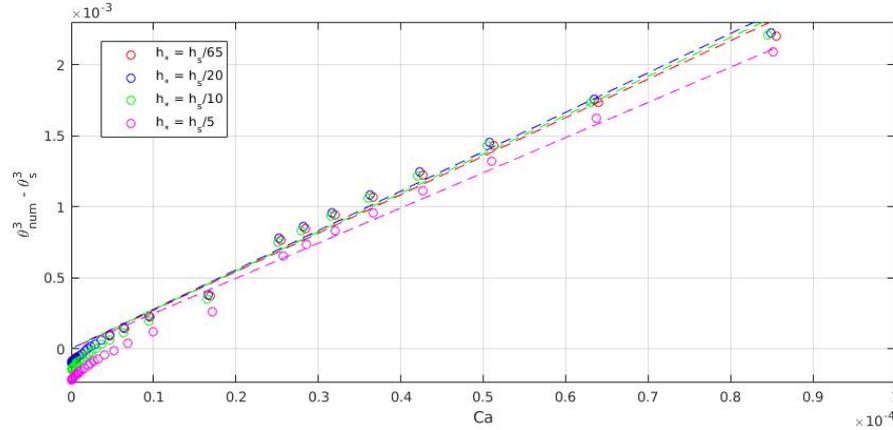


FIGURE 5.18 – Angle de contact apparent  $\theta_{num}$  en fonction du nombre capillaire  $Ca$  obtenu par simulation numérique de l'étalement symétrique d'un film partiellement mouillant pour différents  $h_*$ . Les lignes en pointillées correspondent aux régressions linéaires dont les données sont regroupées dans le tableau 5.9.

Cependant, si nous effectuons une régression linéaire de la forme  $\theta_{num}^3 - \theta_s^3 = r \times Ca$  pour chaque cas, on constate dans le tableau 5.9 que l'erreur entre la régression et les données augmente avec des valeurs croissantes de  $h_*$ . Il faut donc prendre  $h_*$  le plus petit possible afin de s'approcher le plus fidèlement possible de la loi de Cox-Voïnov dans le cas d'un film partiellement mouillant.

TABLE 5.9 – Influence du rayon d'action  $h_*$  sur la régression linéaire  $\theta_{num}^3 - \theta_s^3 = a \times C_a$ . La dernière colonne donne la norme  $L_2$  de l'erreur entre les résultats numériques et la régression.

$h_*$ (m)	$h_*/h_s$	$h_*/\Delta x$	$\Delta t$ (s)	$r$	$error \times 10^{-6}$
$1,302 \times 10^{-5}$	1/5	13,02		24,76	1,837
$6,51 \times 10^{-6}$	1/10	6,51	$2,0 \times 10^{-6}$	27,39	0,825
$3,255 \times 10^{-6}$	1/20	3,255		27,74	0,433
$10^{-6}$	1/65	1		27,1	0,232

On peut également tracer sur la figure 5.19 l'évolution temporelle de l'étalement  $x_{CP}(t)$  du film afin d'évaluer l'influence du rayon d'action  $h_*$  sur la dynamique d'étalement du film. On retrouve dans tout les cas les deux régimes d'étalement introduits lors de l'étude totalement mouillante. Il apparaît cependant un régime supplémentaire que l'on peut qualifier de "moléculo-capillaire", où le film se stabilise et adopte sa forme d'équilibre régie par un équilibre entre les forces capillaires et moléculaires. On constate que le rayon d'action  $h_*$  n'influence que le régime moléculo-capillaire, et que si  $h_*$  est inférieur à  $h_s/10$ , l'influence disparaît.

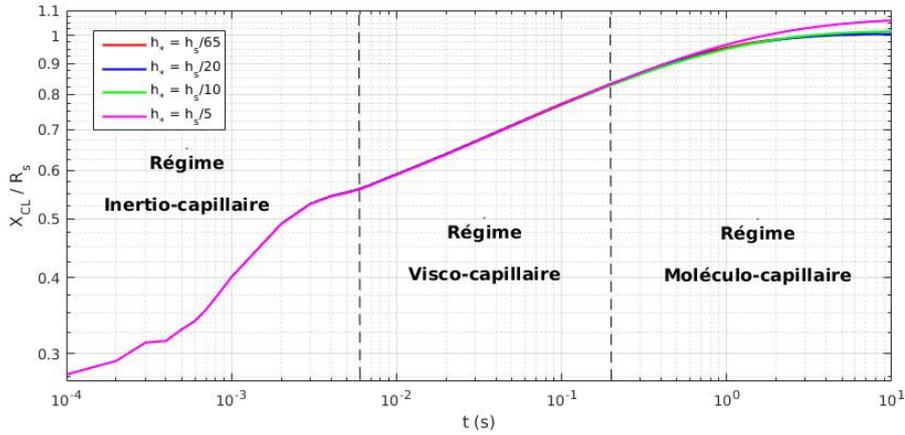


FIGURE 5.19 – Evolution temporelle de l'étalement  $x_{CP}(t)$  pour différents rayons d'action  $h_*$ . L'étalement  $x_{CP}(t)$  adimensionné par l'épaisseur par le rayon  $R_s$  du profil théorique à l'équilibre. Une échelle logarithmique est utilisée.

On en arrive donc à la même conclusion que celle faite lors des études statiques à la section 5.1 que si nous souhaitons retrouver précisément le profil dynamique du film au voisinage du point triple, i.e. retrouver l'évolution dynamique de l'angle de contact apparent, il faut faire tendre  $h_*$  et  $\Delta x$  vers 0. Par contre, si nous ne souhaitons que retrouver la dynamique macroscopique du film, tel que son étalement, il suffit de prendre  $h_* \leq h_o/10$ , avec  $h_o$  l'épaisseur du film loin du point triple. Cette condition suffit à lisser les forces moléculaire assez finement pour retrouver leur effet macroscopique sur le film tout en garantissant un coût en temps de calcul faible, car  $\Delta x$  doit rester proche de  $h_*$  pour garantir une convergence en maillage.

### 5.2.3 Discussion des résultats

Les résultats obtenus au cours de cette étude nous ont permis de démontrer que notre modèle discrétisé est capable de retrouver le comportement dynamique théorique d'un film au voisinage du point triple. De plus, nous avons pu identifier trois régimes d'étalement de films et étudier l'influence des paramètres physiques et numériques réglables de notre modèle sur la simulation de ces régimes. Aux très courts instants ( $t \sim 0$  à  $10^{-3}$  s), il apparaît un régime gouverné par les forces d'inertie qui ne dépend ni des forces moléculaires, ni des effets visqueux. Aux instants suivants ( $t \sim 10^{-2}$  à  $10^{-1}$  s), l'étalement est principalement piloté par les forces visqueuses et donc dépend de la longueur de glissement  $b$ . Enfin, aux temps très longs ( $t \sim 1$  à  $10$  s), l'étalement quasi-statique dépend uniquement du rayon d'action  $h_*$  des forces moléculaires.

On rappelle toutefois que les résultats de cette section ont été obtenus avec des films que l'on qualifie de mouillant ( $\theta_s = 0^\circ$  et  $\theta_s = 4^\circ$ ). Les liquides rencontrés sont généralement peu mouillants et donc caractérisés par des angle  $\theta_s$  beaucoup plus grands. Nous avons alors réalisé les mêmes simulations d'étalement qu'à la section 5.2 en augmentant l'angle de contact statique, et tracé l'évolution de l'étalement du film sur la figure 5.20. On voit qu'à partir d'un angle  $\theta_s$  de  $20^\circ$ , le régime visco-capillaire n'existe plus. Le film s'étale très rapidement et se stabilise aussitôt qu'il se rapproche de son état d'équilibre.

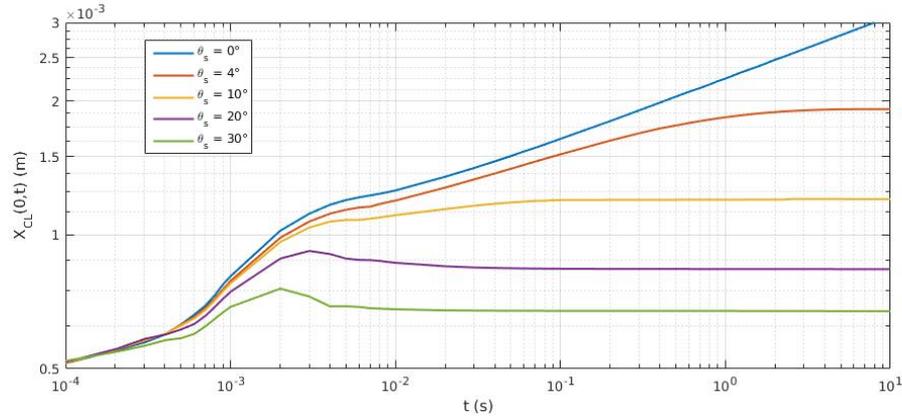


FIGURE 5.20 – Evolution temporelle de l'étalement  $x_{CP}(t)$  pour différents angles de contact statique  $\theta_s$ , obtenu avec  $h_* = 6.51 \times 10^{-6}$  m,  $\Delta x = 10^{-6}$  m, et  $b = 10^{-7}$  m. Une échelle logarithmique est utilisée.

On peut donc en conclure que seuls les régimes inertiels et moléculo-capillaires apparaissent dans les applications visées. Ainsi, seul le rayon d'action  $h_*$ , qui de plus n'a que besoin d'être petit par rapport aux épaisseurs de films macroscopiques, est important pour simuler l'étalement d'un film peu mouillant.

## 5.3 Film liquide injecté sur un plan incliné

### 5.3.1 Intérêt de l'étude

Nous souhaitons à présent étudier le cas d'un film liquide injecté sur un plan incliné en l'absence d'écoulement d'air extérieur. Cette étude est d'une grande importance dans le cadre de ce travail, car ce type de configuration est celle que nous étudierons également

dans le cas de la transition d'un film liquide 3D en ruisselets dans la partie III du manuscrit. Cette étude 2D nous permet ainsi de préparer en amont les futures simulations numériques tridimensionnelles. Après un court régime transitoire, un film liquide 2D injecté sur un substrat incliné se caractérise par la présence d'un bourrelet près du point triple dont l'étalement est de l'ordre de la longueur capillaire  $l_c$ , et d'un écoulement de Nusselt loin de ce point, comme représenté sur la figure 5.21.

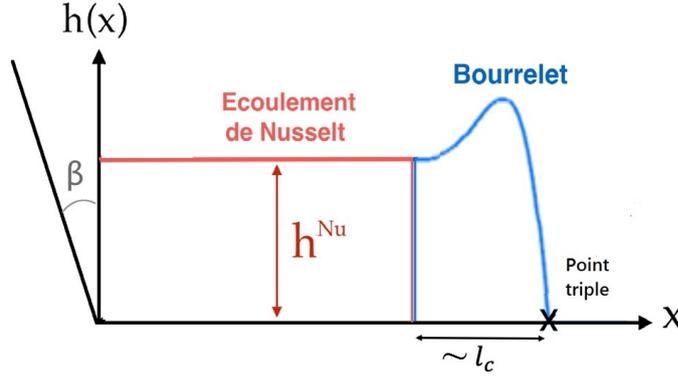


FIGURE 5.21 – Représentation d'un film injecté à débit constant uniformément sur un plan incliné d'un angle  $\beta$ .

L'objectif de cette section est alors d'étudier l'influence du rayon d'action  $h_*$  et de la longueur de glissement  $b$  sur le profil du liquide. Nous allons en particulier étudier l'écart relatif entre la hauteur du bourrelet  $h^{bulk} = \max[h(x)]$  et celle de l'écoulement de Nusselt, donné par :

$$r = \frac{h^{bulk} - h^{Nu}}{h^{Nu}} \quad (5.16)$$

### 5.3.2 Données numériques et expérimentales

La configuration que nous allons étudier est une des expériences réalisée par Johnson [31] que nous ré-étudierions au chapitre 7. Il correspond à un film liquide injecté avec un nombre de Reynolds de 0,52 sur un plan incliné d'un angle  $\beta = 27,9^\circ$ . Les propriétés du liquide correspondent à un mélange eau/glycérine à température ambiante et valent :

TABLE 5.10 – Propriétés à température ambiante du liquide et du substrat étudiés.

Liquide	$\rho$ ( $kg.m^{-3}$ )	$\nu$ ( $m^2.s^{-1}$ )	$\gamma_{lg}$ ( $N.m$ )	$\theta_s$
Mélange eau/glycérine	1210	$6,9 \times 10^{-5}$	0,066	$38^\circ$

Le film liquide est donc injecté avec un débit massique linéique  $\rho q^{Nu}$

$$\rho q^{Nu} = \rho \nu Re = 4,341 \times 10^{-2} kg.s^{-1}.m^{-1} \quad (5.17)$$

L'épaisseur  $h^{Nu}$  de l'écoulement de Nusselt est liée, d'après le bilan intégral de quantité de mouvement (3.51c) du modèle proposé, au débit massique linéique par la relation :

$$\rho q^{Nu} = \frac{(h^{Nu})^2(h^{Nu} + b)}{3\nu} \rho g \sin(\beta) \quad (5.18)$$

En théorie, la longueur de glissement  $b$  est moléculaire et donc négligeable devant  $h^{Nu}$ . On retrouve alors expérimentalement l'épaisseur de Nusselt suivante

$$h_{exp}^{Nu} = \left[ \frac{3 \nu q^{Nu}}{g \sin(\beta)} \right]^{1/3} = 1,174 \times 10^{-3} m \quad (5.19)$$

Cependant, nous allons réaliser des simulations avec des longueurs de glissement  $b$  soit petites soit du même ordre de grandeur que l'épaisseur  $h^{Nu}$ . Cette épaisseur est alors calculée pour chaque cas par résolution numérique de (5.18). Le calcul est initialisé en injectant le liquide à travers une fente d'épaisseur  $h^{Nu}$  et avec une vitesse moyenne  $\bar{u}^{Nu} = q^{Nu}/h^{Nu}$ . Un exemple de simulation numérique est montré sur la figure 5.22.

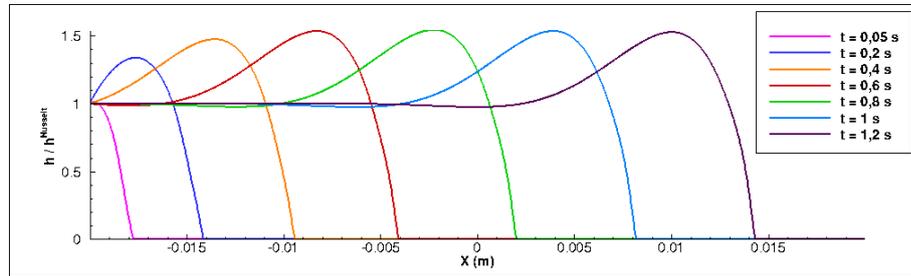


FIGURE 5.22 – Simulation numérique obtenu avec  $\Delta t \simeq 1,5 \times 10^{-6} s$ ,  $\Delta x = 2 \times 10^{-5} m$ ,  $b = 10^{-6} m$ ,  $\theta_s = 38^\circ$  et  $h_* = 1,174 \times 10^{-4} m$ . L'épaisseur du film  $h$  est adimensionnée par l'épaisseur  $h^{Nu}$ .

Dans un premier temps, nous étudierons l'influence de la longueur de glissement  $b$  dans le cas d'un film totalement mouillant, en faisant volontairement abstraction des propriétés de mouillage ( $\theta_s = 0^\circ$ ). Puis nous étudierons l'influence de  $b$  et du rayon d'action  $h_*$  sur le cas expérimental partiellement mouillant ( $\theta_s = 38^\circ$ ). Nous pourrons ainsi discuter en fin de section de l'importance de la valeur de ces paramètres numériques sur la modélisation respective de films totalement et partiellement mouillants.

### 5.3.3 Cas totalement mouillant

Nous fixons le pas de maillage  $\Delta x$  à  $2 \times 10^{-5} m$ , petit par rapport à la longueur capillaire  $l_c = 2,36 \times 10^{-3} m$  du liquide, garantissant une bonne discrétisation du bourrelet au voisinage du point triple. Nous réalisons plusieurs simulations numériques avec des longueurs de glissement  $b$  différentes, dont les profils de films (à  $t = 1 s$ ) sont représentés sur la figure 5.23.

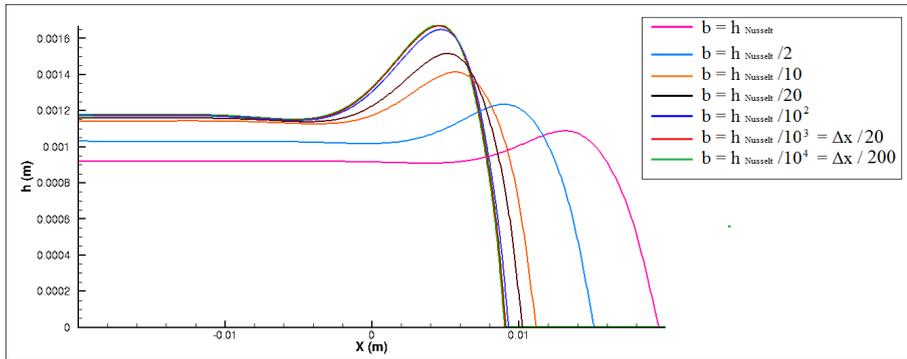


FIGURE 5.23 – Simulation numérique obtenues pour différentes longueurs de glissement  $b$  avec  $\Delta x = 2 \times 10^{-5} \text{ m}$ ,  $\Delta t \simeq 1,5 \times 10^{-6} \text{ s}$  et  $\theta_s = 0^\circ$ . Les profils sont tracés à  $t = 1 \text{ s}$ .

On voit que la longueur de glissement  $b$  influe aussi bien sur la hauteur de l'écoulement de Nusselt que sur la hauteur du bourrelet au voisinage du point triple. Cependant, on constate sur les tracés de la figure 5.24a que si la hauteur de l'écoulement de Nusselt converge rapidement dès que  $b \leq h^{Nu}/10$ , la hauteur du bourrelet par contre continue à croître pour des valeurs inférieures de  $b$ . Si on trace sur la figure 5.24b l'évolution de la différence relative  $r_b$  (entre la hauteur du bourrelet et celle de l'écoulement de Nusselt) en fonction de la longueur de glissement  $b$ , il apparaît deux régimes de variation de  $r_b$  : un régime où  $r_b$  varie en  $(b/h^{Nu})^n$  avec  $n$  proche de  $-1/7$ , et un régime où la hauteur du bourrelet ne varie plus pour toute longueur  $b \leq \Delta x$ . La raison de ce dernier comportement a déjà été expliquée à la section 5.2.1.

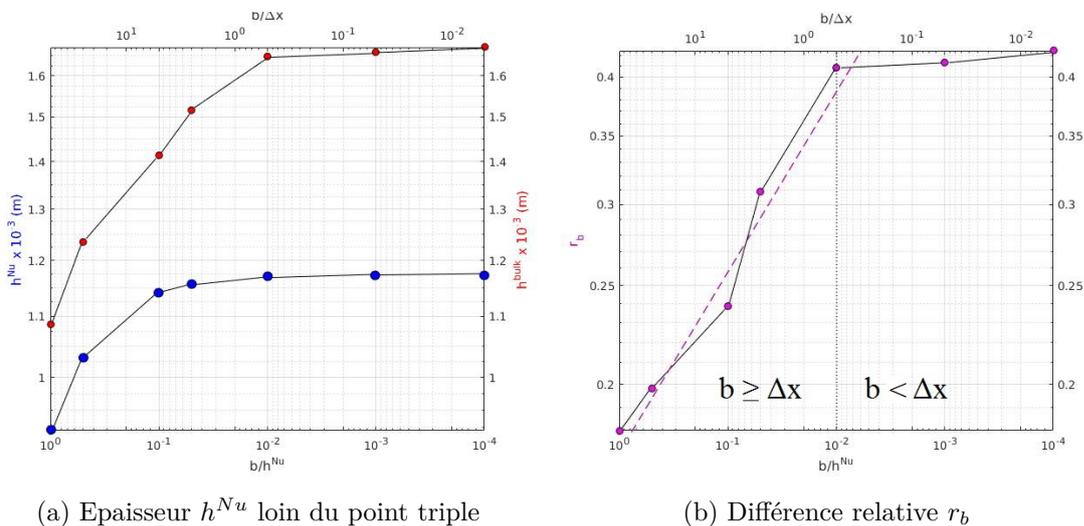


FIGURE 5.24 – Evolution de la hauteur de l'écoulement de Nusselt  $h^{Nu}$  et de la différence relative  $r_b$  entre la hauteur du bourrelet  $h^{bulk}$  et la hauteur de l'écoulement de Nusselt en fonction de la longueur de glissement  $b$ . Les données sont regroupées dans le tableau 5.11. Une échelle logarithmique est utilisée. La ligne en pointillé violette est proportionnelle à  $(b/h^{Nu})^{-0,1703}$ .

TABLE 5.11 – Influence de la longueur de glissement  $b$  sur la géométrie du profil d'épaisseur d'un film totalement mouillant. Le pas de maillage  $\Delta x$  est fixé à  $2 \times 10^{-5} m$  et le pas de temps de simulation  $\Delta t$  à  $1,5 \times 10^{-6} s$ .  $r_b$  désigne l'écart relatif entre la hauteur du bourrelet et la hauteur de l'écoulement de Nusselt.

$b(m)$	$h^{Nu} \times 10^{-3} m$	$b/h^{Nu}$	$b/\Delta x$	$h^{bulk} \times 10^{-3} (m)$	$r_b \times 10^{-2}$
$10^{-3}$	0,921	$\simeq 1$	50	1,087	18,03
$5 \times 10^{-4}$	1,031	$\simeq 1/2$	25	1,235	19,81
$10^{-4}$	1,141	$\simeq 1/10$	5	1,414	23,88
$5 \times 10^{-5}$	1,158	$\simeq 1/20$	2,5	1,516	30,88
$10^{-5}$	1,171	$\simeq 1/10^2$	1/2	1,649	40,86
$10^{-6}$	1,174	$\simeq 1/10^3$	1/20	1,659	41,31
$10^{-7}$	1,174	$\simeq 1/10^4$	1/200	1,672	42,42

La longueur de glissement  $b$  joue donc un rôle important sur la bonne modélisation d'un fluide totalement mouillant injecté sur un substrat car la différence relative entre la hauteur du bourrelet et celle de l'écoulement de Nusselt évolue en  $(h^{Nu}/b)^{1/7}$ . La longueur de glissement a donc un impact d'autant plus important sur la hauteur du bourrelet qu'elle est petite devant  $h^{Nu}$ . Sachant que  $b$  est censé être pris proche des échelles moléculaires, on en conclut que dans le cas d'un film totalement mouillant, la bonne modélisation du bourrelet au voisinage du point triple nécessite un pas de maillage très fin et donc un coût en temps de calcul élevé. On reviendra sur ce point à la conclusion de cette section.

### 5.3.4 Cas partiellement mouillant

On s'intéresse à présent au cas d'un film partiellement mouillant. Le pas de maillage, les conditions d'injection et les propriétés physiques sont identiques au cas précédent totalement mouillant à l'exception de l'angle de contact  $\theta_s$  qui est pris égal à  $38^\circ$ . Nous allons ainsi évaluer l'influence de la longueur de glissement  $b$ , puis celle du rayon d'action  $h_*$ .

#### Influence de la longueur de glissement $b$ à rayon d'action $h_*$ fixé

En procédant similairement au cas totalement mouillant, nous réalisons plusieurs simulations numériques avec des longueurs de glissement  $b$  différentes, dont les profils de films sont représentés sur la figure 5.25. Le rayon d'action  $h_*$  est fixé à  $10^{-4} m$ .

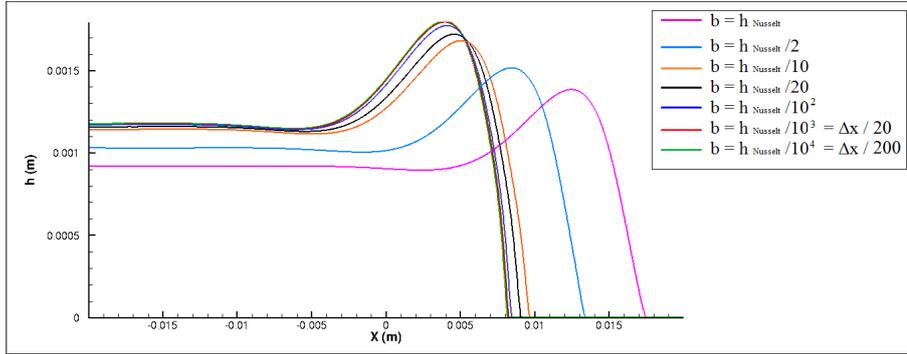


FIGURE 5.25 – Simulation numérique obtenues pour différentes longueurs de glissement  $b$  avec  $\Delta x = 2 \times 10^{-5} \text{ m}$ ,  $\Delta t \simeq 1,5 \times 10^{-6} \text{ s}$  et  $\theta_s = 38^\circ$  et  $h_* = 10^{-4} \text{ m}$ . Les profils sont tracés à  $t = 1 \text{ s}$ .

En traçant l'évolution de la hauteur de l'écoulement de Nusselt et de la hauteur du bourrelet sur la figure 5.26a, on observe qu'elle est différente que dans le cas totalement mouillant. En effet, les deux hauteurs  $h^{Nu}$  et  $h^{bulk}$  augmentent lorsque  $b$  diminue et convergent dès que  $b \leq h^{Nu}/10$ . De plus, on peut considérer d'après les résultats sur la figure 5.26b que la différence relative  $r_b$  entre les deux hauteurs est indépendante de la longueur de glissement  $b$ , puisque celle-ci reste comprise entre 0,47 et 0,53 peu importe la valeur de  $b$ .

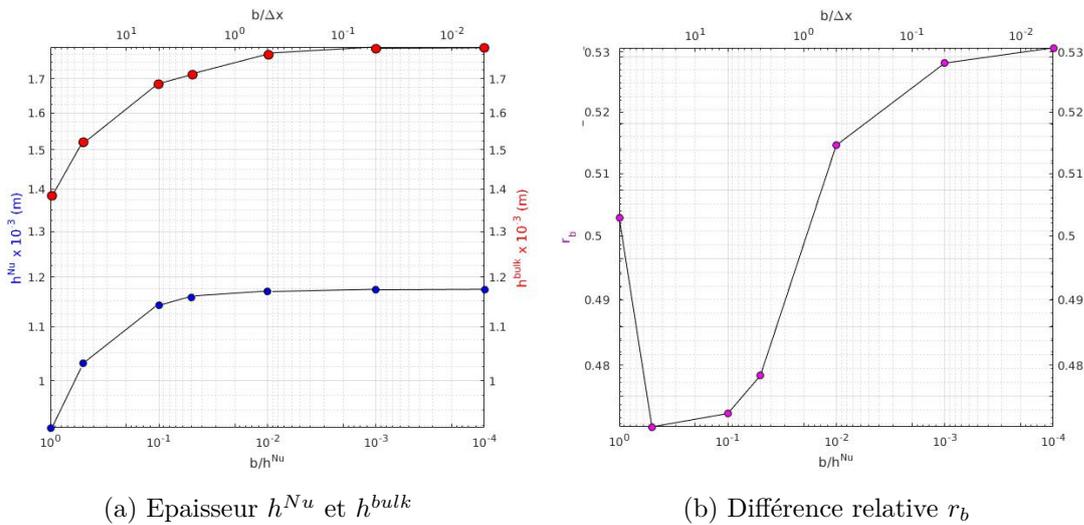


FIGURE 5.26 – Evolution de la hauteur de l'écoulement de Nusselt  $h^{Nu}$  et de la différence relative  $r_b$  entre la hauteur du bourrelet  $h^{bulk}$  et la hauteur de l'écoulement de Nusselt en fonction de la longueur de glissement  $b$ . Les données sont regroupées dans le tableau 5.12. Une échelle logarithmique est utilisée.

TABLE 5.12 – Influence de la longueur de glissement  $b$  sur la géométrie du profil d'épaisseur d'un film partiellement mouillant. L'angle de contact statique  $\theta_s$  est fixé à  $38^\circ$  et le rayon d'action  $h_*$  à  $10^{-4} m$ . Le pas de maillage  $\Delta x$  est fixé à  $2 \times 10^{-5} m$  et le pas de temps de simulation  $\Delta t$  à  $1,5 \times 10^{-6} s$ .  $r_b$  désigne l'écart relatif entre la hauteur du bourrelet et la hauteur de l'écoulement de Nusselt.

$b$ (m)	$h^{Nu} \times 10^{-3}$ (m)	$b/h^{Nu}$	$b/\Delta x$	$h^{bulk} \times 10^{-3}$ (m)	$r_b \times 10^{-2}$
$10^{-3}$	0,921	$\simeq 1$	50	1,384	50,28
$5 \times 10^{-4}$	1,031	$\simeq 1/2$	25	1,516	47,04
$10^{-4}$	1,141	$\simeq 1/10$	5	1,681	47,33
$5 \times 10^{-5}$	1,158	$\simeq 1/20$	2,5	1,712	47,84
$10^{-5}$	1,171	$\simeq 1/10^2$	1/2	1,773	51,41
$10^{-6}$	1,174	$\simeq 1/10^3$	1/20	1,794	52,81
$10^{-7}$	1,174	$\simeq 1/10^4$	1/200	1,797	53,07

On en conclut que contrairement au cas d'un film totalement mouillant, où la différence entre la hauteur du bourrelet et celle de l'écoulement amont est pilotée par la longueur de glissement  $b$  (et donc les forces visqueuses), cette différence est pilotée principalement par les forces moléculaires dans le cas d'un film partiellement mouillant. La longueur de glissement ne modifie que la hauteur globale de l'écoulement, qui atteint environ son asymptote dès que  $b \leq h^{Nu}/10$ .

### Influence du rayon d'action $h_*$ à longueur de glissement $b$ fixée

Puisque nous venons de voir que la longueur de glissement  $b$  n'est plus le paramètre pilotant le profil du bourrelet dans le cas partiellement mouillant, nous fixons sa valeur à  $10^{-5} m$  et analysons l'influence du rayon d'action  $h_*$ . La figure 5.27 présente les différents profils de films (à  $t = 1, 2 s$ ) obtenus par simulation numérique.

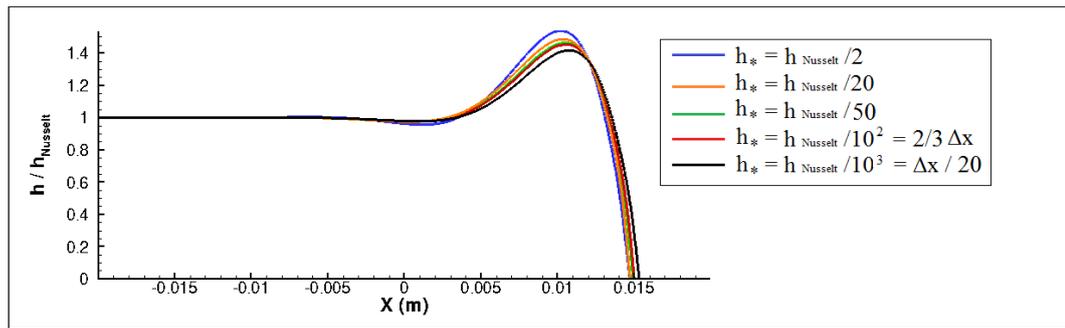


FIGURE 5.27 – Simulation numérique obtenues pour différents rayons d'actions  $h_*$  avec  $\Delta x = 2 \times 10^{-5} m$ ,  $\Delta t = 1,5 \times 10^{-6} s$ ,  $\theta_s = 38^\circ$  et  $b = 10^{-5} m$ . L'épaisseur du film  $h$  est adimensionnée par l'épaisseur  $h^{Nu} = 1,174 \times 10^{-3} m$ . Les profils sont tracés à  $t = 1, 2 s$ .

On constate que diminuer le rayon d'action  $h_*$  a l'effet inverse que diminuer la longueur de glissement  $b$  puisque l'écart relatif  $r_{h_*}$  entre  $h^{Nu}$  et  $h^{bulk}$  décroît. Une interpolation polynômiale des résultats (en pointillé vert sur la figure 5.28), obtenus pour les valeurs de  $h_* \geq \Delta x$  garantissant que les forces moléculaires sont bien régularisées à l'échelle

du maillage, montre que la différence relative  $r_{h_*}$  entre la hauteur du bourrelet et de l'écoulement de Nusselt tend a priori vers 0,45 pour les faibles  $h_*$ . Par contre, si  $h_*$  devient petit par rapport au pas de maillage  $\Delta x$ , la hauteur du bourrelet continue à chuter. Cette dégradation des résultats a déjà été constatée lors de l'étude statiques à la section 5.1 et provient du fait que le modèle ne retrouve plus la bonne forme géométrique d'un film au voisinage du point triple si les forces moléculaires ne sont pas correctement maillées.

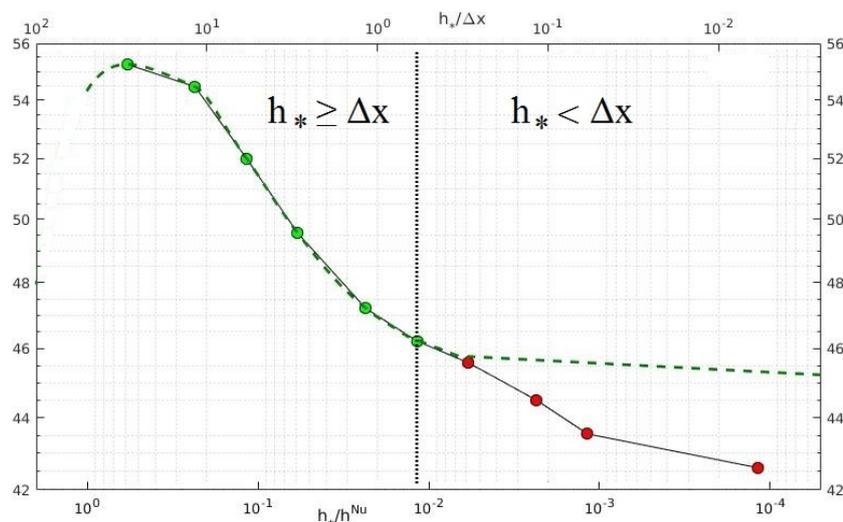


FIGURE 5.28 – Evolution de de la différence relative  $r_b$  entre la hauteur du bourrelet  $h^{bulk}$  et la hauteur de l'écoulement de Nusselt  $h^{Nu}$  en fonction du rayon d'action  $h_*$ . Les données sont regroupées dans le tableau 5.13. Une échelle logarithmique est utilisée. La ligne en pointillé verte représente l'interpolation polynômiale des points (en vert) dans la zone  $h_* \geq \Delta x$  réalisée avec l'outil "spline interpolation" de matlab.

TABLE 5.13 – Influence du rayon d'action  $h_*$  sur la géométrie du profil d'épaisseur d'un film partiellement mouillant d'angle de contact statique  $\theta_s = 38^\circ$ . La longueur de glissement  $b$  est fixée à  $10^{-5} m$ . Le pas de maillage  $\Delta x$  est fixé à  $2 \times 10^{-5} m$  et le pas de temps de simulation  $\Delta t$  à  $1,5 \times 10^{-6} s$ .  $r_{h_*}$  désigne la différence relative entre la hauteur du bourrelet et la hauteur de l'écoulement de Nusselt.

$h_* \times 10^{-3} (m)$	$h^{Nu} \times 10^{-3} (m)$	$h_*/h^{Nu}$	$h_*/\Delta x$	$h^{bulk} \times 10^{-3} (m)$	$r_{h_*} \times 10^{-2}$
$5,855 \times 10^{-1}$	1,171	1/2	$\simeq 25$	1,818	55,25
$2,342 \times 10^{-1}$		1/5	$\simeq 10$	1,809	54,46
$1,171 \times 10^{-1}$		1/10	$\simeq 5$	1,78	52,25
$5,855 \times 10^{-2}$		1/20	$\simeq 2,5$	1,751	49,56
$2,342 \times 10^{-2}$		1/50	$\simeq 1$	1,724	47,25
$1,171 \times 10^{-2}$		1/10 <sup>2</sup>	$\simeq 0,6$	1,712	46,23
$5,855 \times 10^{-3}$		1/200	$\simeq 0,3$	1,705	45,59
$2,342 \times 10^{-3}$		1/500	$\simeq 0,1$	1,692	44,51
$1,171 \times 10^{-3}$		1/10 <sup>3</sup>	$\simeq 1/20$	1,681	43,54
$1,171 \times 10^{-4}$		1/10 <sup>4</sup>	$\simeq 1/200$	1,67	42,6

On en conclut qu'il s'agit bien du rayon d'action  $h_*$  (et donc des forces moléculaires) qui pilote principalement la géométrie du bourrelet au voisinage du point triple dans le cas d'un film partiellement mouillant. Dans un contexte académique, on choisira toujours la plus petite valeur de  $h_*$  possible. Par contre, dans un contexte industriel, on peut considérer que le profil est bien retrouvé à partir d'un rayon d'action  $h_* \leq h^{Nu}/10$  puisque des valeurs inférieures n'induisent qu'une faible variation de la hauteur du bourrelet (moins de 10%). Nous reviendrons sur l'importance de la bonne modélisation du bourrelet au voisinage du point triple au chapitre 7.

### 5.3.5 Discussion des résultats

Les résultats obtenus au cours de cette étude nous ont permis d'étudier l'influence des paramètres visqueux et des paramètres de mouillage sur la simulation d'un film liquide injecté sur un substrat incliné. Alors que la longueur de glissement  $b$  est le paramètre dominant dans le cas d'un film totalement mouillant, elle ne joue quasiment plus aucun rôle dans le cas d'un film partiellement mouillant, qui est le type de liquide étudié ici. Ainsi, ce paramètre visqueux n'a ni besoin d'être pris proche des échelles moléculaires, ni besoin d'être correctement discrétisé avec un pas de maillage  $\Delta x$  de l'ordre de  $b$ . Le paramètre important est surtout le rayon d'action  $h_*$  qui n'a besoin d'être pris petit que par rapport à l'épaisseur de l'écoulement de Nusselt pour retrouver le bon profil du film au voisinage du point triple.

## 5.4 Comparaison des résultats numériques avec l'analyse de stabilité linéaire

### Présentation de l'étude

Dans cette section, nous souhaitons montrer que le modèle discrétisé est capable de reproduire le régime d'instabilité spinodale introduit lors de l'analyse de stabilité linéaire du modèle continu. Nous souhaitons surtout illustrer la conclusion de la section 3.5 que le paramètre  $h_*$  qui joue le rôle de rayon d'interactions moléculaires entre l'interface *solide/liquide* et *liquide/gaz* doit rester petit devant l'épaisseur macroscopique du film. Dans le cas contraire, des instabilités spinodales non-désirées à l'échelle macroscopique peuvent apparaître.

### Données numériques et expérimentales

On considère un film liquide d'épaisseur uniforme  $h_o$  sur un plan horizontal. Le liquide est supposé partiellement mouillant ( $\theta_s = 60^\circ$ ) et ses propriétés sont celles d'un mélange eau/glycérine et sont données par

TABLE 5.14 – Propriétés à température ambiante du liquide étudié.

Liquide	$\rho$ ( $kg.m^{-3}$ )	$\nu$ ( $m^2.s^{-1}$ )	$\gamma_{lg}$ ( $N.m$ )	$l_c$ ( $m$ )
Mélange eau/glycérine	1000	$10^{-5}$	0,068	$2.633 \times 10^{-3}$

Nous souhaitons étudier la stabilité d'un film macroscopique en réponse à une perturbation en fonction du rayon d'action moléculaire  $h_*$ . Pour ce faire, nous fixons l'épaisseur

initial  $h_o$  du film à  $0,1 l_c$ . Nous faisons varier le rayon d'action  $h_*$  et prenons  $\Delta x = h_*$  comme pas de maillage afin de s'assurer de la bonne discrétisation des forces moléculaires. La longueur de glissement  $b$  ne joue aucun rôle dans cette étude et est fixée à  $10^{-6} m$ . Quatre valeurs comprises entre  $h_o/10$  et  $2h_o$  sont étudiées. L'analyse de stabilité linéaire réalisée à la section 3.5 permet de tracer le diagramme sur la figure 5.29 qui prédit la stabilité des différents cas étudiés

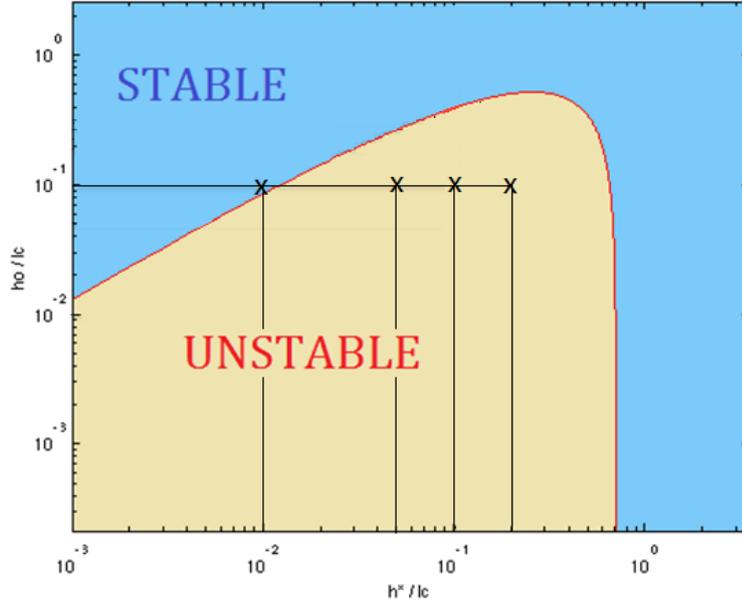


FIGURE 5.29 – Domaine de stabilité d'un film plat d'épaisseur uniforme  $h_o$  sur un plan horizontal pour un angle de contact statique  $\theta_s = 60^\circ$ . L'épaisseur  $h_o$  et le paramètre  $h_*$  sont adimensionnés par la longueur capillaire  $l_c$ . Les croix correspondent aux cas  $(h_*/l_c, h_o/l_c)$  étudiés dans cette section. Une échelle logarithmique est utilisée.

Ainsi, parmi les quatre situations, on voit que trois sont linéairement instables, et une seule est linéairement stable. On considère un domaine spatial de longueur  $x \in [-0.06 ; 0.06] m$ . Le film liquide est initialisé par :

$$h(x, t = 0) = \begin{cases} h_o & \forall x \in [-0,05 ; 0,05] m \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (5.20)$$

Le film liquide est alors perturbé à ses extrémités où il passe brusquement de  $h_o$  à 0, et où vont apparaître les instabilités.

## Résultats

La figure 5.30 présente l'évolution temporelle de l'épaisseur du film pour les quatre cas étudiés. Les simulations semblent être en bon accord avec l'analyse de stabilité linéaire, car on constate que les trois films prédits instables se sont séparés en un arrangement régulier de gouttelettes. Concernant la simulation du film prédit linéairement stable, on observe sur la figure 5.30d que le film se rétracte pour adopter une forme d'équilibre circulaire.

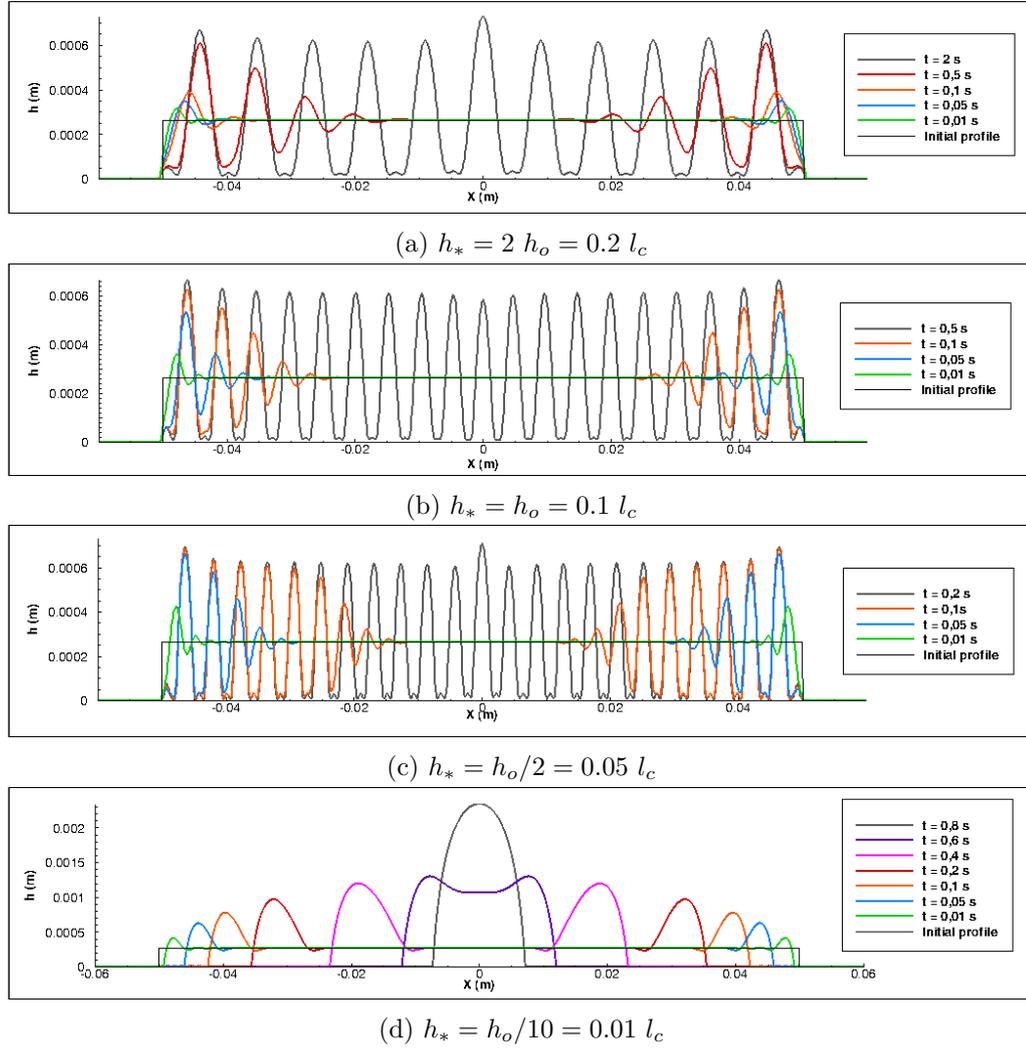


FIGURE 5.30 – Evolution temporelle de d'un film d'épaisseur initiale  $h_o = 2,633 \times 10^{-4} m$  en fonction du rayon d'action  $h_*$ . Les données du calcul sont résumées dans le tableau ??.

On peut donc conclure que le modèle discrétisé retrouve fidèlement l'analyse de stabilité linéaire. On rappelle également que l'épaisseur  $h_o$  du film que nous avons choisie pour ces simulations est de l'ordre de  $10^{-4} m$ , loin du véritable rayon d'action moléculaire de l'ordre de  $10^{-8} m$ . Le film est donc censé être toujours stable. Cependant, puisque ce rayon d'action est égal à  $h_*$  dans notre cas, les simulations ont montré qu'il faut que  $h_*$  soit petit par rapport à  $h_o$  pour retrouver le bon comportement d'un film macroscopique et éviter de créer artificiellement des instabilités.

## 5.5 Conclusion du chapitre

Nous avons proposé dans ce chapitre un modèle continu à trois équations de type Saint Venant (ainsi qu'une méthode de discrétisation spatiale et temporelle) qui a l'avantage d'être uniquement du second ordre en espace et donc adapté à une formulation de type Volume Finis sur maillage quelconque. Ce modèle tient compte des forces capillaires et

moléculaires sans limite de validité en terme d'angle de contact (et donc de mouillabilité), contrairement aux modèles classiques de lubrification très majoritairement utilisés dans la littérature.

L'intention de ce travail était de modéliser les aspects les plus importants de la dynamique d'un film liquide à l'échelle macroscopique. Les simulations numériques bidimensionnelles ont montré la faisabilité de ce modèle à reproduire des écoulements de films minces totalement et partiellement mouillant, et les résultats en termes d'étalement statique, d'étalement dynamique, et de régimes d'instabilités sont tous en accord avec ceux de la littérature.

Au-delà de la simple validation de cas académiques, nous avons étudié la sensibilité des résultats aux trois paramètres ajustables de notre modèle qui sont le rayon d'action moléculaire  $h_*$ , la longueur de glissement  $b$  et le pas de maillage  $\Delta x$ . La première conclusion est que le pas de maillage  $\Delta x$  doit être du même ordre de grandeur que  $h_*$  (resp. que  $b$ ) pour modéliser correctement les forces moléculaires (resp. les forces visqueuses) au voisinage du point triple lorsque l'épaisseur du film  $h$  tend vers 0. La deuxième conclusion est que si  $h_* \leq h_o/10$ , avec  $h_o$  l'épaisseur du film loin du point triple, les forces moléculaires sont suffisamment peu étalées pour retrouver la forme macroscopique, l'étalement statique et l'étalement dynamique d'un film liquide déposé ou injecté sur un substrat. Le dernier constat est que la longueur de glissement  $b$  influe surtout sur l'étalement et le profil dynamique de films totalement mouillant, et ce, même jusqu'à des longueurs de glissements de l'ordre des dimensions moléculaires [86]. Retrouver par simulation numérique la dynamique exacte d'un film liquide 2D totalement mouillant est donc très coûteux, même avec une discrétisation implicite en temps.



Troisième partie

Modélisation tridimensionnelle



## Chapitre 6

# Extension tridimensionnelle des équations du modèle continu

Les simulations numériques présentées au chapitre précédent ont montré la capacité du modèle proposé à reproduire des configurations d'étalement bidimensionnel de films totalement ou partiellement mouillants. Nous présentons dans ce chapitre un modèle continu 3D construit de façon analogue au modèle 2D. Nous vérifierons qu'il admet par extension les mêmes propriétés théoriques, telle que celle d'être associée à une équation de conservation de l'énergie. Nous nous intéressons également à l'analyse de stabilité linéaire du modèle proposé et discuterons de sa capacité à prédire la transition d'un film en ruisselets. Enfin, nous proposons une discrétisation spatiale et temporelle du système et discutons de ses limitations.

### Sommaire

---

<b>6.1</b>	<b>Etablissement du modèle continu . . . . .</b>	<b>166</b>
6.1.1	Hypothèses du problème et conditions aux limites . . . . .	166
6.1.2	Dérivation de l'équation de lubrification . . . . .	167
6.1.3	Dérivation du système équivalent de type Saint Venant . . . . .	168
6.1.4	Système augmenté . . . . .	169
6.1.5	Mise sous forme conservative du bilan de quantité de mouvement . . . . .	170
6.1.6	Equation de conservation de l'énergie . . . . .	172
<b>6.2</b>	<b>Analyse de stabilité linéaire - Transition en ruisselets . . . . .</b>	<b>173</b>
6.2.1	Etablissement des équations et adimensionnement . . . . .	174
6.2.2	Linéarisation du système autour d'un état d'équilibre . . . . .	175
6.2.3	Relation de dispersion . . . . .	177
6.2.4	Résolution analytique . . . . .	177
6.2.5	Conclusion et discussion . . . . .	178
<b>6.3</b>	<b>Schéma de discrétisation numérique . . . . .</b>	<b>178</b>
6.3.1	Notations . . . . .	179
6.3.2	Méthode de calcul des gradients discrets . . . . .	181
6.3.3	Méthode d'interpolation en un point . . . . .	184
6.3.4	Intégration par la méthode des Volume Finis . . . . .	186
6.3.5	Schéma de discrétisation spatiale . . . . .	187
6.3.6	Schéma de discrétisation temporel . . . . .	190
6.3.7	Condition sur le pas de temps de simulation . . . . .	191

<b>6.4</b>	<b>Conditions aux limites</b>	<b>192</b>
<b>6.5</b>	<b>Résultats de validations élémentaires</b>	<b>192</b>
6.5.1	Calcul imprécis de la variable $p$	192
6.5.2	Solutions envisagées	192
6.5.3	Solution temporaire adoptée	193
<b>6.6</b>	<b>Conclusion du chapitre</b>	<b>194</b>

## 6.1 Etablissement du modèle continu

### 6.1.1 Hypothèses du problème et conditions aux limites

Le problème mathématique est formulé en considérant un film liquide incompressible en trois dimensions cisailé par un gaz et se déplaçant sur un substrat solide. Les axes  $x$  et  $y$  sont orthogonaux et parallèles au substrat et l'axe  $z$  est perpendiculaire. La surface du liquide correspond donc à  $z = h(x, y, t)$  et le champ de vitesse admet une composante  $u^x(x, y, z, t)$  longitudinale, une composante  $u^y(x, y, z, t)$  transversale, et une composante  $v(x, y, z, t)$  normale à l'écoulement. Les effets de courbure du substrat sont négligés, il est alors considéré comme un plan incliné localement d'un angle  $\beta^x(x, y)$  par rotation autour de l'axe  $x$  et d'un angle  $\beta^y(x, y)$  autour de l'axe  $y$ .

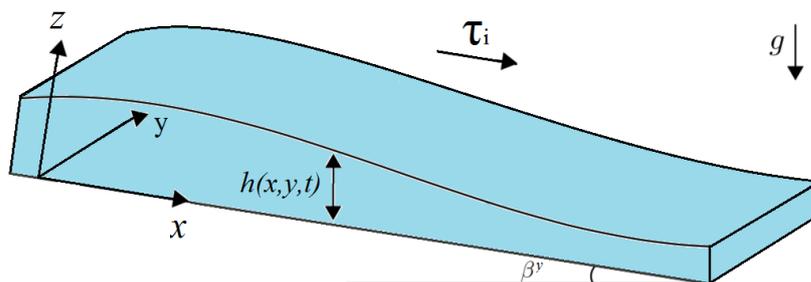


FIGURE 6.1 – Schéma 3D d'un film liquide s'écoulant sur un plan incliné d'un angle  $\beta$ .

On rappelle les conditions aux limites (généralisées en 3D) choisies à la section 3.1.2 pour le champ de vitesse  $\mathbf{u}(x, y, z, t) = {}^t(u^x, u^y)$  dans le plan  $(xy)$ , le champ de vitesse  $v(x, y, z, t)$  dans la direction  $z$ , et le champ de pression  $P(x, y, z, t)$ . On applique une condition aux limites de nullité à la paroi pour le champ de vitesse  $v(x, y, z, t)$  :

$$v(z = 0) = 0 \tag{6.1}$$

une condition de Navier pour le champ de vitesse  $\mathbf{u}(x, y, z, t)$  :

$$\mathbf{u}(z = 0) = \frac{b}{3} \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} \right)_{(z=0)} \tag{6.2}$$

avec  $b$  la longueur de glissement, et une condition de continuité des contraintes tangentielles à l'interface *liquide/gaz* :

$$\mu \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} \right)_{(z=h)} = \mu_g \left( \frac{\partial \mathbf{u}_g}{\partial z} \right)_{(z=h)} = \boldsymbol{\tau}_i \tag{6.3}$$

avec  $\mathbf{u}_g(x, y, z, t)$  le champ de vitesse dans le plan (xy) de la phase gazeuse et  $\boldsymbol{\tau}_i = {}^t(\tau_i^x, \tau_i^y)$  le taux de cisaillement du gaz supposé connu. On applique également la condition de saut de pression à l'interface suivante :

$$P(x, y, z = h) = P_g(x, y) + \gamma_{lg} K(x, y) + \Pi^d(h) \quad (6.4)$$

avec  $\Pi^d(h) = \frac{\partial e_{disj}}{\partial h}$  la pression induite dans le film par les interactions moléculaires entre les interfaces *solide/liquide* et *liquide/gaz* de densité surfacique d'énergie  $e_{disj}(h)$ , et  $K(x, y)$  la courbure totale de l'interface *liquide/gaz* qui s'écrit de manière exacte sous la forme conservative suivante

$$K(x, y) = -\nabla \cdot \left[ \frac{\nabla h}{(1 + |\nabla h|^2)^{1/2}} \right] \quad (6.5)$$

avec  $\nabla \cdot (*)$  l'opérateur divergence et  $\nabla (*)$  l'opérateur gradient.

### 6.1.2 Dérivation de l'équation de lubrification

Dans le cadre des écoulements rencontrés dans nos applications qui sont à faibles nombres de Reynolds et à ondes longues, on rappelle que la dynamique d'un film liquide mince peut être décrite avec une bonne précision par l'équation de lubrification qui s'écrit en trois dimensions

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot [h \bar{\mathbf{u}}] = 0 \quad (6.6)$$

avec  $\bar{\mathbf{u}}$  le champ de vitesse dans le plan (xy) moyenné sur la hauteur du film dont il faut déterminer une expression analytique en fonction de l'épaisseur  $h$  du film afin de fermer l'équation (6.6). Une expression peut s'obtenir par résolution approchée des équations de N-S dans nos hypothèses d'étude qui sont

$$Re \sim 1, \quad \begin{cases} Fr \sim 1 \\ Fr \gg 1 \end{cases}, \quad We \ll 1 \quad (6.7)$$

La résolution est analogue à celle décrite à la section 3.1.4 dans le cas du modèle bidimensionnel et permet d'obtenir le champ de vitesse de type Poiseuille et le champ de pression suivant

$$\mathbf{u}(x, y, z) = \mathbf{u}_{(x,y,z)}^{Poiseuille} = \frac{1}{\mu} [\nabla P - \rho \mathbf{g}_t] \left( \frac{z^2}{2} - h(z + b/3) \right) + \frac{\boldsymbol{\tau}_i}{\mu} (z + b/3) \quad (6.8a)$$

$$\bar{\mathbf{u}}(x, y) = \bar{\mathbf{u}}_{(x,y)}^{Poiseuille} = -\frac{h(h+b)}{3\mu} \left[ \nabla P - \rho \mathbf{g}_t - \frac{3\boldsymbol{\tau}_i}{2h} \left( \frac{h + \frac{2}{3}b}{h+b} \right) \right] \quad (6.8b)$$

$$P(x, y, z) = P_g + \underbrace{\gamma_{lg} \nabla \cdot \left[ \frac{-\nabla h}{(1 + |\nabla h|^2)^{1/2}} \right] + \rho g^z [h - z] + \left( \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right)}_{= P^*(x,y)} \quad (6.8c)$$

avec  $\mathbf{g}_t = {}^t(g^x, g^y)$  et  $g^z$  respectivement l'accélération gravitationnelle projetée sur le plan (xy) et sur l'axe z. L'équation de lubrification décrivant l'évolution temporelle de

l'épaisseur  $h(x, y, t)$  d'un film liquide 3D s'écrit alors

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \left( -\frac{h^2(h+b)}{3\mu} + \nabla \left( \rho g^z [h-z] + \left( \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right) \right) \right) - \rho \mathbf{g}_t - \frac{3\tau_i}{2h} \left( \frac{h + \frac{2}{3}b}{h+b} \right) = 0 \quad (6.9)$$

Comme sa version bidimensionnelle, cette équation est du quatrième ordre en espace. Elle va donc être remplacée par un système d'équations de type Saint Venant mieux adapté à une formulation de type Volume Finis sur maillage non-structuré.

### 6.1.3 Dérivation du système équivalent de type Saint Venant

#### Ecriture et fermeture des équations

La démonstration permettant d'obtenir le bilan intégral 2D de conservation de la quantité de mouvement à la section 3.2.1 se généralise aisément en trois dimensions. Le système d'équation de type Saint Venant décrivant l'évolution temporelle de l'épaisseur  $h$  et du débit volumique linéique  $\mathbf{q} = h\bar{\mathbf{u}}$  d'un film liquide 3D est donné par :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot [h \bar{\mathbf{u}}] = 0 \quad (6.10a)$$

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{q})}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho h \overline{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}}] = -h \nabla P^* + h [\rho \mathbf{g}_t - \nabla P_g] - \tau_w + \tau_i \quad (6.10b)$$

où la pression  $P^*$  s'écrit

$$P^* = \gamma_{lg} \nabla \cdot \left[ \frac{-\nabla h}{(1 + |\nabla h|^2)^{1/2}} \right] + \rho g^z [h-z] + \left( \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right) \quad (6.11)$$

et où le produit tensoriel moyen  $\overline{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}}$  est donné par

$$\overline{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}} = \begin{bmatrix} \overline{u^x u^x} & \overline{u^x u^y} \\ \overline{u^y u^x} & \overline{u^y u^y} \end{bmatrix} \quad (6.12)$$

La contrainte visqueuse du fluide sur la paroi solide  $\tau_w$  et le produit tensoriel moyen  $\overline{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}}$  constituent deux inconnues de trop qu'il faut exprimer analytiquement en fonction de  $h$  et de  $\mathbf{q}$ . En supposant que le profil de vitesse  $\mathbf{u}(x, y, z)$  est donné par l'expression analytique (6.8a), la contrainte visqueuse s'écrit

$$\tau_w = \mu \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial z} \right)_{(z=0)} = \frac{3\mu \mathbf{q}}{h(h+b)} - \frac{\tau_i}{2} \left( \frac{h}{h+b} \right) \quad (6.13)$$

et en prenant le produit tensoriel

$$\overline{\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}} \simeq \bar{\mathbf{u}} \otimes \bar{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix} \bar{u}^x \bar{u}^x & \bar{u}^x \bar{u}^y \\ \bar{u}^y \bar{u}^x & \bar{u}^y \bar{u}^y \end{bmatrix} \quad (6.14)$$

Le modèle de type Saint Venant proposé s'écrit

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot [h \bar{\mathbf{u}}] = 0 \quad (6.15a)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{q})}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho h \bar{\mathbf{u}} \otimes \bar{\mathbf{u}}] = -h \nabla P^* + h [\rho \mathbf{g}t - \nabla P_g] - \frac{3\mu \mathbf{q}}{h(h+b)} + \frac{3}{2} \tau_i - \frac{\tau_i b}{2(h+b)} \quad (6.15b)$$

### Justification des fermetures

On montre facilement que le bilan (6.15b) peut s'écrire sous la forme non-conservative suivante

$$\frac{D\bar{\mathbf{u}}}{Dt} = \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial t} + \{\bar{\mathbf{u}} \mid \nabla \bar{\mathbf{u}}\} = -\frac{\bar{\mathbf{u}}(x, y, t) - \bar{\mathbf{u}}_{(x,y)}^{Poiseuille}}{T_\nu} \quad (6.16)$$

avec  $T_\nu = \rho h(h+b)/3\mu$  une échelle de temps et  $\bar{\mathbf{u}}_{(x,y)}^{Poiseuille}$  le profil de vitesse analytique utilisé pour fermer l'équation de lubrification (6.9). Cette équation a déjà été résolue à la section 3.2.2, et on en déduit que le champs de vitesse vérifie aux échelles de temps  $T_{obs} = L_o/u_o$  d'étalement du film liquide

$$\bar{\mathbf{u}}(x, y, t = T_{obs}) \simeq \bar{\mathbf{u}}_{(x,y)}^{Poiseuille} \quad (6.17)$$

Les fermetures respectives (6.13) et (6.14) sur la contrainte visqueuse et le produit tensoriel sont justifiées car elles garantissent que le système de type Saint Venant (6.15) proposé est équivalent à l'équation de lubrification (6.9) aux échelles de temps étudiées.

#### 6.1.4 Système augmenté

Par extension tridimensionnelle de l'idée de Noble et Vila [12], on considère une nouvelle inconnue  $\mathbf{p} = \nabla h$  dont l'équation d'évolution s'obtient en dérivant spatialement le bilan intégral de masse (6.6)

$$\begin{aligned} & \nabla \left[ \frac{\partial h}{\partial t} \right] + \nabla [\nabla \cdot (h \bar{\mathbf{u}})] = 0 \\ \implies & \frac{\partial}{\partial t} [\nabla h] + \nabla [ \{ \nabla h \mid \bar{\mathbf{u}} \} + \nabla (h \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}})) ] = 0 \\ \implies & \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} + \nabla [ \{ \mathbf{p} \mid \bar{\mathbf{u}} \} ] = -\nabla [ (h \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}})) ] \end{aligned} \quad (6.18)$$

En ajoutant (6.18) au système de Saint Venant (6.15), on obtient le système à trois équations suivant :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot [h \bar{\mathbf{u}}] = 0 \quad (6.19a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} + \nabla [ \{ \mathbf{p} \mid \bar{\mathbf{u}} \} ] = -\nabla [ (h \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}})) ] \quad (6.19b)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{q})}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho h \bar{\mathbf{u}} \otimes \bar{\mathbf{u}}] + h \nabla P^* = \mathcal{S}(h, \rho \mathbf{q}) \quad (6.19c)$$

avec  $\mathcal{S}(h, \rho \mathbf{q})$  la somme des termes sources donnée par

$$\mathcal{S}(h, \rho \mathbf{q}) = \underbrace{-\frac{3 \nu \rho \mathbf{q}}{h(h+b)}}_{\mathcal{S}_\nu(h, \rho \mathbf{q})} + \underbrace{h [\rho \mathbf{g}t - \nabla P_g] + \frac{3}{2} \tau_i - \frac{\tau_i}{2} \left( \frac{b}{h+b} \right)}_{\mathcal{S}_{g, \tau}(h)} \quad (6.20)$$

où l'on distinguera les termes sources visqueux  $\mathcal{S}_\nu(h, \rho\mathbf{q})$  des autres termes sources volumiques et de cisaillement  $\mathcal{S}_{g,\tau}(h)$ . Ce système est uniquement du second ordre en espace et les inconnues sont l'épaisseur  $h$  du film, le gradient spatial d'épaisseur du film  $\mathbf{p} = {}^t(p^x, p^y)$  et le débit massique linéique  $\rho\mathbf{q} = {}^t(\rho q^x, \rho q^y)$ .

### 6.1.5 Mise sous forme conservative du bilan de quantité de mouvement

Nous cherchons l'expression d'un tenseur  $\underline{\underline{\mathcal{F}}}$ , qui vérifie :

$$\nabla \cdot \underline{\underline{\mathcal{F}}} = h \nabla P^* \quad (6.21)$$

avec  $P^*(x, y, z)$  la pression dans le liquide donnée par :

$$P^*(x, y, z) = \rho g^z [h - z] + \left( \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right) + \gamma_{lg} \nabla \cdot \left[ \frac{-\mathbf{p}}{(1 + |\mathbf{p}|^2)^{1/2}} \right] \quad (6.22)$$

En introduisant la densité surfacique d'énergie totale d'un film liquide 3D donnée par

$$e_{film}(x, y) = \underbrace{\frac{\rho h |\bar{\mathbf{u}}|^2}{2}}_{= e_{cin}} + \underbrace{\frac{\rho g^z h^2}{2}}_{= e_{grav}} + \underbrace{\gamma_{sl} + \gamma_{lg} \sqrt{1 + |\mathbf{p}|^2}}_{= e_{capi}} + e_{disj}(h) \quad (6.23)$$

ainsi que la variable thermodynamique  $\varphi$  conjuguée à la variable conservative  $\mathbf{U} = {}^t(h, \mathbf{p}, \rho\mathbf{q})$  du système (6.19)

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi^h \\ \varphi^{\mathbf{p}} \\ \varphi^{\rho\mathbf{q}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial e_{film}/\partial h}{\left( \frac{\partial e_{film}/\partial p^x} \right)} \\ \left( \frac{\partial e_{film}/\partial p^y} \right)} \\ \left( \frac{\partial e_{film}/\partial \rho q^x} \right)} \\ \left( \frac{\partial e_{film}/\partial \rho q^y} \right)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho g^z h - \frac{\rho |\mathbf{u}|^2}{2} + \left( \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right) \\ \gamma_{lg} \frac{\mathbf{p}}{\sqrt{1 + |\mathbf{p}|^2}} \\ \bar{\mathbf{u}} \end{pmatrix} \quad (6.24)$$

On peut montrer que

$$\begin{aligned} h \nabla P^* &= h \nabla \left[ \frac{\partial e_{grav}}{\partial h} + \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right] - h \nabla [\nabla \cdot (\varphi^{\mathbf{p}})] \\ &= h \nabla \cdot \left[ \left( \frac{\partial e_{grav}}{\partial h} + \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right) \underline{\underline{I}} \right] - h \nabla \cdot [\nabla \cdot (\varphi^{\mathbf{p}}) \underline{\underline{I}}] \end{aligned} \quad (6.25)$$

avec  $\underline{\underline{I}}$  la matrice identité. Le premier terme de (6.25) peut s'écrire sous la forme conservative suivante :

$$\begin{aligned} h \nabla \left[ \frac{\partial e_{grav}}{\partial h} + \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right] &= \nabla \left[ h \left( \frac{\partial e_{grav}}{\partial h} + \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right) \right] - \overbrace{\left( \frac{\partial e_{grav}}{\partial h} + \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right) \nabla h}^{= \nabla [e_{grav} + e_{disj}]} \\ &= \nabla \left[ \left( h \frac{\partial e_{grav}}{\partial h} - e_{grav} \right) + \left( h \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} - e_{disj} \right) \right] \\ &= \nabla \cdot \left[ \left( h \frac{\partial e_{grav}}{\partial h} - e_{grav} \right) \underline{\underline{I}} + \left( h \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} - e_{disj} \right) \underline{\underline{I}} \right] \end{aligned} \quad (6.26)$$

Et le second terme peut se décomposer sous la forme :

$$-h \nabla [\nabla \cdot (\varphi^{\mathbf{p}})] = -\nabla [h \nabla \cdot (\varphi^{\mathbf{p}})] + \nabla \cdot (\varphi^{\mathbf{p}}) \mathbf{p} \quad (6.27)$$

tel que :

$$\begin{aligned}
& \nabla \cdot (\varphi^p) \mathbf{p} \\
&= \begin{bmatrix} \nabla \cdot (\varphi^p) p^x \\ \nabla \cdot (\varphi^p) p^y \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \nabla \cdot (p^x \varphi^p) \\ \nabla \cdot (p^y \varphi^p) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \{\varphi^p \mid \nabla p^x\} \\ \{\varphi^p \mid \nabla p^y\} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} (p^x \varphi^p) + \frac{\partial}{\partial y} (p^x \varphi^p) \\ \frac{\partial}{\partial x} (p^y \varphi^p) + \frac{\partial}{\partial y} (p^y \varphi^p) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \varphi^{p^x} \left( \frac{\partial p^x}{\partial x} \right) + \varphi^{p^y} \left( \frac{\partial p^y}{\partial x} \right) \\ \varphi^{p^x} \left( \frac{\partial p^x}{\partial y} \right) + \varphi^{p^y} \left( \frac{\partial p^y}{\partial y} \right) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \varphi^{p^y} \left( \frac{\partial p^x}{\partial y} - \frac{\partial p^y}{\partial x} \right) \\ \varphi^{p^x} \left( \frac{\partial p^y}{\partial x} - \frac{\partial p^x}{\partial y} \right) \end{bmatrix} \\
&= \nabla \cdot [\mathbf{p} \otimes \varphi^p] - (\varphi^{p^x} \nabla p^x + \varphi^{p^y} \nabla p^y) - \text{curl}(\mathbf{p}) \begin{bmatrix} \varphi^{p^y} \\ -\varphi^{p^x} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{6.28}$$

avec  $\text{curl}(\mathbf{w})$  l'opérateur rotationnel qui renvoie pour tout champ de vecteur  $\mathbf{w} = {}^t(w^x, w^y)$  dans  $\mathbb{R}^2$  le scalaire suivant :

$$\text{curl}(\mathbf{w}) = \nabla \cdot (\mathbf{w}^\perp) = \frac{\partial w^y}{\partial x} - \frac{\partial w^x}{\partial y} \tag{6.29}$$

avec  $\mathbf{w}^\perp = {}^t(w^y, -w^x)$  l'orthogonal de  $\mathbf{w}$  obtenu par rotation de  $\pi/2$  autour de l'axe  $z$ . Dans le cas particulier où le champ de vecteur est un gradient, soit  $\mathbf{w} = \nabla f$  avec  $f(x, y)$  un champ scalaire continu et dérivable, on a

$$\text{curl}(\mathbf{w}) = \frac{\partial w^y}{\partial x} - \frac{\partial w^x}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial f}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right) = 0 \tag{6.30}$$

En supposant que la variable  $\mathbf{p}$  de notre système est un gradient (hypothèse vraie si  $p = \nabla h$  à l'instant initial), on en déduit que  $\text{curl}(\mathbf{p}) = 0$  et que la relation (6.28) s'écrit

$$\nabla \cdot (\varphi^p) \mathbf{p} = \nabla \cdot [\mathbf{p} \otimes \varphi^p] - (\varphi^{p^x} \nabla p^x + \varphi^{p^y} \nabla p^y) \tag{6.31}$$

Enfin, en remarquant que :

$$\nabla e_{capi} = \left( \frac{\partial e_{capi}}{\partial p^x} \nabla p^x + \frac{\partial e_{capi}}{\partial p^y} \nabla p^y \right) = (\varphi^{p^x} \nabla p^x + \varphi^{p^y} \nabla p^y) \tag{6.32}$$

On obtient :

$$\nabla \cdot (\varphi^p) \mathbf{p} = \nabla \cdot [\mathbf{p} \otimes \varphi^p - e_{capi} \underline{\underline{I}}] \tag{6.33}$$

Le tenseur de force linéique  $\underline{\underline{F}}$  qui vérifie (6.21) admet finalement comme expression

$$\begin{aligned}
\underline{\underline{F}}(h, \mathbf{p}, \nabla \cdot (\mathbf{p})) &= \left[ \left( h \frac{\partial e_{grav}}{\partial h} - e_{grav} \right) + \left( h \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} - e_{disj} \right) \right] \underline{\underline{I}} \\
&+ [\mathbf{p} \otimes \varphi^p - e_{capi} \underline{\underline{I}}] - [h \nabla \cdot (\varphi^p)] \underline{\underline{I}} \\
&= \left[ \rho g^z \frac{h^2}{2} + \gamma l_g [1 - \cos(\theta_s)] \left[ 1 + \frac{h}{h_*} \right] e^{-h/h_*} \right] \underline{\underline{I}} \\
&+ \left[ \frac{\gamma l_g}{\sqrt{1 + |\mathbf{p}|^2}} \mathbf{p} \otimes \mathbf{p} \right] - \left[ \gamma l_g \sqrt{1 + |\mathbf{p}|^2} + \gamma_{sl} \right] \underline{\underline{I}} \\
&- \left[ h \nabla \cdot \left( \frac{\gamma l_g \mathbf{p}}{\sqrt{1 + |\mathbf{p}|^2}} \right) \right] \underline{\underline{I}}
\end{aligned} \tag{6.34}$$

Et le système proposé s'écrit sous la forme conservative suivante

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot [h \bar{\mathbf{u}}] = 0 \quad (6.35a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} + \nabla [\{\mathbf{p} \mid \bar{\mathbf{u}}\}] = -\nabla [h \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}})] \quad (6.35b)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{q})}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho h \bar{\mathbf{u}} \otimes \bar{\mathbf{u}}] + \nabla \cdot [\underline{\underline{\mathcal{F}}}(h, \mathbf{p}, \nabla \cdot (\mathbf{p}))] = \mathcal{S}(h, \rho \mathbf{q}) \quad (6.35c)$$

### 6.1.6 Equation de conservation de l'énergie

Nous souhaitons montrer que le système tridimensionnel proposé est consistant thermodynamiquement, i.e. qu'il est compatible avec les deux premiers principes de la thermodynamique énoncés à la section 3.3. Ces principes imposent que la variation d'énergie libre d'un système thermodynamique isotherme au cours d'une transformation irréversible est inférieure ou égale au travail des forces extérieures non-conservatives  $\delta W$ . On cherche ainsi à prouver que l'énergie totale  $E_{film} = \int_{\Omega} e_{film} d\Omega$  vérifie

$$dE_{film} \leq \delta W \quad (6.36)$$

En introduisant les transformées de Legendre des densités surfaciques d'énergies suivantes :

$$\underline{\underline{\mathcal{L}}}^d(e_{disj}) = \left[ h \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} - e_{disj}(h) \right] \underline{\underline{I}} \quad (6.37a)$$

$$\underline{\underline{\mathcal{L}}}^g(e_{grav}) = \left[ h \frac{\partial e_{grav}}{\partial h} - e_{grav}(h) \right] \underline{\underline{I}} \quad (6.37b)$$

$$\underline{\underline{\mathcal{L}}}^\gamma(e_{capi}) = \mathbf{p} \otimes \boldsymbol{\varphi}^p - e_{capi} \underline{\underline{I}} \quad (6.37c)$$

L'expression (6.34) du tenseur de force linéique peut se ré-écrire :

$$\underline{\underline{\mathcal{F}}}(h, \mathbf{p}) = \underline{\underline{\mathcal{L}}}^d + \underline{\underline{\mathcal{L}}}^g + \underline{\underline{\mathcal{L}}}^\gamma - [h \nabla \cdot (\boldsymbol{\varphi}^p)] \underline{\underline{I}} \quad (6.38)$$

Et le système (6.35) devient

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot [h \bar{\mathbf{u}}] = 0 \quad (6.39a)$$

$$\frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} + \nabla [\{\mathbf{p} \mid \bar{\mathbf{u}}\}] + \nabla [h \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}})] = 0 \quad (6.39b)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{q})}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho h \bar{\mathbf{u}} \otimes \bar{\mathbf{u}}] + \nabla \cdot [\underline{\underline{\mathcal{L}}}^d + \underline{\underline{\mathcal{L}}}^g + \underline{\underline{\mathcal{L}}}^\gamma] - \nabla [h \nabla \cdot (\boldsymbol{\varphi}^p)] = \mathcal{S}(h, \rho \mathbf{q}) \quad (6.39c)$$

En calculant le produit scalaire du système (6.39) avec la variable conjuguée  $\varphi$  définie par (6.24), et en utilisant les relations suivantes :

$$\frac{\partial e_{film}}{\partial t} = \varphi^h \frac{\partial h}{\partial t} + \left\{ \varphi^p \mid \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} \right\} + \left\{ \varphi^{\rho q} \mid \frac{\partial \rho \mathbf{q}}{\partial t} \right\} \quad (6.40a)$$

$$\varphi^h \nabla \cdot [h \bar{\mathbf{u}}] = \nabla \cdot [(e_{disj} + e_{grav}) \bar{\mathbf{u}}] + \underline{\underline{\mathcal{L}}}^{d+g} \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}}) + \left( \frac{\partial e_{cin}}{\partial h} \right) \nabla \cdot [h \bar{\mathbf{u}}] \quad (6.40b)$$

$$\left\{ \varphi^p \mid \nabla \cdot [\mathbf{p} \mid \bar{\mathbf{u}}] \right\} = \nabla \cdot [e_{capi} \bar{\mathbf{u}}] + \nabla \cdot [\underline{\underline{\mathcal{L}}}^\gamma \bar{\mathbf{u}}] - \left\{ \bar{\mathbf{u}} \mid \nabla \cdot [\underline{\underline{\mathcal{L}}}^\gamma] \right\} \quad (6.40c)$$

$$\left\{ \varphi^p \mid \nabla [h \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}})] \right\} = \nabla \cdot [h \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}}) \varphi^p] - h \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}}) \nabla \cdot (\varphi^p) \quad (6.40d)$$

$$\left\{ \varphi^{\rho q} \mid \nabla \cdot [\rho h \bar{\mathbf{u}} \otimes \bar{\mathbf{u}}] \right\} = \nabla \cdot [e_{cin} \bar{\mathbf{u}}] - \left( \frac{\partial e_{cin}}{\partial h} \right) \nabla \cdot [h \bar{\mathbf{u}}] \quad (6.40e)$$

$$\left\{ \varphi^{\rho q} \mid \nabla \cdot [\underline{\underline{\mathcal{L}}}^{d+g} + \underline{\underline{\mathcal{L}}}^\gamma] \right\} = \nabla \cdot [\underline{\underline{\mathcal{L}}}^{d+g} \bar{\mathbf{u}}] - \underline{\underline{\mathcal{L}}}^{d+g} \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}}) + \left\{ \bar{\mathbf{u}} \mid \nabla \cdot [\underline{\underline{\mathcal{L}}}^\gamma] \right\} \quad (6.40f)$$

$$\left\{ \varphi^{\rho q} \mid -\nabla [h \nabla \cdot (\varphi^p)] \right\} = -\nabla \cdot [h \nabla \cdot (\varphi^p) \bar{\mathbf{u}}] + h \nabla \cdot (\varphi^p) \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}}) \quad (6.40g)$$

On obtient l'équation différentielle sous forme conservative suivante :

$$\frac{\partial e_{film}}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \begin{array}{l} [e_{film} \bar{\mathbf{u}}] + [(\underline{\underline{\mathcal{L}}}^d + \underline{\underline{\mathcal{L}}}^g + \underline{\underline{\mathcal{L}}}^\gamma) \bar{\mathbf{u}}] \\ + [h \nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}}) \varphi^p] - [h \nabla \cdot (\varphi^p) \bar{\mathbf{u}}] \end{array} \right) = \{ \bar{\mathbf{u}} \mid \mathcal{S}(h, \rho \mathbf{q}) \} \quad (6.41)$$

En intégrant cette équation sur l'ensemble du domaine physique  $\Omega$ , et en supposant des conditions aux limites périodiques aux bords du domaine, la variation temporelle de l'énergie totale du système  $E_{film}$  s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{dE_{film}}{dt} &= \int_{\Omega} \{ \bar{\mathbf{u}} \mid \mathcal{S}(h, \rho \mathbf{q}) \} d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \underbrace{\left\{ \bar{\mathbf{u}} \mid h [\rho \mathbf{g}_t - \nabla P_g] + \frac{3}{2} \tau_i - \frac{\tau_i}{2} \left( \frac{b}{h+b} \right) \right\}}_{\dot{W}} d\Omega \\ &\quad + \int_{\Omega} \underbrace{\left[ -\frac{3\mu \|\bar{\mathbf{u}}\|^2}{h+b} \right]}_{\dot{D} \leq 0} d\Omega \end{aligned} \quad (6.42)$$

Puisque les forces de viscosité  $\dot{D}$  sont toujours dissipatives, le système (6.35) proposé est donc consistant thermodynamiquement puisque le taux de variation de l'énergie totale  $E_{film}$  du système est inférieur ou égal à la somme des puissance des forces extérieures non-conservatives  $\dot{W}$ .

## 6.2 Analyse de stabilité linéaire - Transition en ruisselets

On cherche à vérifier dans cette section que le modèle continu proposé est capable de reproduire des instabilités en "ruisselets". La stabilité du film liquide est étudiée en utilisant l'équation de lubrification (6.9), qui a été démontrée à la section 6.1.3 équivalente au système augmenté de type Saint Venant proposé. On s'intéresse au cas particulier d'un film liquide injecté à débit constant sur un plan incliné et avec une couche limite gazeuse au repos, qui a été étudié expérimentalement par Johnson [31]. La stabilité de ce cas a

également été étudiée théoriquement par de nombreux auteurs [87, 88, 89] dans le cas d'un film totalement mouillant ( $\theta_s = 0^\circ$ ). Ils ont montré que le facteur d'amplification temporel  $\omega_i(k)$  d'une perturbation transversale à l'écoulement de nombre d'onde  $k$  petit s'écrit (cf. chapitre 2) :

$$\omega_i(k) \propto \left( \int_{-\infty}^0 \left[ \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} \right] \left[ \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} - 1 \right] \left[ 1 + \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} + \frac{b}{h^{Nu}} \right] d\tilde{\xi} \right) k^2 \quad (6.43)$$

À notre connaissance, aucune extension de cette expression analytique au cas d'un film partiellement mouillant n'a été démontrée. On propose ainsi une analyse de stabilité linéaire qui tient compte des phénomènes de mouillage via notre modèle de densité surfacique d'énergie de disjonction (3.100), et nous discuterons de l'influence des propriétés de mouillage sur la stabilité du film. Nous présentons les étapes principales de l'étude de stabilité et nous invitons le lecteur à se référer à l'annexe C pour une description plus détaillée.

### 6.2.1 Etablissement des équations et adimensionnement

On considère un film liquide injecté avec un débit volumique linéique  $\mathbf{q} = {}^t [q_o, 0]$  uniforme dans la direction  $y$  sur un plan incliné d'un angle  $\beta$  par rotation autour de l'axe  $y$ , on a alors :

$$\mathbf{g}_t = \begin{bmatrix} g \sin(\beta) \\ 0 \end{bmatrix}, \quad g^z = g \cos(\beta), \quad \boldsymbol{\tau}_i = \mathbf{0}, \quad \nabla P_g = \mathbf{0} \quad (6.44)$$

Les profils issus de résultats expérimentaux [31] et de simulations numériques [97] montrent que si aucune perturbation n'est imposée au voisinage de la ligne triple, elle avance à vitesse constante  $\mathbf{V} = {}^t [V^x, 0]$  sans développer aucune structure dans la direction  $y$ , comme représenté sur la figure 6.2. Le champ d'épaisseur du film se caractérise par un bourrelet près de la ligne triple, un écoulement de Nusselt loin de la ligne, et peut être décrit par  $h(x, y, t) = h_o(\xi)$  où  $\xi = x - V^x t$ , correspondant à un profil d'onde progressive avançant à vitesse constante  $V^x$ .

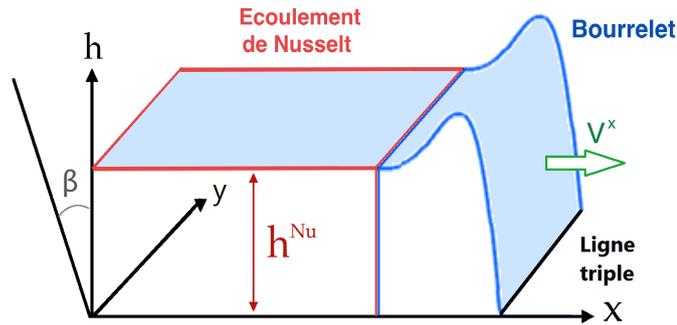


FIGURE 6.2 – Représentation d'un film s'écoulant à débit constant uniformément dans la direction transversale  $y$ .

Sous les hypothèses (6.44), et en appliquant les changements de variable

$$\xi = x - V^x t \quad (6.45a)$$

$$\bar{\mathbf{u}}^* = \bar{\mathbf{u}} - \mathbf{V} \quad (6.45b)$$

l'évolution temporelle de l'épaisseur  $h(\xi, y, t)$  du film dans le repère mobile avançant à vitesse constante  $\mathbf{V}$  est donnée par l'équation de lubrification suivante

$$\frac{\partial h}{\partial t} - V^x \frac{\partial h}{\partial \xi} = \left[ \begin{array}{l} \nabla \cdot \left( \frac{h^2(h+b)}{3\mu} \nabla \left[ \gamma l_g \nabla \cdot \left[ \frac{-\nabla h}{(1+|\nabla h|^2)^{1/2}} \right] \right. \right. \\ \left. \left. + \rho g \cos(\beta) [h-z] + \left( \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right) \right] \right) \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{h^2(h+b)}{3\mu} \rho g \sin(\beta) \right] \end{array} \right] \quad (6.46)$$

En procédant à un adimensionnement en posant

$$\xi = \tilde{\xi} L_o, \quad y = \tilde{y} L_o, \quad V^x = \tilde{V}^x \bar{u}^{Nu}, \quad t = \tilde{t} t_o \quad (6.47a)$$

$$h = \tilde{h} h^{Nu}, \quad b = \tilde{b} h^{Nu}, \quad e_{disj} = \tilde{e}_{disj} \gamma l_g \quad (6.47b)$$

avec

$$\bar{u}^{Nu} = \frac{h^{Nu}(h^{Nu} + b)}{3\mu} \rho g \sin(\beta), \quad t_o = \frac{L_o}{\bar{u}^{Nu}}, \quad L_o = \left[ \frac{h^{Nu} l_c^2}{\sin(\beta)} \right]^{1/3} \quad (6.48)$$

L'équation de lubrification décrivant l'évolution de l'épaisseur  $\tilde{h}(\tilde{\xi}, \tilde{y}, \tilde{t})$  d'un film s'écrit :

$$\frac{\partial \tilde{h}}{\partial \tilde{t}} - \tilde{V}^x \frac{\partial \tilde{h}}{\partial \tilde{\xi}} = \frac{1}{1 + \tilde{b}} \left( \begin{array}{l} D_g(\beta) \nabla \cdot \left[ \tilde{h}^2(\tilde{h} + \tilde{b}) \nabla \tilde{h} \right] \\ - \nabla \cdot \left[ \tilde{h}^2(\tilde{h} + \tilde{b}) \nabla \left( \nabla \cdot \left[ \frac{\nabla \tilde{h}}{(1+|\nabla \tilde{h}|^2)^{1/2}} \right] \right) \right] \\ + D_{disj}(\beta) \nabla \cdot \left[ \tilde{h}^2(\tilde{h} + \tilde{b}) \underbrace{\nabla \left( \frac{\partial \tilde{e}_{disj}}{\partial \tilde{h}} \right)}_{= f_d(\tilde{h}) \nabla \tilde{h}} \right] \\ - \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \left[ \tilde{h}^2(\tilde{h} + \tilde{b}) \right] \end{array} \right) \quad (6.49)$$

où  $D_{disj}(\beta)$ ,  $D_g(\beta)$ ,  $C_a$  et  $f_d(\tilde{h})$  ont pour expression

$$D_{disj}(\beta) = \left( \frac{3 C_a}{1 + \tilde{b}} \right)^{-2/3}, \quad C_a = \frac{\mu \bar{u}^{Nu}}{\gamma l_g} \quad (6.50a)$$

$$D_g(\beta) = \left( \frac{3 C_a}{1 + \tilde{b}} \right)^{1/3} \cot(\beta), \quad f_d(\tilde{h}) = \left( \frac{\partial^2 \tilde{e}_{disj}}{\partial \tilde{h}^2} \right) \quad (6.50b)$$

### 6.2.2 Linéarisation du système autour d'un état d'équilibre

Si la ligne triple est perturbée (par des forces extérieures ou des hétérogénéités du substrat), on constate expérimentalement qu'une instabilité transversale à l'écoulement (dans la direction  $\tilde{y}$ ) peut apparaître et le front d'avancement du liquide transitionne en ruisselets, comme représenté sur la figure (6.3).

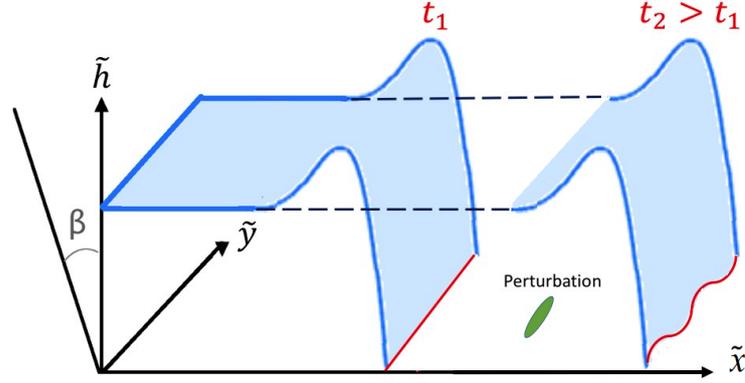


FIGURE 6.3 – Représentation de l'apparition d'une instabilité transversale au voisinage du point triple d'un film s'écoulant à débit constant uniformément dans la direction transversale  $\tilde{y}$ .

On étudie alors la stabilité du film liquide en imposant :

$$\tilde{h}(\tilde{\xi}, \tilde{y}, \tilde{t}) = \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \varepsilon \tilde{h}_1(\tilde{\xi}, \tilde{y}, \tilde{t}) \quad (6.51)$$

qui se compose du profil en onde progressive  $\tilde{h}_o(\xi)$  auquel on applique une perturbation  $\varepsilon \tilde{h}_1(\tilde{\xi}, \tilde{y}, \tilde{t})$  dans la direction transversale  $\tilde{y}$ , avec  $\varepsilon \ll 1$  l'amplitude infinitésimale de la perturbation. En injectant cette décomposition dans l'équation de lubrification (C.6), et en se plaçant dans l'hypothèse "onde longue", soit

$$\nabla \tilde{h} \ll 1 \implies \left[ \frac{\nabla \tilde{h}}{(1 + |\nabla \tilde{h}|^2)^{1/2}} \right] \simeq \nabla \tilde{h} \quad (6.52)$$

On obtient l'équation en puissance de  $\varepsilon$  suivante :

$$\begin{bmatrix} -\tilde{V}^x \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} \\ + \varepsilon \left( \frac{\partial \tilde{h}_1}{\partial \tilde{t}} - \tilde{V}^x \frac{\partial \tilde{h}_1}{\partial \tilde{\xi}} \right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{1 + \tilde{b}} L_o(\tilde{h}_o) \\ + \varepsilon \frac{1}{1 + \tilde{b}} L_1(\tilde{h}_o, \tilde{h}_1) \end{bmatrix} + O(\varepsilon^2) \quad (6.53)$$

avec  $L_o(\tilde{h}_o)$  et  $L_1(\tilde{h}_o, \tilde{h}_1)$  des opérateurs linéaires du quatrième ordre respectivement donnés par (C.12) et (C.13) dans l'annexe C. En l'absence de perturbation, soit  $\tilde{h}_1 = 0$ , on a :

$$\tilde{V}^x \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} + \frac{1}{1 + \tilde{b}} L_o(\tilde{h}_o) = 0 \quad (6.54)$$

et s'écrit après intégration dans la direction  $\tilde{\xi}$  et en utilisant les conditions aux limites (C.17) et (C.18)

$$\frac{\tilde{h}_o^2(\tilde{\xi}) [\tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \tilde{b}]}{1 + \tilde{b}} \left( \begin{array}{l} -D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} \\ -D_g(\beta) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} + \frac{\partial^3 \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}^3} + 1 \end{array} \right) - \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) = 0 \quad (6.55)$$

Cette équation différentielle permet de calculer le profil en onde progressive  $\tilde{h}_o(\tilde{\xi})$  qu'adopte le film liquide uniformément dans la direction  $\tilde{y}$  en l'absence de perturbation (dans la limite  $\frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} \ll 1$ ).

### 6.2.3 Relation de dispersion

Afin de pouvoir étudier la stabilité du film en réponse à une perturbation dans la direction  $\tilde{y}$ , on adopte la décomposition suivante :

$$\tilde{h}_1(\tilde{\xi}, \tilde{y}, \tilde{t}) = \varphi(\tilde{\xi}) e^{i[\tilde{k}\tilde{y} - \tilde{\omega}\tilde{t}]} \quad (6.56)$$

avec  $\tilde{k} = 2\pi/\tilde{\lambda}$  le nombre d'onde de la perturbation,  $\tilde{\lambda}$  sa longueur d'onde, et  $\tilde{\omega}$  le facteur d'amplification temporel qui se compose d'une partie réelle et imaginaire, soit :

$$\tilde{\omega} = \tilde{\omega}_r + i \tilde{\omega}_i \quad (6.57)$$

En injectant cette décomposition dans l'équation (6.53), on obtient la relation de dispersion suivante :

$$\tilde{\omega}_r = 0 \quad (6.58a)$$

$$\tilde{\omega}_i \varphi(\tilde{\xi}) = \frac{1}{1 + \tilde{b}} L_\varphi(\varphi(\tilde{\xi})) \quad (6.58b)$$

avec  $L_\varphi(\varphi(\tilde{\xi}))$  un opérateur linéaire du quatrième ordre donné par (C.33). L'équation (6.58b) est un problème aux valeurs propres qui est généralement résolu numériquement [97, 107] pour chaque nombre d'onde  $\tilde{k}$ . Il nécessite de connaître le profil non-perturbé en onde progressive  $h_o(\xi)$  que l'on peut obtenir soit par simulation numérique 2D, soit par résolution de l'équation (6.55).

### 6.2.4 Résolution analytique

Toutefois, il est possible d'obtenir une expression analytique du facteur d'amplification temporel  $\tilde{\omega}_i$  en se plaçant dans la limite des grandes longueurs d'onde, soit  $\tilde{k} \ll 1$ . On peut ainsi écrire  $\tilde{\omega}_i$  et  $\varphi(\tilde{\xi})$  sous la forme d'un développement limité [89] en puissance de  $\tilde{k}^2$  (justifié en Annexe)

$$\tilde{\omega}_i = (\tilde{\omega}_i)_o + \tilde{k}^2 (\tilde{\omega}_i)_1 + O(\tilde{k}^4) \quad (6.59a)$$

$$\varphi(\tilde{\xi}) = \varphi_o(\tilde{\xi}) + \tilde{k}^2 \varphi_1(\tilde{\xi}) + O(\tilde{k}^4) \quad (6.59b)$$

En injectant ce développement dans l'équation (6.58b), on obtient après résolution de l'ordre 0 en  $\tilde{k}$

$$(\tilde{\omega}_i)_o = 0 \quad (6.60a)$$

$$\varphi_o(\tilde{\xi}) = \left( \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} \right) \quad (6.60b)$$

et de l'ordre 1 en  $\tilde{k}$

$$(\tilde{\omega}_i)_1 = \int_{-\infty}^0 \left( \tilde{h}_o [\tilde{h}_o - 1] [1 + \tilde{h}_o + \tilde{b}] \right) d\tilde{\xi} \quad (6.61)$$

### 6.2.5 Conclusion et discussion

On en déduit que la facteur d'amplification temporel d'une perturbation dans la direction  $y$  transversale à l'écoulement s'écrit

$$\tilde{\omega}_i = \left[ \int_{-\infty}^0 (\tilde{h}_o [\tilde{h}_o - 1] [1 + \tilde{h}_o + \tilde{b}]) d\tilde{\xi} \right] \tilde{k}^2 + O(\tilde{k}^4) \quad (6.62)$$

soit en dimensionné

$$\omega_i = \bar{u}^{Nu} \left( \int_{-\infty}^0 \left[ \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} \right] \left[ \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} - 1 \right] \left[ 1 + \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} + \frac{b}{h^{Nu}} \right] d\xi \right) k^2 + O(k^4) \quad (6.63)$$

Dans la pratique, la longueur de glissement  $b$  est négligeable devant l'épaisseur  $h^{Nu}$  de l'écoulement de Nusselt loin de la ligne triple, on a alors :

$$\omega_i \simeq \bar{u}^{Nu} \left( \int_{-\infty}^0 \left[ \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} \right] \left[ \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} - 1 \right]^2 d\xi \right) k^2 + O(k^4) \quad (6.64)$$

L'expression analytique du facteur d'amplification d'un film partiellement mouillant est donc identique à celle d'un film totalement mouillant [87, 88, 89]. On en déduit que la forme du bourrelet du profil longitudinal  $h_o(\xi)$  au voisinage du point triple joue un rôle central sur la stabilité linéaire du film. En effet, si ce bourrelet est suffisamment haut et large par rapport à l'épaisseur  $h^{Nu}$  loin de la ligne triple,  $\omega_i(k)$  est positif et le front de liquide est instable en réponse à une perturbation dans la direction transversale. On en conclut également que les propriétés de mouillage ont bien une influence sur la stabilité du film puisque nous avons vu au chapitre 2 que la hauteur du bourrelet augmente avec l'angle de contact statique  $\theta_s$ . Par conséquent, un film est d'autant plus susceptible d'être instable en réponse à une perturbation transversale qu'il est peu mouillant.

L'expression analytique (6.64) donne des informations sur la stabilité mais ne permet pas d'estimer la distance entre les ruisselets car il manque la contribution négative (donc stabilisante) et proportionnelle à  $k^4$  due aux forces capillaires. Cependant, nous avons vu au chapitre 2 que même une résolution numérique du problème aux valeurs propres (6.58b), permettant d'obtenir l'expression du facteur d'amplification  $\omega_i(k)$  pour tout nombre d'onde  $k$ , ne permet d'obtenir qu'une estimation qualitative de l'espacement des ruisselets sur des configurations de film tombant. Par conséquent, cette résolution numérique n'a pas été effectuée dans une première approche.

## 6.3 Schéma de discrétisation numérique

On présente dans cette section une méthode de discrétisation, de type Volumes Finis sur maillage bidimensionnel non-structuré, du système augmenté de Saint Venant proposé à la section 6.1. Nous verrons toutefois que la méthode proposée souffre encore de sérieuses difficultés et nécessite donc encore plusieurs améliorations qui, par manque de temps, n'ont pas pu être totalement développées et validées dans le cadre de la thèse. Par conséquent, nous proposerons également une méthode de discrétisation alternative qui présente certaines limitations, mais qui a permis de réaliser des premières simulations tridimensionnelles d'étalement de films afin de valider le modèle (6.35).

### 6.3.1 Notations

#### Définition du domaine et des cellules

On rappelle que le système de Saint Venant se compose d'équations intégrées dans la direction  $z$ , le domaine physique d'étude  $\Omega$  est bidimensionnel dans le plan  $(xy)$ . Le domaine de calcul est alors subdivisé en  $N_c$  surfaces (aussi appelée cellules ou mailles) de contrôle disjointes, qui sont des polygônes dans le cas de maillages 2D non-structurés généraux. L'ensemble des cellules  $\{\Omega_i\}_{i \in \llbracket 1; N_c \rrbracket}$  du domaine vérifie :

$$\Omega = \bigcup_{i=1}^{N_c} \Omega_i \quad (6.65)$$

Pour chaque cellule  $\Omega_i$ , on note  $\mathbf{G}_i$  son centre de gravité défini par :

$$\mathbf{G}_i = \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \boldsymbol{\chi} \, d\Omega \quad (6.66)$$

avec  $|\Omega_i|$  la surface de la cellule et  $\boldsymbol{\chi} = {}^t(x, y)$  un vecteur de coordonnées cartésiennes. On note  $\mathcal{E}_P(i) = \{\mathbf{P}_{i1}, \dots, \mathbf{P}_{in}\}$  l'ensemble des coordonnées des  $n$  sommets de la cellule  $\Omega_i$ .

La face commune à deux cellules  $\Omega_i$  et  $\Omega_j$  est notée  $\Gamma_{ij}$  (ou  $\Gamma_{ji}$ ) et est définie par

$$\Gamma_{ij} = \partial\Omega_i \cap \partial\Omega_j \quad (6.67)$$

On note  $\mathbf{n}_{ij}$  le vecteur normal unitaire à l'arrête  $\Gamma_{ij}$  orienté de la cellule  $\Omega_i$  vers la cellule  $\Omega_j$ . Par définition, on a  $\mathbf{n}_{ij} = -\mathbf{n}_{ji}$ . Le centre de gravité  $\mathbf{B}_{ij}$  de la face  $\Gamma_{ij}$  est défini par

$$\mathbf{B}_{ij} = \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \boldsymbol{\chi} \, d\Omega \quad (6.68)$$

avec  $|\Gamma_{ij}|$  la longueur de l'arrête. L'ensemble des notations est représenté sur la figure 6.4

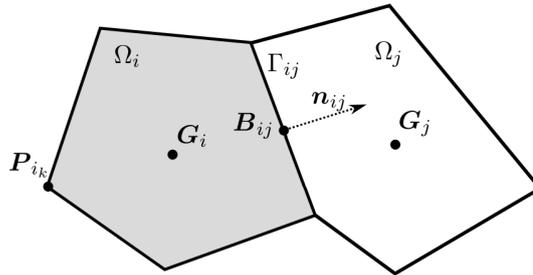


FIGURE 6.4 – Notations associées à une cellule  $\Omega_i$  et une de ses cellules voisines  $\Omega_j$ .

Enfin, il est utile de définir la taille minimale  $\Delta_{\Omega_i}^m$  et maximale  $\Delta_{\Omega_i}^M$  d'une cellule par

$$\Delta_{\Omega_i}^m = \inf_{\boldsymbol{\chi}_1, \boldsymbol{\chi}_2 \in \Omega_i} \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2} \quad (6.69a)$$

$$\Delta_{\Omega_i}^M = \sup_{\boldsymbol{\chi}_1, \boldsymbol{\chi}_2 \in \Omega_i} \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2} \quad (6.69b)$$

corespondant respectivement à son diamètre minimal et maximal. On définit également la résolution du maillage, notée  $\Delta_\Omega$ , comme le diamètre maximal de l'ensemble des cellules du domaine, soit

$$\Delta_\Omega = \sup_{i \in [1;N]} \Delta_{\Omega_i}^M \quad (6.70)$$

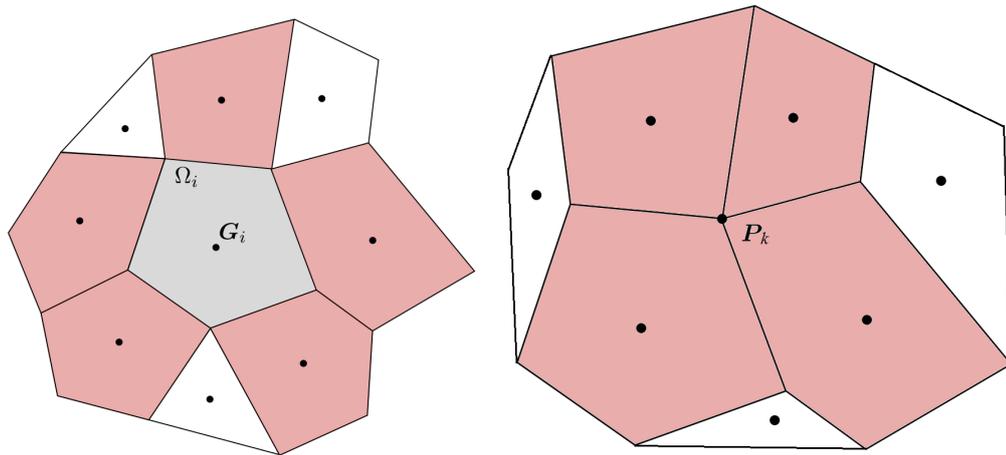
Dans le cas de grands diamètres de cellules, on parlera de petite résolution de maillage, et dans le cas de petits diamètres, on parlera de grande résolution.

### Définition des voisinages

La formulation discrète des opérateurs mathématiques sur un maillage nécessite de définir plusieurs notions de voisinage entre les éléments du maillage. On définit :

- le voisinage  $\mathcal{V}_G(i)$  de la cellule  $\Omega_i$  comme l'ensemble des indices  $j$  tels que les cellules  $\Omega_i$  et  $\Omega_j$  aient une face en commun.
- le voisinage  $\mathcal{V}_P(k)$  d'un sommet  $P_k$  comme l'ensemble des indices  $j$  des cellules  $\Omega_j$  rattachées à ce sommet.

Ces voisinages sont illustrés sur la figure 6.5.



(a) Définition du voisinage  $\mathcal{V}_G(i)$  (en rouge) d'une cellule  $\Omega_i$  (grisée). (b) Définition du voisinage  $\mathcal{V}_P(i)$  (en rouge) d'un noeud  $P_k$ .

FIGURE 6.5 – Définition du voisinage d'une cellule  $\Omega_i$  et d'un noeud  $P_i$ .

### Définition des cellules fantômes

Les conditions aux limites sont traitées d'un point de vue numérique en utilisant des cellules fantômes (déjà introduites dans le cas 2D à la section 4.4) situées au bord du domaine et dans lesquelles on impose certaines conditions sur les valeurs des variables. Ces cellules sont appelées cellules limites et les faces qui constituent la frontière du domaine de simulation sont appelées faces limites. À chaque face limite, on associe une cellule limite construite en effectuant une symétrie de la cellule interne par rapport à la face limite considérée, comme représenté sur la figure 6.6.

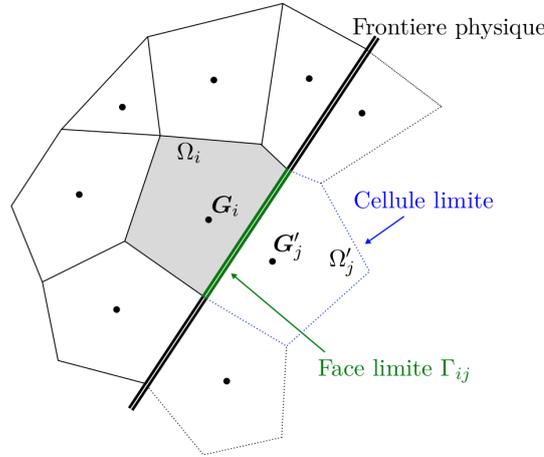


FIGURE 6.6 – Définition de la cellule limite  $\Omega'_j$  (en pointillée bleu) construite par symétrie de la cellule interne  $\Omega_i$  (grisée).

### 6.3.2 Méthode de calcul des gradients discrets

Nous verrons plus loin dans ce chapitre que pour des besoins de conditions aux limites ou d'initialisation du calcul, il est nécessaire de calculer des gradients de solution discrète au centres de gravité des cellules  $\Omega_i$  ou au centre des faces  $\Gamma_{ij}$ . Nous avons retenu la méthode des moindres carrés pour le calcul de ces valeurs discrètes car elle est bien adaptée pour l'interpolation sur des maillages non-structurés généraux et est peu coûteuse en terme de temps de calcul. On présente dans un premier temps le principe général de l'approximation du gradient par la méthode des moindres carrés. On présente ensuite comment cette méthode est appliquée pour le calcul des gradients discrets aux centres des cellules et des faces.

#### Principe de la méthode des moindres carrés pour le calcul d'un gradient discret

On considère une solution discrète  $\{d_j\}_{j \in \llbracket 1; N \rrbracket}$  connue sur un ensemble de  $N$  points  $\mathbf{M}_j$ ,  $j \in \llbracket 1; N \rrbracket$ , de coordonnées  $\chi_j = {}^t(x_j, y_j)$ . On cherche à évaluer le gradient discret  $\nabla d_i$  de la solution  $d$  au point  $\mathbf{M}_i$  de coordonnées  $\chi_i = {}^t(x_i, y_i)$ , avec  $i \notin \llbracket 1; N \rrbracket$ . Dans un voisinage  $\mathcal{V}_o(i) \in \mathbb{R}^2$  autour du point  $\mathbf{M}_i$ , on définit l'approximation linéaire suivante

$$\forall \mathbf{M} \in \mathcal{V}_o(i), \hat{d}(\mathbf{M}) = d_i + \{\nabla d_i \mid \mathbf{M} \mathbf{M}_i\} \quad (6.71)$$

L'ajustement de ce modèle par la méthode des moindres carrés consiste à chercher la valeur optimale du gradient discret  $\nabla d_i = {}^t[(d_i)_x, (d_i)_y]$  au point  $\mathbf{M}_i$  qui minimise la somme  $S_i$  suivante

$$S_i = \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [d_j - \hat{d}(\mathbf{M}_j)]^2 = \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [d_j - d_i - \{\nabla d_i \mid \mathbf{M}_j \mathbf{M}_i\}]^2 \quad (6.72)$$

où  $\mathcal{E}_o(i) = \{j \in \llbracket 1; N \rrbracket \mid \mathbf{M}_j \in \mathcal{V}_o(i) \text{ et } i \neq j\}$  est l'ensemble des indices des points dans le voisinage du point  $\mathbf{M}_i$ . On note  $\mathcal{N}_i = \text{Card}(\mathcal{E}_o(i))$  le nombre de points dans ce voisinage.

La minimisation de la somme  $S_i$  est équivalente à la résolution du système

$$\begin{cases} \frac{\partial S_i}{\partial (d_i)_x} = 0 \\ \frac{\partial S_i}{\partial (d_i)_y} = 0 \end{cases} \implies \begin{cases} \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [d_j - d_i - \{\nabla d_i \mid \mathbf{M}_j \mathbf{M}_i\}] [x_j - x_i] = 0 \\ \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [d_j - d_i - \{\nabla d_i \mid \mathbf{M}_j \mathbf{M}_i\}] [y_j - y_i] = 0 \end{cases} \quad (6.73)$$

qui se ramène à la résolution du système d'équations linéaires

$$\underline{\underline{A}}_i \mathbf{Z}_i = \mathbf{B}_i \quad (6.74)$$

avec  $\underline{\underline{A}}_i$  une matrice carré de taille  $(2 \times 2)$

$$\underline{\underline{A}}_i = \begin{bmatrix} \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [x_j - x_i]^2 & \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [x_j - x_i] [y_j - y_i] \\ \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [x_j - x_i] [y_j - y_i] & \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [y_j - y_i]^2 \end{bmatrix} \quad (6.75)$$

et  $\mathbf{Z}_i$  et  $\mathbf{B}_i$  respectivement l'inconnue et le second membre donnés par

$$\mathbf{Z}_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial d_i}{\partial x} \\ \frac{\partial d_i}{\partial y} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_i = \begin{pmatrix} \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [x_j - x_i] d_j \\ \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [y_j - y_i] d_j \end{pmatrix} \quad (6.76)$$

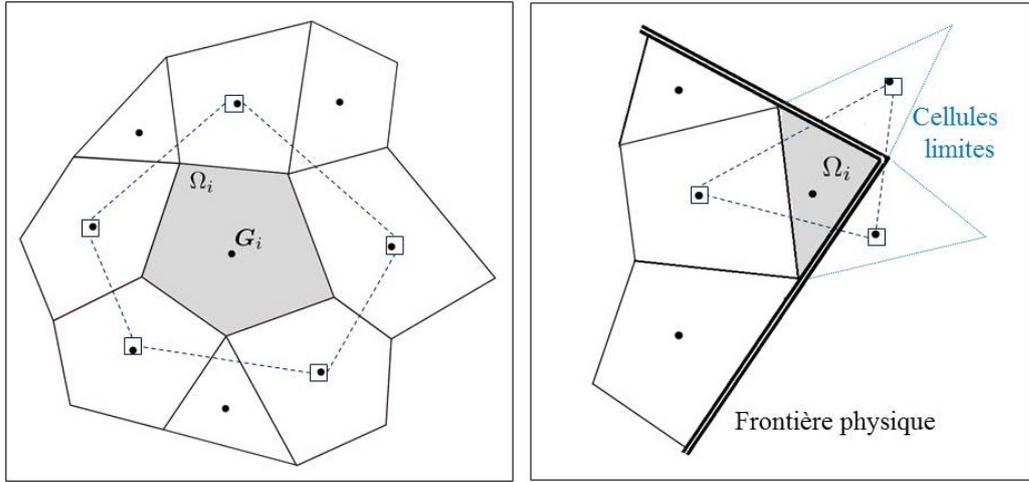
On a alors

$$\mathbf{Z}_i = [\underline{\underline{A}}_i]^{-1} \mathbf{B}_i \quad (6.77)$$

avec  $[\underline{\underline{A}}_i]^{-1}$  l'inverse de la matrice  $\underline{\underline{A}}_i$ . Dans le cas où l'ensemble des points géométriques du maillage est fixe (ce qui est notre cas), la matrice  $\underline{\underline{A}}_i$  est à coefficients constants. Par conséquent, le calcul et l'inversion de cette matrice n'a besoin que d'être effectué une seule fois (à l'initialisation du calcul par exemple). Ce résultat est alors stocké de sorte que la mise à jour du gradient discret  $\nabla d_i$  ne nécessite que de calculer que le produit matrice-vecteur (6.77) en chaque point  $\mathbf{M}_i$ .

### Calcul des gradients discrets dans les cellules

La méthode des moindres carrés décrite au paragraphe précédent est utilisée pour calculer le gradient discret de la solution discrète aux centres de gravité des cellules du maillage. L'intérêt particulier de ce calcul est d'initialiser la variable  $\mathbf{p}_i$  par  $(\nabla h)_i$  aux centres de gravité de toutes les cellules  $\{\Omega_i\}_{i \in [1; N_c]}$  du domaine. L'ensemble  $\mathcal{E}_o(i)$  des points du voisinage d'une cellule  $\Omega_i$  utilisé pour évaluer le gradient discret est constitué de l'ensemble des centres de gravité des cellules voisines internes et limites ayant au moins une face en commun. On a donc  $\mathcal{E}_o(i) = \mathcal{V}_G(i)$  comme illustré sur la figure 6.7a. L'utilisation des cellules voisines limites permet de s'assurer que le nombre de points dans le voisinage soit suffisamment important (au moins 2) pour que le problème (6.84) ne soit pas sous-déterminé dans le cas d'une cellule en bord de domaine, comme illustré sur la figure 6.7b.



(a) Cas d'une cellule à l'intérieur du domaine physique (b) Cas d'une cellule au bord du domaine physique

FIGURE 6.7 – Identification des points utilisés pour le calcul du gradient discret au centre  $G_i$  d'une cellule  $\Omega_i$  par la méthode des moindres carrés.

### Calcul des rotationnels discrets dans les cellules

Soit  $\mathbf{w} = {}^t(w^x, w^y)$  un champ de vecteur bidimensionnel. On peut calculer par moindres carrés (voir paragraphe précédent) les gradients discrets des deux composantes  $w^x$  et  $w^y$  du vecteur aux centres de gravité des cellules du maillage, soit

$$(\nabla w^x)_i = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial w^x}{\partial x}\right)_i \\ \left(\frac{\partial w^x}{\partial y}\right)_i \end{bmatrix}, \quad (\nabla w^y)_i = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial w^y}{\partial x}\right)_i \\ \left(\frac{\partial w^y}{\partial y}\right)_i \end{bmatrix} \quad (6.78)$$

On peut alors évaluer le rotationnel discret du champ de vecteur  $\mathbf{w}$  par

$$[\text{curl}(\mathbf{w})]_i = \left(\frac{\partial w^y}{\partial x}\right)_i - \left(\frac{\partial w^x}{\partial y}\right)_i \quad (6.79)$$

D'un point de vue théorique, si le champ  $\mathbf{w}$  est un gradient, soit  $\mathbf{w} = \nabla f$  avec  $f(x, y)$  un champ scalaire continu et dérivable, il vérifie (voir section 6.1.5)

$$\text{curl}(\mathbf{w}) = 0 \quad (6.80)$$

On peut montrer que si  $\mathbf{w}_i$  est un gradient discret de  $f$  calculé par moindre carré au centre de la cellule  $\Omega_i$ , alors le rotationnel discret du champ discret  $\mathbf{w}_i$  vérifie également (6.80) à l'échelle discrète sur un maillage cartésien.

### Calcul des gradients discrets sur les faces

Enfin, la méthode des moindres carrés est également utilisée pour calculer le gradient discret de la solution discrète aux centres de gravité des faces du maillage. Ce calcul est utile en particulier pour la définition des conditions aux limites aux bords du domaine physique que nous introduirons à la section 6.5. Dans le cas d'une face entre deux cellules  $\Omega_i$  et  $\Omega_j$ , l'ensemble des points du voisinage  $\mathcal{V}_F(i, j)$  utilisé pour évaluer le gradient discret

au centre de gravité  $B_{ij}$  de la face  $\Gamma_{ij}$  est constitué des centres de gravité des cellules voisines  $\Omega_i$  et  $\Omega_j$  et des sommets de cette face, comme représenté sur la figure 6.8.

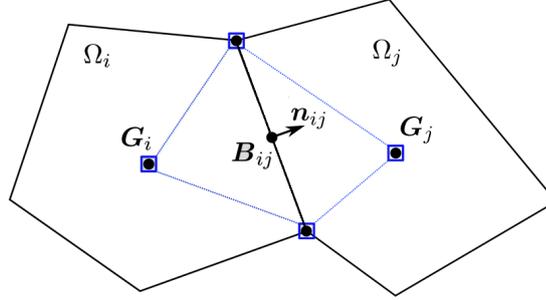


FIGURE 6.8 – Identification des points utilisés pour le calcul du gradient discret au centre  $B_{ij}$  d'une face  $\Gamma_{ij}$  par la méthode des moindres carrés.

### 6.3.3 Méthode d'interpolation en un point

La discrétisation spatiale que nous allons proposer à la section 6.3.5 ainsi que le calcul des gradients discrets sur les faces, nécessitent d'interpoler des valeurs de solution discrète connues au centres de gravité des cellules vers des sommets  $P_i$ . On présente le principe général de l'interpolation toujours basée sur une méthode des moindres carrés, puis son application pour le calcul des valeurs discrètes aux sommets.

#### Principe de la méthode des moindres carrés pour l'interpolation en un point

On reprend les notations introduites au paragraphe précédent. On considère une solution discrète  $\{d_j\}_{j \in \llbracket 1; N \rrbracket}$  connue sur un ensemble de  $N$  points  $M_j$ ,  $j \in \llbracket 1; N \rrbracket$ , de coordonnées  $\chi_j = {}^t(x_j, y_j)$ . On cherche à évaluer la valeur discrète  $d_i$  de la solution  $d$  au point  $M_i$  de coordonnées  $\chi_i = {}^t(x_i, y_i)$ , avec  $i \notin \llbracket 1; N \rrbracket$ . Dans un voisinage  $\mathcal{V}_o(i) \in \mathbb{R}^2$  autour du point  $M_i$ , on définit l'approximation linéaire suivante

$$\forall M \in \mathcal{V}_o(i), \hat{d}(M) = d_i + \{\nabla d_i \mid MM_i\} \quad (6.81)$$

L'ajustement de ce modèle par la méthode des moindres carrés consiste à chercher les valeurs optimales de  $d_i$  et de  $\nabla d_i = {}^t[(d_i)_x, (d_i)_y]$  qui minimisent la somme  $S_i$  suivante

$$S_i = \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [d_j - \hat{d}(M_j)]^2 = \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [d_j - d_i - \{\nabla d_i \mid M_j M_i\}]^2 \quad (6.82)$$

La méthode d'interpolation par moindres carrés fait donc intervenir deux paramètres d'ajustement ( $d_i$  et de  $\nabla d_i$ ) alors qu'il n'y en a qu'un seul ( $\nabla d_i$ ) dans le cas du calcul du gradient discret. La minimisation de la somme  $S_i$  est équivalente à la résolution du système

$$\begin{cases} \frac{\partial S_i}{\partial (d_i)_x} = 0 \\ \frac{\partial S_i}{\partial (d_i)_y} = 0 \\ \frac{\partial S_i}{\partial d_i} = 0 \end{cases} \implies \begin{cases} \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [d_j - d_i - \{\nabla d_i \mid M_j M_i\}] [x_j - x_i] = 0 \\ \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [d_j - d_i - \{\nabla d_i \mid M_j M_i\}] [y_j - y_i] = 0 \\ \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [d_j - d_i - \{\nabla d_i \mid M_j M_i\}] = 0 \end{cases} \quad (6.83)$$

qui se réécrit sous la forme vectorielle suivante

$$\underline{\underline{A}}_i \mathbf{Z}_i = \mathbf{B}_i \quad (6.84)$$

avec  $\underline{\underline{A}}_i$  une matrice carré de taille  $(3 \times 3)$

$$\underline{\underline{A}}_i = \begin{bmatrix} \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [x_j - x_i]^2 & \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [x_j - x_i] [y_j - y_i] & \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [x_j - x_i] \\ \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [x_j - x_i] [y_j - y_i] & \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [y_j - y_i]^2 & \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [y_j - y_i] \\ \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [x_j - x_i] & \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [y_j - y_i] & \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} 1 \end{bmatrix} \quad (6.85)$$

et  $\mathbf{Z}_i$  et  $\mathbf{B}_i$  respectivement l'inconnue et le second membre donnés par

$$\mathbf{Z}_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial d_i}{\partial x} \\ \frac{\partial d_i}{\partial y} \\ d_i \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}_i = \begin{pmatrix} \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [x_j - x_i] d_j \\ \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} [y_j - y_i] d_j \\ \sum_{j \in \mathcal{E}_o(i)} d_j \end{pmatrix} \quad (6.86)$$

On a alors

$$\mathbf{Z}_i = [\underline{\underline{A}}_i]^{-1} \mathbf{B}_i \quad (6.87)$$

avec  $[\underline{\underline{A}}_i]^{-1}$  l'inverse de la matrice  $\underline{\underline{A}}_i$ . Dans le cas où l'ensemble des points géométriques du maillage est fixe, la matrice  $\underline{\underline{A}}_i$  est à coefficients constants et n'a besoin d'être calculée puis inversée qu'une seule fois. La mise à jour de la valeur discrète  $d_i$  interpolée au point  $\mathbf{M}_i$  ne nécessite de calculer que le produit matrice-vecteur (6.87).

### Interpolation des valeurs discrètes aux noeuds

La discrétisation spatiale que nous allons proposer à la section 6.3.5 nécessite une interpolation des valeurs de la solution discrète connues aux centres de gravité des cellules vers les sommets. Cette interpolation est faite en considérant que le voisinage d'un sommet  $\mathbf{P}_i$  est  $\mathcal{V}_P(i)$ , soit l'ensemble des cellules (internes et limites) rattachées à ce sommet (figure 6.9).

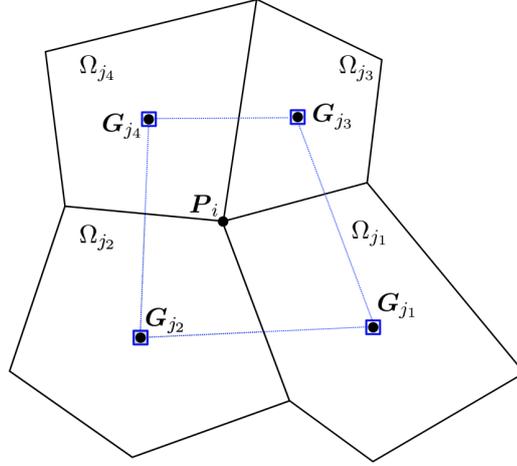


FIGURE 6.9 – Identification des points utilisés pour l'interpolation des valeurs discrètes connues aux centres des cellules vers un sommet  $P_i$  par une méthode des moindres carrés.

### 6.3.4 Intégration par la méthode des Volume Finis

Le système proposé peut s'écrire sous la forme conservative suivante :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot [ \underline{\underline{F}}_h ] = 0 \quad (6.88a)$$

$$\frac{\partial \underline{\underline{p}}}{\partial t} + \nabla \cdot [ \underline{\underline{F}}_p ] = \nabla \cdot [ \underline{\underline{G}}_p ] \quad (6.88b)$$

$$\frac{\partial(\rho \underline{\underline{q}})}{\partial t} + \nabla \cdot [ \underline{\underline{F}}_{\rho \underline{\underline{q}}} ] + \nabla \cdot [ \underline{\underline{R}}_{\rho \underline{\underline{q}}} ] = \nabla \cdot [ \underline{\underline{G}}_{\rho \underline{\underline{q}}} ] + \mathcal{S}_{g,\tau}(h) + \mathcal{S}_\nu(h, \rho \underline{\underline{q}}) \quad (6.88c)$$

avec  $\underline{\underline{F}}_h$ ,  $\underline{\underline{F}}_p$  et  $\underline{\underline{F}}_{\rho \underline{\underline{q}}}$  les tenseurs convectifs donnés par :

$$\underline{\underline{F}}_h = h \underline{\underline{u}} , \quad \underline{\underline{F}}_p = \{ \underline{\underline{p}} \mid \underline{\underline{u}} \} \underline{\underline{I}} , \quad \underline{\underline{F}}_{\rho \underline{\underline{q}}} = \rho \underline{\underline{q}} \otimes \underline{\underline{u}} \quad (6.89)$$

avec  $\underline{\underline{R}}_{\rho \underline{\underline{q}}}$  le tenseur associé aux forces linéiques du premier ordre donné par :

$$\underline{\underline{R}}_{\rho \underline{\underline{q}}} = \underline{\underline{\mathcal{L}}}^d + \underline{\underline{\mathcal{L}}}^g + \underline{\underline{\mathcal{L}}}^\gamma \quad (6.90)$$

et  $\underline{\underline{G}}_p$  et  $\underline{\underline{G}}_{\rho \underline{\underline{q}}}$  les tenseurs associés aux termes du second ordre qui s'écrivent :

$$\underline{\underline{G}}_p = [-h \nabla \cdot (\underline{\underline{u}})] \underline{\underline{I}} , \quad \underline{\underline{G}}_{\rho \underline{\underline{q}}} = [h \nabla \cdot (\underline{\underline{\varphi}}^p)] \underline{\underline{I}} \quad (6.91)$$

En intégrant le système (6.88) sur chaque cellule  $\Omega_i$ , on obtient la formulation intégrale

$$\frac{\partial h_i}{\partial t} = -\frac{1}{|\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_G(i)} \int_{\Gamma_{ij}} \{ \underline{\underline{F}}_h \mid \underline{\underline{n}}_{ij} \} d\Gamma \quad (6.92a)$$

$$\frac{\partial \underline{\underline{p}}_i}{\partial t} = -\frac{1}{|\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_G(i)} \int_{\Gamma_{ij}} \left( \underline{\underline{F}}_p - \underline{\underline{G}}_p \right) \underline{\underline{n}}_{ij} d\Gamma \quad (6.92b)$$

$$\frac{\partial(\rho \underline{\underline{q}})_i}{\partial t} = -\frac{1}{|\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_G(i)} \int_{\Gamma_{ij}} \left( \underline{\underline{F}}_{\rho \underline{\underline{q}}} + \underline{\underline{R}}_{\rho \underline{\underline{q}}} - \underline{\underline{G}}_{\rho \underline{\underline{q}}} \right) \underline{\underline{n}}_{ij} d\Gamma + (\mathcal{S}_{g,\tau})_i + (\mathcal{S}_\nu)_i \quad (6.92c)$$

avec  $h_i$ ,  $\mathbf{p}_i$  et  $(\rho\mathbf{q})_i$  les variables conservatives moyennés sur la cellule  $\Omega_i$  données par :

$$h_i = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} h \, d\Omega, \quad \mathbf{p}_i = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \mathbf{p} \, d\Omega, \quad (\rho\mathbf{q})_i = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} (\rho\mathbf{q}) \, d\Omega \quad (6.93)$$

et  $(\mathcal{S}_{g,\tau})_i$  et  $(\mathcal{S}_\nu)_i$  les termes source moyennés sur la cellule  $\Omega_i$  que l'on approxime par :

$$(\mathcal{S}_{g,\tau})_i = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \mathcal{S}_{g,\tau} \, d\Omega = \mathcal{S}_{g,\tau}(h_i) \quad (6.94a)$$

$$(\mathcal{S}_\nu)_i = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \mathcal{S}_\nu \, d\Omega = \mathcal{S}_\nu(h_i, (\rho\mathbf{q})_i) \quad (6.94b)$$

En définissant l'approximation discrète  $\mathbf{f}_{ij}$  d'un flux  $\underline{f}$  traversant la face  $\Gamma_{ij}$  de la cellule  $\Omega_i$  vers la cellule  $\Omega_j$  par :

$$\mathbf{f}_{ij} = \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \underline{f} \, \mathbf{n}_{ij} \, d\Gamma \quad (6.95)$$

On peut introduire les flux discrets suivants

$$\mathbf{F}_{ij} = \begin{pmatrix} (F_h)_{ij} \\ (\mathbf{F}_p)_{ij} \\ (\mathbf{F}_{\rho\mathbf{q}})_{ij} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \{ \mathbf{F}_h \mid \mathbf{n}_{ij} \} \, d\Gamma \\ \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \underline{F}_p \, \mathbf{n}_{ij} \, d\Gamma \\ \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \underline{F}_{\rho\mathbf{q}} \, \mathbf{n}_{ij} \, d\Gamma \end{pmatrix} \quad (6.96a)$$

$$\mathbf{R}_{ij} = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ (\mathbf{R}_{\rho\mathbf{q}})_{ij} \end{pmatrix}, \text{ tel que } (\mathbf{R}_{\rho\mathbf{q}})_{ij} = \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \underline{R}_{\rho\mathbf{q}} \, \mathbf{n}_{ij} \, d\Gamma \quad (6.96b)$$

$$\mathbf{G}_{ij} = \begin{pmatrix} 0 \\ (\mathbf{G}_p)_{ij} \\ (\mathbf{G}_{\rho\mathbf{q}})_{ij} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \underline{G}_p \, \mathbf{n}_{ij} \, d\Gamma \\ \frac{1}{|\Gamma_{ij}|} \int_{\Gamma_{ij}} \underline{G}_{\rho\mathbf{q}} \, \mathbf{n}_{ij} \, d\Gamma \end{pmatrix} \quad (6.96c)$$

Finalement, en introduisant la variable conservative discrète  $\mathbf{U}_i = {}^t (h_i, \mathbf{p}_i, (\rho\mathbf{q})_i)$ , le système d'équation s'écrit sous la forme vectorielle

$$\frac{\partial \mathbf{U}_i}{\partial t} = - \frac{1}{|\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_G(i)} \mathbf{H}_{ij}(\mathbf{U}_i) |\Gamma_{ij}| + \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ \mathcal{S}_{g,\tau}(\mathbf{U}_i) + \mathcal{S}_\nu(\mathbf{U}_i) \end{pmatrix} \quad (6.97)$$

avec  $\mathbf{H}_{ij} (= \mathbf{F}_{ij} + \mathbf{R}_{ij} - \mathbf{G}_{ij})$  le flux numérique total traversant la face  $\Gamma_{ij}$  que nous allons exprimer en fonction de l'inconnue discrète  $\mathbf{U}_i$  au paragraphe suivant.

### 6.3.5 Schéma de discrétisation spatiale

#### Discrétisation des flux liés à la partie convective

Par analogie avec le schéma de discrétisation adopté pour les équations bi-dimensionnelles au chapitre 4, les termes de transport sont décentrés suivant que la convection est entrante

( $\{\bar{\mathbf{u}}_{ij} \mid \mathbf{n}_{ij}\} < 0$ ) ou sortante ( $\{\bar{\mathbf{u}}_{ij} \mid \mathbf{n}_{ij}\} > 0$ ) dans la cellule  $\Omega_i$  à travers la face  $\Gamma_{ij}$ , avec  $\bar{\mathbf{u}}_{ij}$  la vitesse moyenne sur la face donnée par :

$$\bar{\mathbf{u}}_{ij} = \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{u}}_i + \bar{\mathbf{u}}_j) \quad (6.98)$$

Les flux numériques s'écrivent alors

$$(F_h)_{ij} = \max[\{\bar{\mathbf{u}}_{ij} \mid \mathbf{n}_{ij}\}, 0] h_i + \min[\{\bar{\mathbf{u}}_{ij} \mid \mathbf{n}_{ij}\}, 0] h_j \quad (6.99a)$$

$$(F_p)_{ij} = \left\{ \bar{\mathbf{u}}_{ij} \mid \frac{\mathbf{p}_i + \mathbf{p}_j}{2} \right\} \mathbf{n}_{ij} - \text{sign}(\{\bar{\mathbf{u}}_{ij} \mid \mathbf{n}_{ij}\}) \left\{ \bar{\mathbf{u}}_{ij} \mid \frac{\mathbf{p}_j - \mathbf{p}_i}{2} \right\} \mathbf{n}_{ij} \quad (6.99b)$$

$$(F_{\rho q})_{ij} = \max[\{\bar{\mathbf{u}}_{ij} \mid \mathbf{n}_{ij}\}, 0] \rho \mathbf{q}_i + \min[\{\bar{\mathbf{u}}_{ij} \mid \mathbf{n}_{ij}\}, 0] \rho \mathbf{q}_j \quad (6.99c)$$

avec  $\text{sign}(x)$  la fonction "signe" donnée par

$$\text{sign}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ -1 & \text{si } x \leq 0 \end{cases} \quad (6.100)$$

### Discrétisation du flux associé aux forces de pression du premier ordre

Comme en deux dimensions, une formulation centrée est également utilisée pour l'évaluation du terme de pression dans l'équation de quantité de mouvement, soit

$$(\mathbf{R}_{\rho q})_{ij} = \frac{1}{2} \left[ \left( \underline{R}_{\rho q} \right)_i + \left( \underline{R}_{\rho q} \right)_j \right] \mathbf{n}_{ij} \quad (6.101)$$

où  $\left( \underline{R}_{\rho q} \right)_i$  et  $\left( \underline{R}_{\rho q} \right)_j$  sont les approximations du tenseur de force linéique (6.91) dans les cellules  $\Omega_i$  et  $\Omega_j$  et sont donnés par

$$\left( \underline{R}_{\rho q} \right)_i = \underline{R}_{\rho q} (h_i, \mathbf{p}_i) , \quad \left( \underline{R}_{\rho q} \right)_j = \underline{R}_{\rho q} (h_j, \mathbf{p}_j) \quad (6.102)$$

### Discrétisation du flux du second ordre

La discrétisation du flux du second ordre  $\mathbf{G}_{ij}$  est réalisé avec un schéma centré en espace. Les deux composantes du flux numérique intervenants dans l'équation de transport (6.92b) et l'équation de quantité de mouvement (6.92c) ont alors pour expression

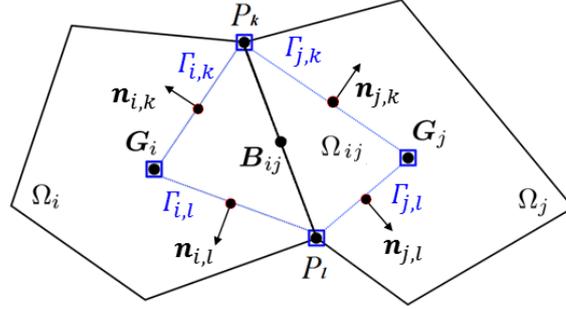
$$(\mathbf{G}_p)_{ij} = -\frac{1}{2} (h_i + h_j) [\nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}})]_{ij} \mathbf{n}_{ij} \quad (6.103a)$$

$$(\mathbf{G}_{\rho q})_{ij} = \frac{1}{2} (h_i + h_j) [\nabla \cdot (\varphi^p)]_{ij} \mathbf{n}_{ij} \quad (6.103b)$$

avec  $[\nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}})]_{ij}$  (resp.  $[\nabla \cdot (\varphi^p)]_{ij}$ ) l'approximation discrète de  $\nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}})$  (resp. de  $\nabla \cdot (\varphi^p)$ ) au centre  $\mathbf{B}_{ij}$  de la face  $\Gamma_{ij}$ . La méthode adoptée pour évaluer ces termes discrets est basée sur l'utilisation d'une cellule diamant introduite par Coudière et al. [111]. Cette cellule fictive, notée  $\Omega_{ij}$ , est construite à partir du voisinage  $\mathcal{V}_F(i, j)$  du centre de gravité  $\mathbf{B}_{ij}$  de la face  $\Gamma_{ij}$ , soit les centres de gravité  $\mathbf{G}_i$  et  $\mathbf{G}_j$  des cellules voisines et des sommets  $\mathbf{P}_k$  et  $\mathbf{P}_l$  de cette face, comme représenté sur la figure 6.10. Cette cellule est un quadrilatère dont le contour  $\partial\Omega_{ij}$  est délimité par

— une face  $\Gamma_{j,k}$  de sommets  $\mathbf{G}_j$  et  $\mathbf{P}_k$  et de vecteur normal unitaire  $\mathbf{n}_{j,k}$

- une face  $\Gamma_{j,l}$  de sommets  $\mathbf{G}_j$  et  $\mathbf{P}_l$  et de vecteur normal unitaire  $\mathbf{n}_{j,l}$
- une face  $\Gamma_{i,k}$  de sommets  $\mathbf{G}_i$  et  $\mathbf{P}_k$  et de vecteur normal unitaire  $\mathbf{n}_{i,k}$
- une face  $\Gamma_{i,l}$  de sommets  $\mathbf{G}_i$  et  $\mathbf{P}_l$  et de vecteur normal unitaire  $\mathbf{n}_{i,l}$

FIGURE 6.10 – Notations associée à une cellule diamant  $\Omega_{ij}$ .

On approxime  $div(\bar{\mathbf{u}})$  au centre  $\mathbf{B}_{ij}$  par la relation

$$[\nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}})]_{ij} = \frac{1}{|\Omega_{ij}|} \int_{\Omega_{ij}} div(\bar{\mathbf{u}}) d\Omega \quad (6.104)$$

En utilisant le théorème de Green-Ostrogradski, on peut écrire

$$[\nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}})]_{ij} = \frac{1}{|\Omega_{ij}|} \int_{\partial\Omega_{ij}} \{\bar{\mathbf{u}} \mid \mathbf{n}\} d\Gamma = \frac{1}{|\Omega_{ij}|} \left[ \begin{array}{l} \int_{\Gamma_{j,k}} \{\bar{\mathbf{u}} \mid \mathbf{n}_{j,k}\} d\Gamma \\ + \int_{\Gamma_{j,l}} \{\bar{\mathbf{u}} \mid \mathbf{n}_{j,l}\} d\Gamma \\ + \int_{\Gamma_{i,k}} \{\bar{\mathbf{u}} \mid \mathbf{n}_{i,k}\} d\Gamma \\ + \int_{\Gamma_{i,l}} \{\bar{\mathbf{u}} \mid \mathbf{n}_{i,l}\} d\Gamma \end{array} \right] \quad (6.105)$$

En définissant l'approximation discrète  $\bar{\mathbf{u}}_{j,k}$  de la vitesse moyenne  $\bar{\mathbf{u}}$  sur la face  $\Gamma_{j,k}$  par

$$\bar{\mathbf{u}}_{j,k} = \frac{1}{|\Gamma_{j,k}|} \int_{\Gamma_{j,k}} \bar{\mathbf{u}} d\Gamma = \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{u}}_j + \bar{\mathbf{u}}_{P_k}) \quad (6.106)$$

avec  $\bar{\mathbf{u}}_j$  la vitesse moyenne dans la cellule  $\Omega_j$  et  $\bar{\mathbf{u}}_{P_k}$  la vitesse moyenne interpolée au noeud  $\mathbf{P}_k$  en appliquant la procédure décrite au paragraphe 6.3.3, l'approximation de  $div(\bar{\mathbf{u}})$  au centre  $\mathbf{B}_{ij}$  s'écrit finalement

$$[\nabla \cdot (\bar{\mathbf{u}})]_{ij} = \frac{1}{|\Omega_{ij}|} \left[ \begin{array}{l} |\Gamma_{j,k}| \left\{ \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{u}}_j + \bar{\mathbf{u}}_{P_k}) \mid \mathbf{n}_{j,k} \right\} \\ + |\Gamma_{j,l}| \left\{ \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{u}}_j + \bar{\mathbf{u}}_{P_l}) \mid \mathbf{n}_{j,l} \right\} \\ + |\Gamma_{i,k}| \left\{ \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{u}}_i + \bar{\mathbf{u}}_{P_k}) \mid \mathbf{n}_{i,k} \right\} \\ + |\Gamma_{i,l}| \left\{ \frac{1}{2} (\bar{\mathbf{u}}_i + \bar{\mathbf{u}}_{P_l}) \mid \mathbf{n}_{i,l} \right\} \end{array} \right] \quad (6.107)$$

En appliquant la même procédure, l'approximation de  $\text{div}(\boldsymbol{\varphi}^p)$  au centre  $\mathbf{B}_{ij}$  s'écrit

$$[\nabla \cdot (\boldsymbol{\varphi}^p)]_{ij} = \frac{1}{|\Omega_{ij}|} \left[ \begin{array}{l} + |\Gamma_{j,k}| \left\{ \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varphi}_j^p + \boldsymbol{\varphi}_{P_k}^p) \middle| \mathbf{n}_{j,k} \right\} \\ + |\Gamma_{j,l}| \left\{ \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varphi}_j^p + \boldsymbol{\varphi}_{P_l}^p) \middle| \mathbf{n}_{j,l} \right\} \\ + |\Gamma_{i,k}| \left\{ \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varphi}_i^p + \boldsymbol{\varphi}_{P_k}^p) \middle| \mathbf{n}_{i,k} \right\} \\ + |\Gamma_{i,l}| \left\{ \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varphi}_i^p + \boldsymbol{\varphi}_{P_l}^p) \middle| \mathbf{n}_{i,l} \right\} \end{array} \right] \quad (6.108)$$

tel que  $\boldsymbol{\varphi}_j^p$  et  $\boldsymbol{\varphi}_{P_k}^p$  s'expriment respectivement en fonction de la variable  $\mathbf{p}_j$  dans la cellule  $\Omega_j$  et de la variable  $\mathbf{p}_{P_k}$  interpolée au noeud  $P_k$

$$\boldsymbol{\varphi}_j^p = \frac{\gamma l_g \mathbf{p}_j}{\sqrt{1 + |\mathbf{p}_j|^2}}, \quad \boldsymbol{\varphi}_{P_k}^p = \frac{\gamma l_g \mathbf{p}_{P_k}}{\sqrt{1 + |\mathbf{p}_{P_k}|^2}} \quad (6.109)$$

### 6.3.6 Schéma de discrétisation temporel

Afin d'obtenir rapidement des premiers résultats, nous avons tout d'abord développé un schéma volumes finis de type "ImEx", ou "Implicite-Explicite" [112], beaucoup plus simple à implémenter qu'un schéma totalement implicite. On propose ainsi de résoudre le système avec une méthode de "splitting" à deux étapes. La première étape consiste à traiter les flux  $\mathbf{H}_{ij}$  et les termes sources non-visqueux  $(\mathcal{S}_{g,\tau})_i$  de manière explicite, soit

$$\frac{\mathbf{U}_i^* - \mathbf{U}_i^n}{\Delta t} = -\frac{1}{|\Omega_i|} \sum_{j \in \mathcal{V}_G(i)} \mathbf{H}_{ij}(\mathbf{U}_i^n) |\Gamma_{ij}| + \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ \mathcal{S}_{g,\tau}(\mathbf{U}_i^n) \end{pmatrix} \quad (6.110)$$

avec  $\mathbf{U}_i^n = {}^t(h_i^n, \mathbf{p}_i^n, (\rho\mathbf{q})_i^n)$  la variable à l'instant  $t^n$  et  $\mathbf{U}_i^* = {}^t(h_i^*, \mathbf{p}_i^*, (\rho\mathbf{q})_i^*)$  la variable intermédiaire. La seconde étape consiste à traiter le terme source visqueux  $(\mathcal{S}_\nu)_i$  de manière implicite, soit

$$\frac{\mathbf{U}_i^{n+1} - \mathbf{U}_i^*}{\Delta t} = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ \mathcal{S}_\nu(\mathbf{U}_i^{n+1}) \end{pmatrix} \implies \frac{(\rho\mathbf{q})_i^{n+1} - (\rho\mathbf{q})_i^*}{\Delta t} = -\frac{3\nu (\rho\mathbf{q})_i^{n+1}}{h_i^{n+1}(h_i^{n+1} + b)} \quad (6.111)$$

avec  $\mathbf{U}_i^{n+1} = {}^t(h_i^{n+1}, \mathbf{p}_i^{n+1}, (\rho\mathbf{q})_i^{n+1})$  la variable à l'instant suivant  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ . Puisque le terme source visqueux  $\mathcal{S}_\nu$  n'affecte que le bilan intégral de quantité de mouvement, on a :

$$h_i^{n+1} = h_i^*, \quad \mathbf{p}_i^{n+1} = \mathbf{p}_i^* \quad (6.112)$$

et l'équation (6.111) peut se résoudre analytiquement et donne

$$(\rho\mathbf{q})_i^{n+1} = \frac{(\rho\mathbf{q})_i^n}{1 + \frac{3\nu \Delta t}{h_i^*(h_i^* + b)}} \quad (6.113)$$

L'intérêt d'impliciter les termes visqueux est que l'on assure qu'ils préservent le signe de  $(\rho\mathbf{q})_i$ . Des auteurs tel que Burguete [108] ou Liang [109] ont montré que si le terme visqueux est discrétisé explicitement, il peut induire une force exagérée au voisinage de la ligne triple qui peut inverser le sens de l'écoulement et qui n'est donc pas physique.

### 6.3.7 Condition sur le pas de temps de simulation

Nous avons vu au chapitre 3 que l'utilisation d'un schéma explicite pour discrétiser la version bidimensionnelle du modèle proposé oblige à prendre un pas de temps très petit, de l'ordre de  $\Delta x^2$ , pour des raisons de stabilité numérique. Cette contrainte a été obtenue en calculant la célérité des ondes à la surface d'un film perturbé autour de son état stationnaire. Cette célérité peut se généraliser en trois dimensions et a pour expression

$$c_r \underset{|\mathbf{k}| \gg 1}{=} |\mathbf{u}_o| \pm \sqrt{g^z h_o + \frac{h_o}{\rho} \left( \frac{\partial^2 e_{disj}}{\partial h^2} \right)_{(h=h_o)} + \frac{h_o}{\rho} \gamma_{lg} |\mathbf{k}|^2} \quad (6.114)$$

avec  $\mathbf{u}_o$  la vitesse moyenne de l'écoulement stationnaire et  $\mathbf{k}$  le nombre d'onde de la perturbation. Dans le cas des équations discrétisées, la norme  $|\mathbf{k}|_i$  d'un nombre d'onde qu'il est possible d'observer à l'échelle d'une cellule  $\Omega_i$  du maillage est limitée par le diamètre minimal  $\Delta_{\Omega_i}^m$  de cette cellule, soit

$$|\mathbf{k}|_i \leq \frac{\pi}{\Delta_{\Omega_i}^m} \quad (6.115)$$

En négligeant la contribution des interactions moléculaires pour garantir que la célérité reste réelle, sa valeur maximale  $(c_r)_i^M$  dans chaque cellule  $\Omega_i$  est donnée par

$$(c_r)_i^M = |\mathbf{u}_o| + \sqrt{g^z h_o + \frac{h_o}{\rho} \gamma_{lg} \left( \frac{\pi}{\Delta_{\Omega_i}^m} \right)^2} \quad (6.116)$$

Une condition nécessaire de stabilité numérique du système discrétisé explicitement en temps est que le pas de temps de simulation  $\Delta t$  doit vérifier dans chaque cellule  $\Omega_i$  :

$$\Delta t < \inf_{i \in \llbracket 1; N_c \rrbracket} \left[ \frac{\Delta_{\Omega_i}^m}{(c_r)_i^M} \right] \quad (6.117)$$

On propose donc de calculer le pas de temps de simulation en utilisant le limiteur suivant

$$\Delta t = \text{CFL} \inf_{i \in \llbracket 1; N_c \rrbracket} \left[ \frac{\Delta_{\Omega_i}^m}{|\bar{\mathbf{u}}_i| + \sqrt{g^z h_i + \frac{h_i}{\rho} \gamma_{lg} \left( \frac{\pi}{\Delta_{\Omega_i}^m} \right)^2}} \right] \quad (6.118)$$

avec  $\bar{\mathbf{u}}_i$  la vitesse moyenne et  $h_i$  l'épaisseur du film dans la cellule  $\Omega_i$ , et la constante CFL un paramètre numérique inférieur à 1 que l'on choisira avant chaque simulation. Ce paramètre est souvent pris autour de 0,5 lorsqu'il est associé à une condition suffisante de stabilité, généralement déterminée en effectuant une analyse de stabilité de Von Neumann [12]. Dans notre cas, la relation (6.118) ne constitue d'une part qu'une condition nécessaire de stabilité, et n'est à priori valable que dans le cas du système linéarisé autour d'un état stationnaire. On verra au chapitre 7 que dans le cas de nos applications impliquant des écoulements instationnaires et non-linéaires, la valeur du CFL devra être prise proche de 0,1 afin de garantir la stabilité numérique des simulations tridimensionnelles.

## 6.4 Conditions aux limites

Les configurations simulées numériquement au chapitre suivant impliquent toutes une injection de liquide sur un substrat. Cette condition aux limites est appliquée en imposant dans les cellules limites en bord de domaine l'épaisseur  $h_{inject}$  de la fente d'injection et le débit volumique linéique  $q_{inject}$  de la pompe. La variable  $\mathbf{p}$  est également sujette à des conditions aux limites et nous souhaitons garantir qu'elle soit une discrétisation de  $\nabla h$  aux bords du domaine. Soit  $\Gamma_{ij}$  une face limite au bord du domaine physique et commune à une cellule  $\Omega_i$  à l'intérieur du domaine et à une cellule limite  $\Omega_j$ , on impose alors

$$\mathbf{p}_{ij} = (\nabla h)_{ij} \quad (6.119)$$

au centre  $\mathbf{B}_{ij}$  de la face limite en appliquant la méthode de calcul des gradients discrets présentée à la section 6.3.2. En utilisant l'approximation discrète au point  $\mathbf{B}_{ij}$

$$\mathbf{p}_{ij} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_i + \mathbf{p}_j) \quad (6.120)$$

La variable  $\mathbf{p}_j$  dans la cellule limite est alors mise à jour à chaque nouveau pas de temps par

$$\mathbf{p}_j = 2\mathbf{p}_{ij} - \mathbf{p}_i = 2(\nabla h)_{ij} - \mathbf{p}_i \quad (6.121)$$

## 6.5 Résultats de validations élémentaires

### 6.5.1 Calcul imprécis de la variable $\mathbf{p}$

Nous nous sommes intéressés au problème académique de l'étalement sur un solide d'un film de forme initialement parabolique (goutte d'eau tridimensionnelle) pour différents angles de contact statiques (entre  $5^\circ$  et  $80^\circ$ ). Nous avons réalisé de nombreuses simulations numériques de ce problème sur maillage cartésien uniforme et en sommes arrivés à la conclusion que l'équation de transport discrétisée (6.92b) permettant de calculer  $\mathbf{p}$  n'est pas assez précise. Bien que cette variable soit initialisée dans chaque cellule  $\Omega_i$  du domaine par  $\mathbf{p}_i^n = (\nabla h)_i^n$  et vérifie donc

$$[curl(\mathbf{p})]_i^n = 0 \quad (6.122)$$

avec  $[curl(\mathbf{p})]_i$  le rotationnel discret défini à la section 6.3.2, la variable  $\mathbf{p}_i^{n+1}$  obtenue à l'instant suivant via le système d'équation discrétisé n'est plus un gradient car

$$[curl(\mathbf{p})]_i^{n+1} \neq 0 \quad (6.123)$$

On rappelle que la formulation conservative (6.31) des forces capillaires dans le bilan intégral de quantité de mouvement n'est valable que si la variable  $\mathbf{p}$  est un gradient afin d'être consistante avec sa formulation non-conservative. Par conséquent, si elle ne vérifie plus cette propriété au niveau discret, les termes capillaires qui en dépendent sont mal modélisés et les résultats ne sont pas satisfaisants même sur des configurations simples d'étalement de gouttes.

### 6.5.2 Solutions envisagées

Afin de pallier ce problème, différentes solutions sont envisagées et sont encore actuellement testées telles que :

- une méthode de pénalisation [114] afin de s'assurer que  $\mathbf{p}$  ne s'éloigne pas trop de  $\nabla h$ ;
- une discrétisation MUSCL d'ordre 2 pour gagner en précision.
- une méthode de projection de Chorin [113] garantissant que  $\mathbf{p}$  conserve la propriété d'être un gradient

La méthode de projection est la plus envisagée car elle est déjà utilisée dans la littérature dans le cadre de la résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles où l'on cherche à imposer un champ de vitesse à divergence nulle [118]. Elle repose sur le théorème de Hodge-Helmholtz [119], à savoir que tout champ de vecteur bidimensionnel peut se décomposer de manière unique en un champ irrotationnel et un champ à divergence nulle. En appliquant cette décomposition à la variable  $\mathbf{p}_i$ , on a

$$\mathbf{p}_i = (\mathbf{p}^r)_i + (\mathbf{p}^d)_i \quad (6.124)$$

tel que les champs  $(\mathbf{p}^r)_i$  et  $(\mathbf{p}^d)_i$  vérifient

$$[\text{curl}(\mathbf{p}^r)]_i = 0 \quad (6.125a)$$

$$[\nabla \cdot (\mathbf{p}^d)]_i = 0 \quad (6.125b)$$

Le champ discret  $\mathbf{p}$  obtenu par résolution de l'équation de transport n'étant pas irrotationnel, la méthode de projection consiste à déterminer puis soustraire  $\mathbf{p}^d$  pour ne garder que la partie irrotationnelle  $\mathbf{p}^r$ . La détermination des champs  $\mathbf{p}^d$  et  $\mathbf{p}^r$  est décrite à l'annexe D et les premiers résultats obtenus après application de cette projection sont très encourageants.

### 6.5.3 Solution temporaire adoptée

En attendant qu'une des solutions proposées soit validée, et afin de pouvoir réaliser des premières simulations tridimensionnelles d'écoulement de film partiellement mouillant et en particulier des simulations de formation de ruisselets, nous utilisons une version modifiée du modèle proposé (6.35) qui s'écrit

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot [\mathbf{F}_h] = 0 \quad (6.126a)$$

$$\mathbf{p} = \nabla h \quad (6.126b)$$

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{q})}{\partial t} + \nabla \cdot [\underline{F}_{\rho\mathbf{q}}] + \nabla \cdot [\underline{R}_{\rho\mathbf{q}}] = \nabla \cdot [\underline{G}_{\rho\mathbf{q}}] + \mathcal{S}_{g,\tau}(h) + \mathcal{S}_\nu(h, \rho\mathbf{q}) \quad (6.126c)$$

Ce modèle est équivalent à un système à deux équations car il consiste à "forcer" la variable  $\mathbf{p}$  à être égale à  $\nabla h$ . La discrétisation spatiale des équations de conservation de la masse (6.126a) et de quantité de mouvement (6.126c) reste identique à celle proposée à la section 6.3.5. La différence réside pour le calcul de la variable discrète  $\mathbf{p}_i$  qui n'est plus calculée par une équation différentielle mais actualisée à chaque nouveau pas de temps par le gradient d'épaisseur discret  $(\nabla h)_i$ . Les simulations numériques réalisées avec ce modèle donnent de bons résultats. Nous nous sommes toutefois limités à des maillages cartésien uniforme afin d'éviter des problèmes de consistance et de stabilité numérique liés à la discrétisation des termes capillaires qui sont du troisième ordre dans le cas du système (6.126).

## 6.6 Conclusion du chapitre

Nous avons proposé une extension tridimensionnelle du système augmenté de type Saint Venant qui a l'avantage d'être bien posé mathématiquement, car associé à une équation de bilan d'énergie, et qui ne souffre d'aucune limitation en terme de propriété de mouillage. Nous avons également proposé une discrétisation spatiale qui a l'avantage d'être adaptée à une formulation Volumes Finis sur maillage non-structuré et donc adaptée pour des simulations dans un contexte industriel. Cependant, des simulations numériques ont montré que le modèle discret ne respecte pas la contrainte  $\text{curl}(\mathbf{p}) = 0$ . La formulation conservative adoptée des forces capillaires, qui est dépendante de cette contrainte, n'est donc plus consistante avec sa formulation non-conservative. Le développement d'un schéma numérique robuste et consistant étant toujours en cours d'étude, un modèle de type Saint Venant à deux équations et du troisième ordre en espace est utilisé. Ce modèle est limité en termes d'applications (faible pas de temps, maillage cartésien) pour des raisons de stabilité numérique et de consistance des forces capillaires à l'échelle discrète. Nous pouvons ainsi réaliser des premières simulations numériques et vérifier au moins la capacité du système à reproduire des configurations de mouillage académique.

# Chapitre 7

## Simulations numériques

Nous présentons dans ce chapitre des simulations numériques 3D obtenues à partir du système de type Saint Venant à deux équations (6.126) proposé à la section 6.5.3. Les principaux objectifs de ces simulations sont de valider l'implémentation numérique du modèle et d'évaluer sa capacité à reproduire des dynamiques d'étalement stationnaire et instationnaire de films plus ou moins complexes. Les résultats numériques obtenus sont comparés à des solutions de référence expérimentales.

### Sommaire

---

<b>7.1 Pincement stationnaire d'un film tombant . . . . .</b>	<b>195</b>
7.1.1 Présentation de l'étude . . . . .	195
7.1.2 Etude préliminaire : Influence des paramètres de mouillage et de la résolution du maillage sur la solution calculée . . . . .	196
7.1.3 Résultats . . . . .	200
<b>7.2 Transition en ruisselets d'un film tombant . . . . .</b>	<b>205</b>
7.2.1 Présentation de l'étude . . . . .	205
7.2.2 Choix des paramètres numériques . . . . .	206
7.2.3 Résultats . . . . .	209
7.2.4 Discussion . . . . .	218
<b>7.3 Pincement instationnaire d'un film tombant . . . . .</b>	<b>219</b>
7.3.1 Présentation de l'étude . . . . .	219
7.3.2 Prédiction de la stabilité du film . . . . .	220
7.3.3 Résultats . . . . .	221
<b>7.4 Transition en ruisselets d'un film cisailé . . . . .</b>	<b>223</b>
7.4.1 Présentation de l'étude . . . . .	223
7.4.2 Simulations numériques . . . . .	224
<b>7.5 Conclusion du chapitre . . . . .</b>	<b>228</b>

---

## 7.1 Pincement stationnaire d'un film tombant

### 7.1.1 Présentation de l'étude

Ce cas test a pour objectif d'évaluer la capacité du modèle à simuler une configuration de pincement, soit un étalement stationnaire de film tombant. On considère un film liquide injecté avec un débit volumique  $Q$  constant à travers une fente de largeur  $l^{fente}$  et

d'épaisseur  $h^{fente}$  sur un plan vertical qui est représenté sur la figure 7.1. Sous l'effet des forces moléculaires, le liquide va se rétracter (ou se "pincer") à la sortie de l'injecteur. Il adopte un profil transversal (dans la direction  $y$ ) caractérisé par un bourrelet au niveau de la ligne triple dont l'épaisseur  $h^{bulk}$  croît d'autant plus que le film démouille sur le substrat, et par un écoulement de Nusselt loin de la ligne triple d'épaisseur  $h^{Nu}$ . On introduit la longueur de pincement  $L$  qui est la distance séparant la zone d'injection de celle où les deux lignes triples se rejoignent. La réunion des deux bourrelets forme localement une bosse, dont les coordonnées au point de hauteur maximale nous serviront pour déterminer la longueur de pincement  $L$ .

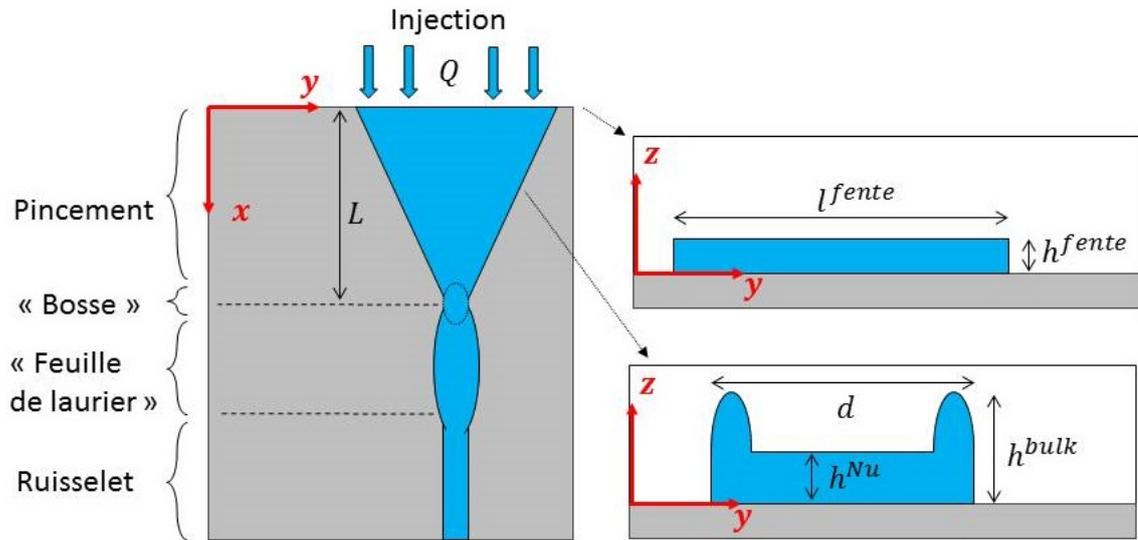


FIGURE 7.1 – Représentation schématique de l'étalement stationnaire d'un film injecté sur une plaque verticale.

Nous souhaitons comparer les simulations numériques aux résultats expérimentaux obtenus expérimentalement par B. Thoraval dans le cadre de son travail de thèse à l'ONERA. Il a étudié plusieurs configurations avec des débits d'injection et des liquides différents, et nous vérifions que les simulations numériques permettent de retrouver la longueur de pincement  $L$  et/ou l'étalement du film  $d$  à une abscisse  $x$  donnée (voir figure 7.1).

### 7.1.2 Etude préliminaire : Influence des paramètres de mouillage et de la résolution du maillage sur la solution calculée

De la même manière que nous avons procédé pour les simulations numériques bidimensionnelles, nous réalisons une étude visant à étudier l'influence du rayon d'action  $h_*$ , de l'angle de contact statique  $\theta_s$  et de la résolution  $\Delta_\Omega$  du maillage sur le pincement du film liquide. Nous allons en particulier vérifier que les conditions obtenues au chapitre 5 sur  $h_*$  et  $\Delta_\Omega$  permettant de retrouver l'étalement stationnaire d'un film liquide sont identiques en trois dimensions.

#### Données numériques et expérimentales

On considère un film liquide injecté sur une plaque verticale de  $8 \times 10^{-2} m$  de long ( $x \in [-0.04, 0.04] m$ ) et de  $6 \times 10^{-2} m$  de large ( $y \in [-0.03, 0.03] m$ ) avec un débit volu-

mique constant  $Q$  à travers une fente d'épaisseur  $h^{fente}$  et de largeur  $l^{fente}$ . Le calcul est alors initialisé avec les conditions aux limites données par :

$$\forall t, \forall y \in \left[ -\frac{l^{fente}}{2}, \frac{l^{fente}}{2} \right], \left\{ \begin{array}{l} h(x = -0,04 \text{ m}, y, t) = h^{fente} \\ \mathbf{q}(x = -0,04 \text{ m}, y, t) = t \left( \frac{Q}{l^{fente}}, 0 \right) \end{array} \right. \quad (7.1)$$

Les conditions d'injection, et les propriétés expérimentales du liquide et du substrat sont listées dans les tableaux suivants

TABLE 7.1 – Conditions d'injection

$Q$ ( $m^3.s^{-1}$ )	$l^{fente}$ (m)	$q^x = \frac{Q}{l^{fente}}$ ( $m^2.s^{-1}$ )	$h^{fente}$ (m)	$\bar{u}^x = \frac{q^x}{h^{fente}}$ ( $m.s^{-1}$ )
$8 \times 10^{-6}$	$4 \times 10^{-2}$	$2 \times 10^{-4}$	$3 \times 10^{-4}$	$6,67 \times 10^{-1}$

TABLE 7.2 – Propriétés à température ambiante du liquide étudié

Liquide	$\rho$ ( $kg.m^{-3}$ )	$\mu$ ( $Pa.s$ )	$\gamma_{lg}$ ( $N.m$ )	$\theta_s$
Eau	998	$10^{-3}$	$7,3 \times 10^{-2}$	$68 \pm 7^\circ$

Enfin, nous avons vu à la section 5.2 que la longueur de glissement  $b$  peut influencer la vitesse de démouillage d'une ligne triple. Cependant, puisque l'on ne s'intéresse dans cette étude qu'à retrouver le pincement en régime stationnaire, et non la dynamique d'étalement, la longueur de glissement  $b$  importe peu et est fixée à  $10^{-8}$  m. Un exemple de simulation est représenté sur la figure 7.2.

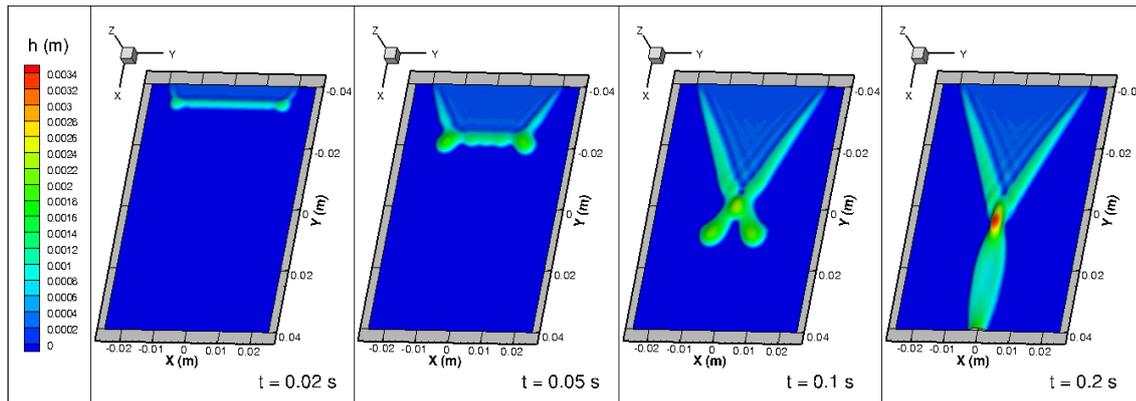


FIGURE 7.2 – Evolution temporelle d'un film liquide injecté sur un substrat vertical. Le rayon d'action  $h_*$  vaut  $10^{-4}$  m, la longueur de glissement  $b$  vaut  $10^{-8}$  m, la résolution du maillage  $\Delta_\Omega$  vaut  $3 \times 10^{-4}$  m et l'angle de contact statique  $\theta_s$  est égal à  $68^\circ$ .

### Influence du couple ( $h_*$ ; $\Delta_\Omega$ )

Les résultats expérimentaux recueillis sur le cas étudié indiquent que le film adopte quasi-instantanément après l'injection un profil d'épaisseur transversal (dans la direction

y) qui se caractérise par un bourrelet d'épaisseur  $h_{exp}^{bulk} \simeq 1 \text{ mm}$  au voisinage de la ligne triple et par un écoulement de Nusselt d'épaisseur  $h_{exp}^{Nu} \simeq 400 \text{ } \mu\text{m}$  loin de la ligne. Si on se base sur l'ensemble des résultats 2D obtenus au chapitre 5, le profil macroscopique stationnaire est à priori bien retrouvé à condition que le rayon d'action  $h_*$  vérifie les deux conditions suivantes :

$$h_* \leq \frac{h^{bulk}}{10} \quad (7.2a)$$

$$h_* \leq \frac{h^{Nu}}{10} \quad (7.2b)$$

La première permet de s'assurer de retrouver le bon étalement du film, car le rayon d'action des forces moléculaires est suffisamment petit devant l'épaisseur du film au voisinage du point triple pour que l'effet macroscopique des forces moléculaires soit bien modélisé. La deuxième permet d'éviter l'apparition d'instabilités spinodales (simulées à la section 5.4) au niveau de l'écoulement de Nusselt. Puisque la résolution du maillage doit vérifier  $\Delta_\Omega \simeq h_*$  afin de garantir que les forces moléculaires soient régularisées à l'échelle du maillage, la condition (7.2b), qui est la plus restrictive, impose  $\Delta_\Omega \simeq 4 \times 10^{-5} \text{ m}$ . On rappelle que le modèle 3D proposé est discrétisé explicitement en temps ( $\Delta t \sim \Delta_\Omega^2$ ), l'utilisation d'une telle résolution de maillage est alors trop coûteuse en temps de calcul (2 à 3 semaines pour cette configuration).

On propose donc de se limiter à la condition (7.2a), permettant d'utiliser un maillage moins résolu et de réaliser des simulations avec un temps de calcul raisonnable (1 à 2 jours). Par contre, puisque l'on ne vérifie plus la condition (7.2b), il faut s'assurer qu'aucune instabilité spinodale ne vient perturber la solution calculée. L'influence de  $h_*$  sur l'apparition de ces instabilités est étudiée dans l'annexe E et a permis de conclure que si nous prenons

$$h_* = 10^{-4} \text{ m} = \frac{h^{Nu}}{4} = \frac{h^{bulk}}{10} \quad (7.3)$$

alors le rayon d'action  $h_*$  est suffisamment petit par rapport à l'épaisseur  $h^{bulk}$  du film au voisinage du point triple pour retrouver l'effet macroscopique des forces moléculaires sans générer d'instabilités spinodales (non-physiques à ces épaisseurs de films). L'influence du maillage sur la solution est également présentée dans cette annexe et prouve qu'à partir d'une résolution de

$$\Delta_\Omega \leq 3 \times 10^{-4} \text{ m} = 3 h_* \quad (7.4)$$

l'étalement stationnaire du film ne varie plus.

### Influence de l'angle de contact statique $\theta_s$

Puisque nous avons déterminé le couple de paramètre ( $h_* ; \Delta_\Omega$ ) permettant de retrouver le comportement stationnaire macroscopique du film, nous pouvons réaliser des simulations numériques et les comparer aux résultats expérimentaux. Le dernier paramètre qu'il faut choisir est l'angle de contact statique  $\theta_s$  qui influence la mouillabilité du liquide. Celui-ci a été mesuré expérimentalement et est compris entre  $61^\circ$  et  $75^\circ$  à cause du phénomène d'hystérésis. Ce phénomène complexe, qui provient des hétérogénéités du substrat (voir section 1.2.4), induit que l'angle de contact statique  $\theta_s$  peut valoir localement sur le substrat n'importe quelle valeur comprise entre  $61^\circ$  et  $75^\circ$ , et induit donc que le liquide peut

être localement plus ou moins mouillant.

Puisque le modélisation du phénomène d'hystérésis n'a pas été abordée dans le cadre de ce travail, nous considérons un substrat homogène, soit un angle de contact statique  $\theta_s$  identique partout sur le substrat. Puisque la longueur de pincement expérimentale  $L^{exp}$  résulte d'une combinaison d'angles comprise entre  $61^\circ$  et  $75^\circ$ , celle-ci devrait être sous-évaluée dans le cas d'un angle de contact homogène de  $75^\circ$  (cas le moins mouillant) et sur-évaluée dans le cas d'un angle de contact homogène de  $61^\circ$  (cas le plus mouillant). On propose ainsi de réaliser des simulations numériques pour ces deux cas limites. Les champs d'épaisseurs à l'état stationnaire sont représentés sur la figure 7.3 et les longueurs de pincement obtenues sont regroupés dans le tableau 7.3.

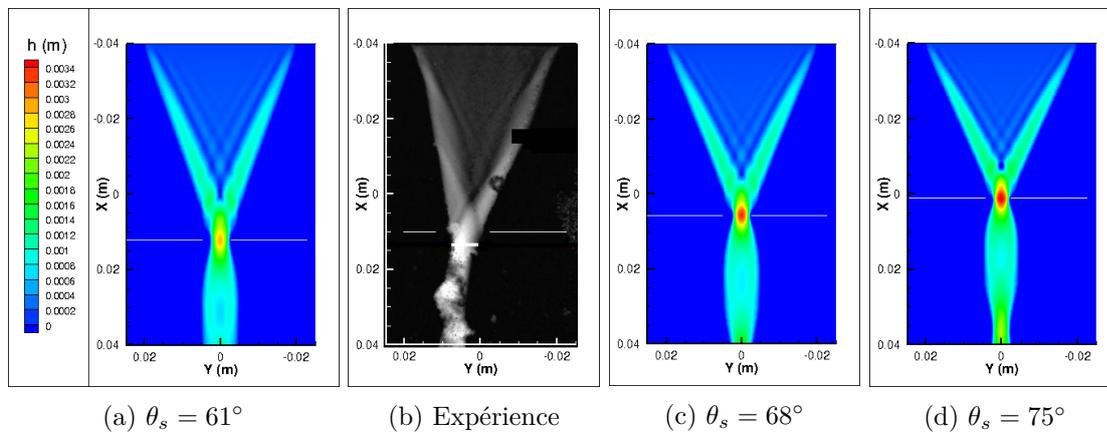


FIGURE 7.3 – Profil d'épaisseur à  $t = 0,2$  s d'un film liquide injecté sur un substrat vertical en fonction de l'angle de contact statique  $\theta_s$ . La longueur de pincement est symbolisée par le trait continu blanc. Les données du calcul sont résumées dans le tableau 7.3.

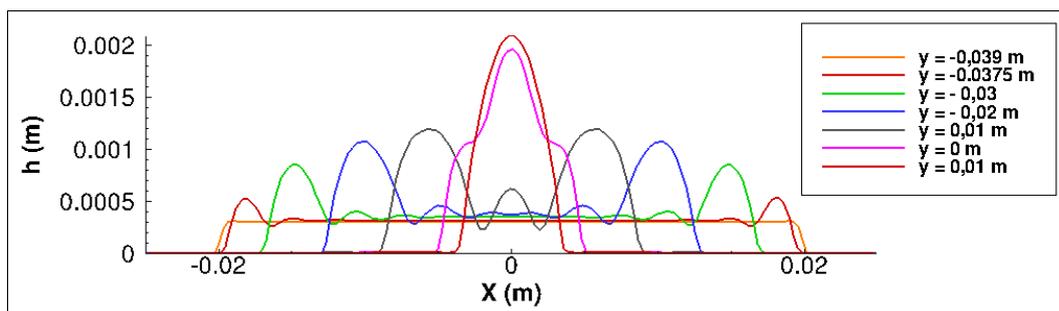


FIGURE 7.4 – Profil 2D d'épaisseur du film  $h(x)$  à différentes coordonnées  $y$  et à  $t = 0,2$  s du cas  $\theta_s = 68^\circ$ .

TABLE 7.3 – Comparaison de la longueur de pincement  $L^{num}$  obtenue par simulation numérique à  $t = 0,2$  s avec celle obtenue expérimentalement  $L^{exp} = 0,05$  m en fonction de l'angle de contact statique  $\theta_s$ . Le rayon d'action moléculaire  $h_*$  est fixé à  $10^{-4}$  m, la résolution du maillage  $\Delta_\Omega$  à  $3 \times 10^{-4}$  m, et le CFL est pris égal à 0,1 induisant un pas de temps moyen de simulation  $\Delta t$  de  $4 \times 10^{-6}$  s.

$h_*$ (m)	$h_*/h^{bulk}$	$h_*/\Delta_\Omega$	$\theta_s$	$L^{num} \times 10^{-2}$ m	$\frac{L^{num} - L^{exp}}{L^{exp}} \times 10^{-2}$
$10^{-4}$	$\simeq 1/10$	1/3	$61^\circ$	5,243	+ 4,86
			$68^\circ$	4,581	- 8,38
			$75^\circ$	4,074	- 18,52

On observe sur les simulations de la figure 7.3 que la longueur de pincement diminue quand l'angle de contact statique  $\theta_s$  augmente, ce qui est en cohérence avec le fait qu'un film liquide se rétracte d'autant plus qu'il est partiellement mouillant. Les valeurs de ces longueurs de pincement sont regroupées dans le tableau 7.3 et nous constatons que la longueur de pincement expérimentale  $L^{exp}$  est comprise entre la longueur  $L^{num}$  obtenue numériquement dans le cas où le film est le plus mouillant ( $\theta_s = 61^\circ$ ) et celle dans le cas où le film est le moins mouillant ( $\theta_s = 75^\circ$ ). On en déduit qu'il est possible de trouver un substrat hétérogène, avec une répartition d'angle de contact  $\theta_s$  comprise dans l'intervalle  $[61^\circ; 75^\circ]$ , qui permette de retrouver par simulation numérique la longueur de pincement expérimentale.

### 7.1.3 Résultats

L'étude préliminaire du paragraphe précédent a permis de démontrer la capacité du modèle à reproduire fidèlement une configuration de pincement. Nous souhaitons alors comparer les simulations numériques à davantage de cas expérimentaux réalisés par B. Thoraval. Six configurations sont simulées (3 fluides et 2 débits d'injections différents) dont les caractéristiques sont listées dans les tableaux suivants

TABLE 7.4 – Propriétés des liquides et du substrat

Liquide	$\rho$ ( $kg.m^{-3}$ )	$\mu$ ( $Pa.s$ )	$\gamma_g$ ( $N.m$ )	$\theta_s$
Eau	998	$10^{-3}$	$7,3 \times 10^{-2}$	$74 \pm 6^\circ$
Eau/Glycérine 60	1153	$7 \times 10^{-3}$	$6 \times 10^{-2}$	$75,5 \pm 6,5^\circ$
Eau/Glycérine 80	1190	$2,9 \times 10^{-2}$	$6,4 \times 10^{-2}$	$82,5 \pm 3,5^\circ$

TABLE 7.5 – Conditions d'injections

$Q$ ( $m^3.s^{-1}$ )	$l^{fente}$ (m)	$q^x = \frac{Q}{l^{fente}}$ ( $m^2.s^{-1}$ )	$h^{fente}$ (m)	$\bar{u}^x = \frac{q^x}{h^{fente}}$ ( $m.s^{-1}$ )
$9,17 \times 10^{-6}$	$7 \times 10^{-2}$	$1,31 \times 10^{-4}$	$3 \times 10^{-4}$	$4,365 \times 10^{-1}$
$1,25 \times 10^{-5}$		$1,79 \times 10^{-4}$		$5,952 \times 10^{-1}$

Le plan est vertical, le film liquide est soumis à l'action de la gravité ( $g = 9.81$   $m.s^{-2}$ ),

la longueur de glissement  $b$  est fixée à  $10^{-8}m$ . Le rayon d'action  $h_*$  est fixé à  $10^{-4}m$ , il vérifie pour tout les cas étudiés  $h_* \leq h^{bulk}/10$  et aucune apparition d'instabilités spinodales pouvant perturber la solution n'a été constatée. La résolution du maillage est fixée pour tous les cas à  $\Delta_\Omega = 3 \times 10^{-4}m = 3h_*$ , suffisamment grande pour considérer que l'étalement stationnaire ne varie plus. Le CFL est fixé à 0,1.

Pour chaque cas étudié, l'hystérésis de l'angle de contact statique  $[\theta_s^{min}; \theta_s^{max}]$  mesuré expérimentalement est donné dans le tableau 7.4. L'objectif est de vérifier que la longueur de pincement expérimentale  $L^{exp}$  est comprise entre les longueurs  $L^{num}$  obtenues par simulation numérique sur un substrat homogène respectivement d'angle de contact statique  $\theta_s^{min}$  et d'angle de contact statique  $\theta_s^{max}$ . Dans le cas particulier du mélange "eau/glycérine 80", la longueur de pincement est plus grande que la dimension de la plaque utilisée dans les expériences, nous comparerons alors l'étalement transversal  $d$  (voir figure 7.1) à l'abscisse  $x = 0,02m$ . Les simulations numériques et les clichés expérimentaux sont présentées aux paragraphes suivant.

Les résultats en terme de longueur de pincement et d'étalement sont en très bon accord avec les mesures expérimentales pour l'ensemble des liquides et des débits d'injection, et prouvent donc la capacité du modèle proposé à retrouver des étalements stationnaires de films tombants.

## Résultats avec l'eau

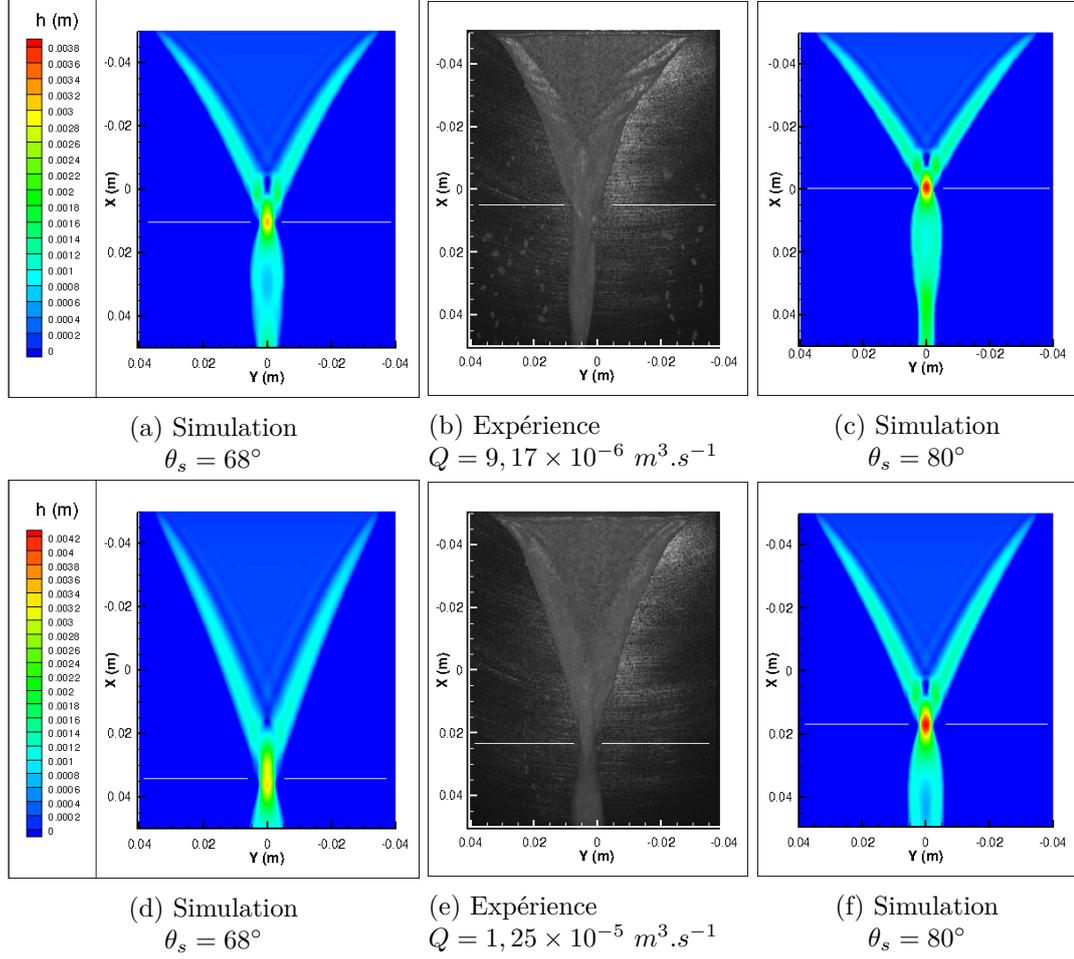


FIGURE 7.5 – Profil d'épaisseur à  $t = 0,3 \text{ s}$  d'un film d'eau injecté sur un substrat vertical en fonction du débit volumique  $Q$ . La longueur de pincement est symbolisée par le trait continu blanc. Les données du calcul sont résumées dans le tableau 7.7.

TABLE 7.6 – Comparaison de la longueur de pincement  $L^{num}$  obtenue par simulation numérique à  $t = 0,3 \text{ s}$  avec celle obtenue expérimentalement  $L^{exp}$  en fonction de l'angle de contact statique  $\theta_s$  et du débit volumique d'injection  $Q$ .

$h_*$ (m)	$\frac{h_*}{h_{bulk}}$	$Q$ ( $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ )	$\theta_s$	$L^{num}$ (m)	$L^{exp}$ (m)	$\frac{L^{num} - L^{exp}}{L^{exp}} \times 10^{-2}$
$10^{-4}$	$\simeq \frac{1}{10}$	$9,17 \times 10^{-6}$	$68^\circ$	$5,90 \times 10^{-2}$	$5,5 \times 10^{-2}$	+ 7,273
			$80^\circ$	$5,023 \times 10^{-2}$		- 8,673
		$1,25 \times 10^{-5}$	$68^\circ$	$8,44 \times 10^{-2}$	$7,35 \times 10^{-2}$	+ 14,83
			$80^\circ$	$6,691 \times 10^{-2}$		- 8,97

## Résultats avec le mélange Eau/Glycérine 60

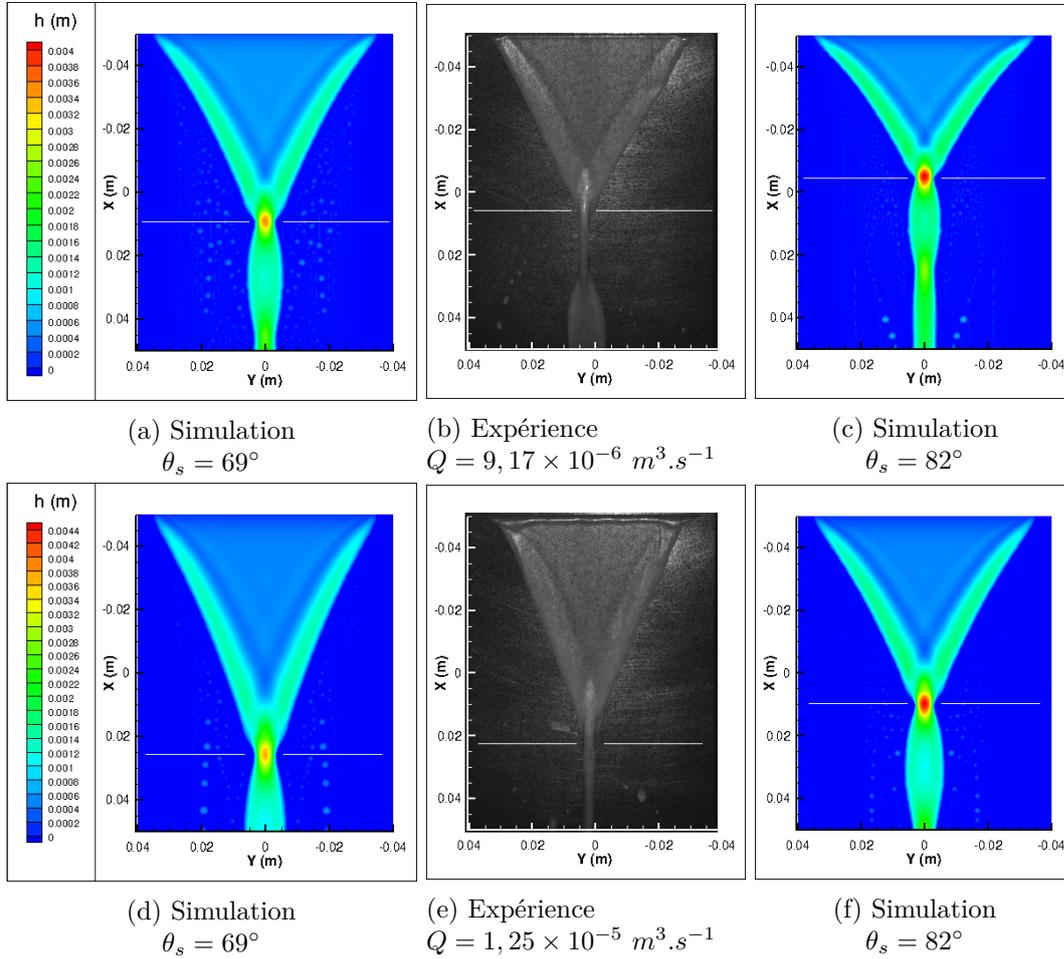


FIGURE 7.6 – Profil d'épaisseur à  $t = 0,6 \text{ s}$  d'un mélange eau/glycérine injecté sur un substrat vertical en fonction du débit volumique  $Q$ . La longueur de pincement est symbolisée par le trait continu blanc. Les données du calcul sont résumées dans le tableau 7.7.

TABLE 7.7 – Comparaison de la longueur de pincement  $L^{num}$  obtenue par simulation numérique à  $t = 0,6 \text{ s}$  avec celle obtenue expérimentalement  $L^{exp}$  en fonction de l'angle de contact statique  $\theta_s$  et du débit volumique d'injection  $Q$ .

$h_*$ (m)	$\frac{h_*}{h_{bulk}}$	$Q$ ( $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ )	$\theta_s$	$L^{num}$ (m)	$L^{exp}$ (m)	$\frac{L^{num} - L^{exp}}{L^{exp}} \times 10^{-2}$
$10^{-4}$	$\simeq \frac{1}{18}$	$9,17 \times 10^{-6}$	$69^\circ$	$5,91 \times 10^{-2}$	$5,69 \times 10^{-2}$	+ 3,87
			$82^\circ$	$4,55 \times 10^{-2}$		- 20,04
		$1,25 \times 10^{-5}$	$69^\circ$	$7,57 \times 10^{-2}$	$7,22 \times 10^{-2}$	+ 4,88
			$82^\circ$	$5,97 \times 10^{-2}$		- 17,33

## Résultats avec le mélange Eau/Glycérine 80

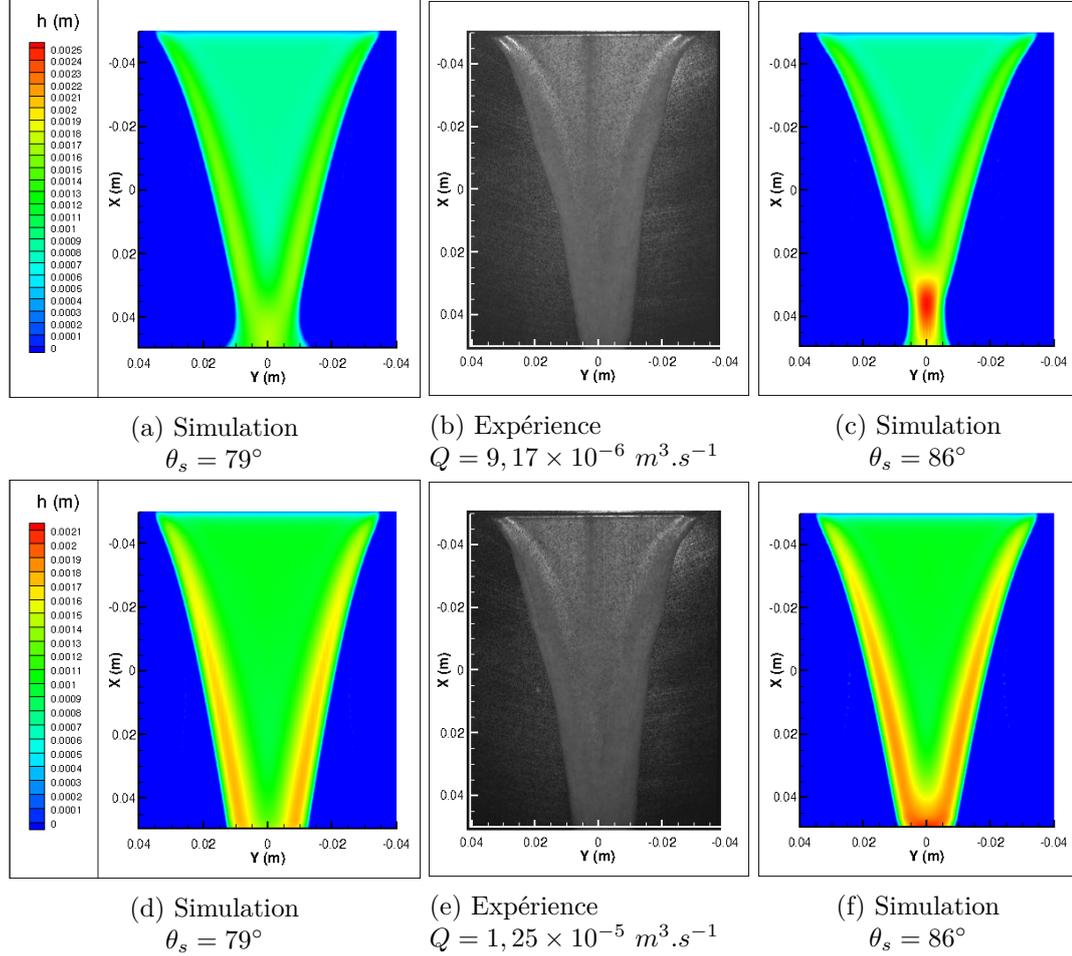


FIGURE 7.7 – Profil d'épaisseur à  $t = 1 \text{ s}$  d'un mélange eau/glycérine injecté sur un substrat vertical en fonction du débit volumique  $Q$ . La longueur de pincement est symbolisée par le trait continu blanc. Les données du calcul sont résumées dans le tableau 7.8.

TABLE 7.8 – Comparaison de l'étalement  $d^{num}$  du film à l'abscisse  $x = 0,02 \text{ m}$  obtenu par simulation numérique à  $t = 1 \text{ s}$  avec celui obtenu expérimentalement  $d^{exp}$  en fonction de l'angle de contact statique  $\theta_s$  et du débit volumique d'injection  $Q$ .

$h_*$ (m)	$\frac{h_*}{h^{bulk}}$	$Q$ ( $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ )	$\theta_s$	$d^{num}$ (m)	$d^{exp}$ (m)	$\frac{d^{num} - d^{exp}}{d^{exp}} \times 10^{-2}$
$10^{-4}$	$\simeq \frac{1}{17}$	$9,17 \times 10^{-6}$	$79^\circ$	$2,759 \times 10^{-2}$	$2,35 \times 10^{-2}$	+ 17,4
			$86^\circ$	$2,096 \times 10^{-2}$		- 10,81
		$1,25 \times 10^{-5}$	$79^\circ$	$3,658 \times 10^{-2}$	$2,77 \times 10^{-2}$	+ 32,06
			$86^\circ$	$3,055 \times 10^{-2}$		+ 10,29

## 7.2 Transition en ruisselets d'un film tombant

### 7.2.1 Présentation de l'étude

Nous souhaitons vérifier que le modèle proposé est capable de simuler la transition d'un film en ruisselets et de reproduire quantitativement des résultats expérimentaux réalisés par Johnson [31]. On considère un film liquide injecté sur une plaque inclinée avec un débit volumique constant  $Q$  à travers une fente d'épaisseur  $h^{fente}$  et de largeur  $l^{fente}$  uniformément dans la direction  $y$ . Le liquide est donc injecté avec un débit volumique linéique  $\mathbf{q}$  ou une vitesse moyenne  $\bar{\mathbf{u}}$  donnés par

$$\mathbf{q} = {}^t(q^x, q^y) = {}^t\left(\frac{Q}{l^{fente}}, 0\right), \quad \bar{\mathbf{u}} = \frac{\mathbf{q}}{h^{fente}} \quad (7.5)$$

Les propriétés du liquide correspondent à celles du fluide B dans [31].

TABLE 7.9 – Propriétés à température ambiante du fluide B.

Liquide	$\rho$ ( $kg.m^{-3}$ )	$\mu$ ( $Pa.s$ )	$\gamma_{lg}$ ( $N.m$ )	$\theta_s$
Eau	1210	$8,349 \times 10^{-2}$	$6,6 \times 10^{-2}$	$38^\circ$

Johnson constate que le liquide injecté ne conserve pas un profil uniforme dans la direction transversale et transitionne rapidement en ruisselets, comme représenté sur la figure 7.8.

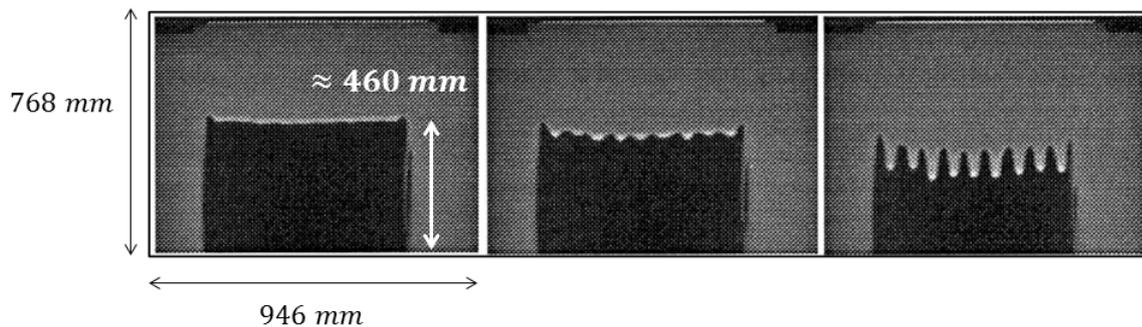


FIGURE 7.8 – Clichés expérimentaux obtenus par Johnson dans le cas du fluide B. Les conditions d'injection et l'inclinaison du plan ne sont pas donnés.

Il réalise différentes configurations en faisant varier le débit d'injection et l'inclinaison  $\beta^y$  du substrat (voir figure 7.10), et mesure pour chaque cas les caractéristiques géométriques des ruisselets définies par l'espacement moyen  $d$  entre deux ruisselets et l'étalement moyen  $w$  d'un ruisselet dans la direction transversale (voir figure 7.9).

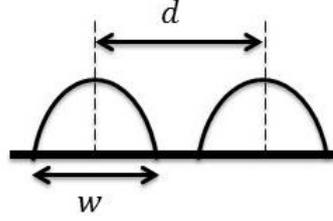


FIGURE 7.9 – Profil transversal d'un ruisseaulet.  $d$  représente l'espacement entre deux ruisseaulets et  $w$  l'étalement du ruisseaulet.

L'ensemble des configurations auxquelles nous allons nous comparer, ainsi que les formes expérimentales des ruisseaulets, sont résumés dans le tableau 7.10. Afin de faciliter la comparaison de nos résultats avec ceux de Johnson, nous introduisons le nombre de Reynolds d'injection du liquide, donné par

$$Re = \frac{q^x}{\nu} \quad (7.6)$$

qui servira à étudier l'influence du débit. On introduit également l'épaisseur théorique  $h^{Nu}$  de l'écoulement de Nusselt stationnaire correspondant au débit étudié

$$h^{Nu} = \left[ \frac{3 \nu q^x}{g \sin(\beta^y)} \right]^{1/3} \quad (7.7)$$

L'épaisseur  $h^{fente}$  de la fente de l'injecteur sera prise égale à  $h^{Nu}$ .

TABLE 7.10 – Evolution de l'espacement  $w^{exp}$  et de la largeur  $d^{exp}$  expérimental des ruisseaulets en fonction du Reynolds d'injection du liquide et de l'inclinaison  $\beta^y$  du plan. Données expérimentales obtenues par Johnson [31] avec le fluide B.

$Re$	$q^x$ ( $m^2 \cdot s^{-1}$ )	$\beta^y$ ( $^\circ$ )	$h^{Nu}$ (m)	$d^{exp} \times 10^{-3}$ (m)	$w^{exp} \times 10^{-3}$ (m)
0,13	$8,97 \times 10^{-6}$	90	$5,742 \times 10^{-4}$	$21,5 \pm 4$	–
		27,9	$7,396 \times 10^{-4}$	$29,1 \pm 4$	–
		13,9	$9,236 \times 10^{-4}$	$40 \pm 4$	–
0,26	$1,794 \times 10^{-5}$	90	$7,234 \times 10^{-4}$	$22 \pm 4$	–
0,52	$3,588 \times 10^{-5}$	90	$9,114 \times 10^{-4}$	$23,75 \pm 4$	–
		27,9	$1,174 \times 10^{-3}$	$31,5 \pm 4$	$\simeq 25$
		13,9	$1,466 \times 10^{-3}$	$45 \pm 4$	$\simeq 30$

### 7.2.2 Choix des paramètres numériques

Nous avons vu à la section 6.2, que lorsqu'un film est injecté uniformément dans la direction  $y$  sur un substrat incliné, et que si aucune perturbation n'est imposée au voisinage de la ligne triple, le film conserve un champ d'épaisseur uniforme dans la direction  $y$  et se déplace à une vitesse constante  $V^x = q^x/h^{Nu}$ . On a alors un champ d'épaisseur de la forme  $h(x, y, t) = h_o(\xi)$ , avec  $\xi = x - V^x t$ , qui se caractérise par un bourrelet près de la ligne triple et un écoulement de Nusselt loin de la ligne, comme représenté sur la figure 7.10.

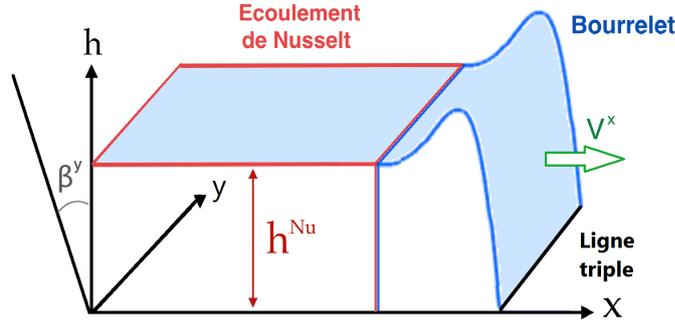


FIGURE 7.10 – Représentation d'un film s'écoulant à débit constant uniformément dans la direction transversale  $y$ .

La stabilité d'un film tombant en réponse à une perturbation dans la direction transversale est donnée par le signe du facteur d'amplification temporel qui s'exprime analytiquement par

$$\omega_i = V^x \left( \int_{-\infty}^0 \left[ \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} \right] \left[ \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} - 1 \right] \left[ 1 + \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} + \frac{b}{h^{Nu}} \right] d\xi \right) k^2 \quad (7.8)$$

La stabilité du film est donc directement dépendante du profil d'épaisseur longitudinal  $h_o(\xi)$ . Dans le cas où le bourrelet est haut et large,  $h_o(\xi)$  est grand devant  $h^{Nu}$  sur une grande partie du domaine d'intégration de (7.8). Le facteur d'amplification  $\omega_i$  est donc susceptible d'être positif. Une perturbation au voisinage de la ligne triple va s'amplifier et des ruisselets vont se former. À l'opposé, si le bourrelet est petit,  $\omega_i$  peut devenir négatif. Une perturbation va s'atténuer dans le temps et le film va continuer à s'écouler uniformément dans la direction  $y$ . Le profil longitudinal  $h_o(\xi)$  du bourrelet joue donc un rôle prépondérant sur la stabilité du film et une mauvaise modélisation de celui-ci pourrait fausser sa stabilité. En effet, si la hauteur du bourrelet obtenue par simulation numérique est plus petite que sa valeur réelle, le film liquide peut devenir linéairement stable alors qu'il est sensé être linéairement instable. Par ailleurs, étant donné que le profil du bourrelet pilote la stabilité du film, on peut également penser qu'il a un impact sur les caractéristiques géométriques des ruisselets, tels que leur espacement et leur étalement.

On en conclut qu'il est à priori nécessaire de modéliser correctement le bourrelet dont le profil varie en fonction de la configuration expérimentale et des propriétés physiques du liquide et du substrat. Ces dernières propriétés étant fournies dans les tableaux 7.8 et 7.9, il reste à choisir les paramètres numériques de notre modèle qui sont le rayon d'action moléculaire  $h_*$ , la longueur de glissement  $b$ , et la résolution du maillage  $\Delta_\Omega$ .

### Propriétés de mouillage et de viscosité

L'influence de la longueur de glissement  $b$  et du rayon d'action  $h_*$  des forces moléculaires sur le profil longitudinal  $h_o(\xi)$  a été étudiée à la section 5.3 en effectuant des simulations numériques bi-dimensionnelles du cas  $(Re ; \beta^y) = (0,52 ; 27,9^\circ)$ . Nous en sommes venus à la conclusion que dans le cas d'un film partiellement mouillant (cas du fluide B étudié ici), la hauteur du bourrelet est uniquement pilotée par les effets de mouillage partiel, et donc par le rayon d'action  $h_*$ . Si celui-ci est pris suffisamment petit par rapport à l'épaisseur de l'écoulement de Nusselt, soit si  $h_* \leq h^{Nu}/10$ , l'effet des forces moléculaires sur le profil du

bourrelet est bien retrouvé. Concernant la longueur de glissement  $b$ , elle doit simplement être prise négligeable devant  $h^{Nu}$  afin de retrouver l'écoulement de Nusselt théorique loin de la ligne triple. Ainsi, pour l'ensemble des simulations réalisées, nous avons pris

$$h_* = \frac{h^{Nu}}{10}, \quad b = 10^{-8} \text{ m} \quad (7.9)$$

qui respectent pour chaque cas les conditions données plus haut.

### Résolution du maillage

L'étude de la section 5.3 a permis de conclure que si nous souhaitons modéliser correctement le bourrelet, il faut une résolution du maillage  $\Delta_\Omega$  qui vérifie

$$\Delta_\Omega \leq h_* \quad (7.10)$$

Pour les mêmes raisons de coût en temps de calcul expliquées à la section précédente, cette dernière condition n'a pas pu être respectée. La résolution la plus fine que nous avons pu utiliser tout en conservant un temps de calcul raisonnable (de 1 jour à 2 semaines suivant le cas) vaut

$$\Delta_\Omega = 10^{-3} \text{ m} \gg h_* \quad (7.11)$$

La conséquence est que le profil théorique d'épaisseur  $h_o(\xi)$  du bourrelet n'est pas retrouvé, il est sous-évalué comme on peut le constater sur la figure 7.11 qui compare le profil  $h_o(\xi)$  du cas  $(Re; \beta^y) = (0,52; 27,9^\circ)$  obtenu par simulation numérique bidimensionnelle respectivement avec un pas de maillage  $\Delta x = h_*$  et  $\Delta x = 10^{-3} \text{ m} \simeq 10 h_*$ .

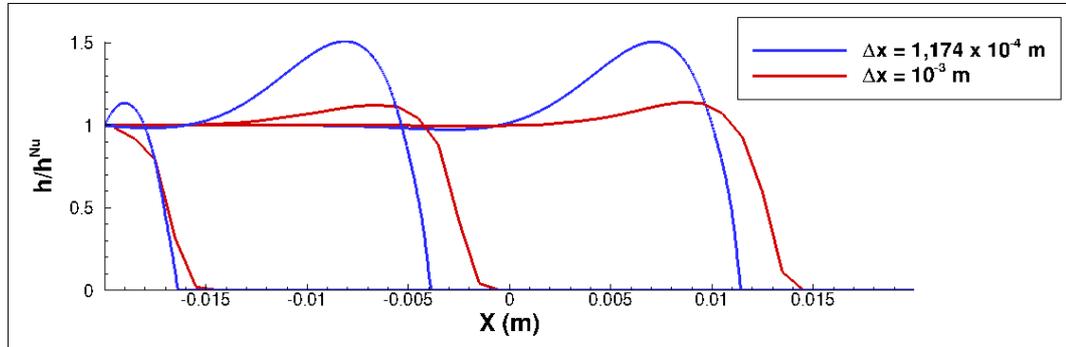


FIGURE 7.11 – Simulations numériques obtenues pour différents pas de maillage  $\Delta x$  du cas  $(Re; \beta^y) = (0,52; 27,9^\circ)$  des expériences de Johnson avec le fluide B. Le rayon d'action  $h_*$  vaut  $1,174 \times 10^{-4} \text{ m}$  et la longueur de glissement  $b$  vaut  $10^{-8} \text{ m}$ . Les profils d'épaisseurs, adimensionnés par l'épaisseur  $h^{Nu} = 1,174 \times 10^{-3} \text{ m}$ , sont tracés à  $t = 0,1 \text{ s}$ , à  $t = 0,6 \text{ s}$  et à  $t = 1,1 \text{ s}$ .

Une étude disponible à l'annexe F a permis de montrer que les simulations numériques sont bien en accord avec l'analyse de stabilité linéaire et donc que l'expression analytique (7.8) du facteur d'amplification temporel  $\omega_i$  constitue un bon indicateur de stabilité du film. Ainsi, si nous évaluons  $\omega_i$  à l'aide des profils  $h_o(\xi)$  tracés sur la figure 7.11, on constate que l'on obtient respectivement pour chaque pas de maillage

$$\begin{aligned} \omega_i(\Delta x = 1,174 \times 10^{-4} \text{ m}) &= + 1,56 \times 10^{-4} \times k^2 \text{ s}^{-1} \\ \omega_i(\Delta x = 10^{-3} \text{ m}) &= + 3,21 \times 10^{-5} \times k^2 \text{ s}^{-1} \end{aligned} \quad (7.12)$$

Le signe du facteur d'amplification temporel obtenu avec le maillage grossier utilisé ( $\Delta x = 10^{-3} \text{ m} \gg h_*$ ) est identique à celui obtenu avec le maillage permettant de retrouver la solution de référence ( $\Delta x = h_*$ ), la stabilité linéaire du film n'est donc pas faussée. Par contre, il est grandement sous-évalué d'un facteur 5, et laisse penser que les caractéristiques géométriques et la vitesse d'apparition des ruisselets pourraient être altérées. C'est ce que nous vérifierons à l'aide des simulations numériques au paragraphe suivant.

### 7.2.3 Résultats

On présente les résultats de simulations numériques tridimensionnelles avec les conditions numériques et expérimentales définies au paragraphe précédent. La méthode utilisée pour appliquer une petite perturbation au voisinage de la ligne triple consiste à initialiser une goutte sur le substrat dont l'épaisseur est faible devant l'épaisseur  $h^{Nu}$  de l'écoulement injecté (voir figure 7.12a). La ligne triple est donc perturbée au moment où elle rencontre cette goutte (voir figure 7.12b).

Pour chaque cas étudié, nous avons également réalisé, comme au paragraphe précédent, une simulation numérique 2D afin d'obtenir le profil  $h_o(\xi)$  du bourrelet et calculer le facteur d'amplification temporel  $\omega_i$  correspondant. On peut ainsi anticiper si la résolution du maillage adoptée ( $\Delta_\Omega = 10^{-3} \text{ m}$ ), qui fausse la modélisation du bourrelet, fausse aussi la stabilité linéaire du film. Les résultats de cette étude sont regroupés dans le tableau suivant

TABLE 7.11 – Evaluation du facteur d'amplification temporel  $\omega_i$  à l'aide du profil  $h_o(\xi)$  obtenu par simulation numérique bidimensionnelle.

$Re$	$\beta$ ( $^\circ$ )	$h^{Nu}$ (m)	$h_* = \frac{h^{Nu}}{10}$ (m)	$b$ (m)	$\Delta x$ (m)	$\omega_i$ ( $s^{-1}$ )
0,52	90	$9,114 \times 10^{-4}$	$9,114 \times 10^{-5}$	$10^{-8}$	$10^{-3}$	$+ 5,07 \times 10^{-5} \times k^2$
	27,9	$1,174 \times 10^{-3}$	$1,174 \times 10^{-4}$			$+ 3,21 \times 10^{-5} \times k^2$
	13,9	$1,466 \times 10^{-3}$	$1,466 \times 10^{-4}$			$+ 1,27 \times 10^{-5} \times k^2$
0,26	90	$7,234 \times 10^{-4}$	$7,234 \times 10^{-5}$	$10^{-8}$	$10^{-3}$	$+ 3,57 \times 10^{-5} \times k^2$
	90	$5,742 \times 10^{-4}$	$5,742 \times 10^{-5}$			$+ 3,12 \times 10^{-5} \times k^2$
	27,9	$7,396 \times 10^{-4}$	$7,396 \times 10^{-5}$			$+ 2,79 \times 10^{-5} \times k^2$
0,13	13,9	$9,236 \times 10^{-4}$	$9,236 \times 10^{-5}$	$10^{-8}$	$10^{-3}$	$+ 2,61 \times 10^{-5} \times k^2$

On constate que tous les facteurs d'amplification  $\omega_i$  sont positifs et donc que toutes les configurations simulées doivent théoriquement transitionner en ruisselets, résultat confirmé par l'ensemble des figures 7.12 à 7.18. On remarque toutefois sur les figures 7.12 et 7.16, correspondant respectivement au cas (0,52 ; 13,9 $^\circ$ ) et (0,13 ; 13,9 $^\circ$ ), que la perturbation (générée par la rencontre entre la ligne triple et la goutte posée initialement sur le substrat) s'amplifie effectivement dans le temps, mais trop lentement pour que des ruisselets puissent être clairement décrits à l'issue de la simulation. Ces deux cas, qui seront discutés à la fin du paragraphe, ne peuvent donc pas être comparés aux résultats de Johnson. Concernant les cinq autres cas dont il est possible de distinguer clairement des ruisselets et d'évaluer leur géométrie, ils sont en très bon accord avec les mesures de Johnson puisque les résultats numériques (voir tableau 7.12) en terme d'espacement sont tous compris dans l'incertitude

des mesures expérimentales et l'étalement moyen d'un ruisselet du cas  $(0,52 ; 27,9^\circ)$  est retrouvé avec une erreur d'à peine 4%.

TABLE 7.12 – Evolution de l'espacement  $w$  et de la largeur  $d$  des ruisselets en fonction du Reynolds d'injection du liquide et de l'inclinaison  $\beta$  du plan. Comparaison des simulations numériques avec les résultats expérimentaux de Johnson [31] avec le fluide B.

$Re$	$\beta$ ( $^\circ$ )	$d^{exp} \times 10^{-3}$ (m)	$d^{num} \times 10^{-3}$ (m)	$w^{exp} \times 10^{-3}$ (m)	$w^{num} \times 10^{-3}$ (m)
0,13	90	$21,5 \pm 4$	19,14	non fourni	8
	27,9	$29,1 \pm 4$	28,5	non fourni	12
0,26	90	$22 \pm 4$	21,09	non fourni	10
0,52	90	$23,75 \pm 4$	23,5	non fourni	15
	27,9	$31,5 \pm 4$	35	$\simeq 25$	24

Nous venons de montrer que bien que le profil du bourrelet au voisinage du point triple ne soit pas correctement modélisé, la géométrie des ruisselets est bien retrouvée, et ce même pour des profils de bourrelets très éloignés de leur solution de référence (voir figure 7.11). L'unique condition à vérifier semble être que le film soit linéairement instable, et donc que le bourrelet soit suffisamment haut pour que le facteur d'amplification temporel  $\omega_i$  soit positif.

Cependant, si l'aspect spatial semble bien retrouvé, l'aspect temporel par contre ne l'est pas forcément. En effet, même si les travaux de Johnson ne fournissent pas d'informations sur la vitesse d'apparition des ruisselets dans les configurations étudiées, on sait d'après le cliché expérimental 7.8 que les ruisselets se développent à priori assez rapidement pour que Johnson ait pu mesurer leur espacement et leur étalement sur un domaine d'étude d'environ 460 mm de long. Or, nous avons constaté que la simulation numérique du cas  $(0,52 ; 13,9^\circ)$  sur la figure 7.12, qui pourtant s'effectue sur un domaine d'étude plus long que 460 mm, montre des ruisselets qui se développent trop lentement pour être clairement caractérisés. On en déduit que la vitesse d'apparition des ruisselets est plus lente dans les simulations numériques.

Simulations numériques des cas correspondant à  $Re = 0,52$

TABLE 7.13 – Récapitulatif des paramètres numériques.

$Re$	$\beta$ ( $^\circ$ )	$h^{Nu}$ (m)	$h_* = h^{Nu}/10$ (m)	$b$ (m)	$\Delta\Omega$ (m)	CFL	$\Delta t$ (s)
	90	$9,114 \times 10^{-4}$	$9,114 \times 10^{-5}$				
0,52	27,9	$1,174 \times 10^{-3}$	$1,174 \times 10^{-4}$	$10^{-8}$	$10^{-3}$	0,1	$\simeq 5 \times 10^{-5}$
	13,9	$1,466 \times 10^{-3}$	$1,466 \times 10^{-4}$				

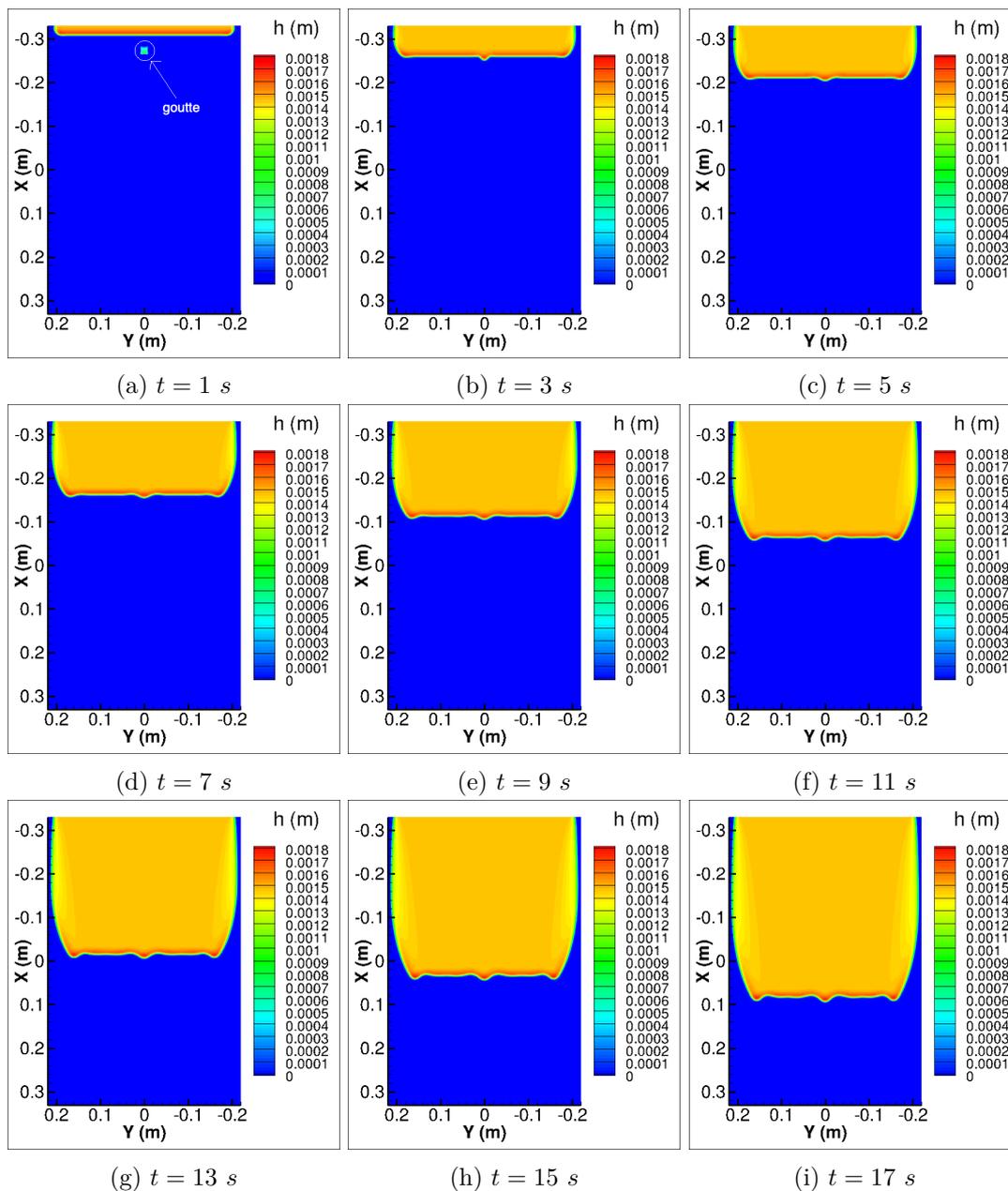
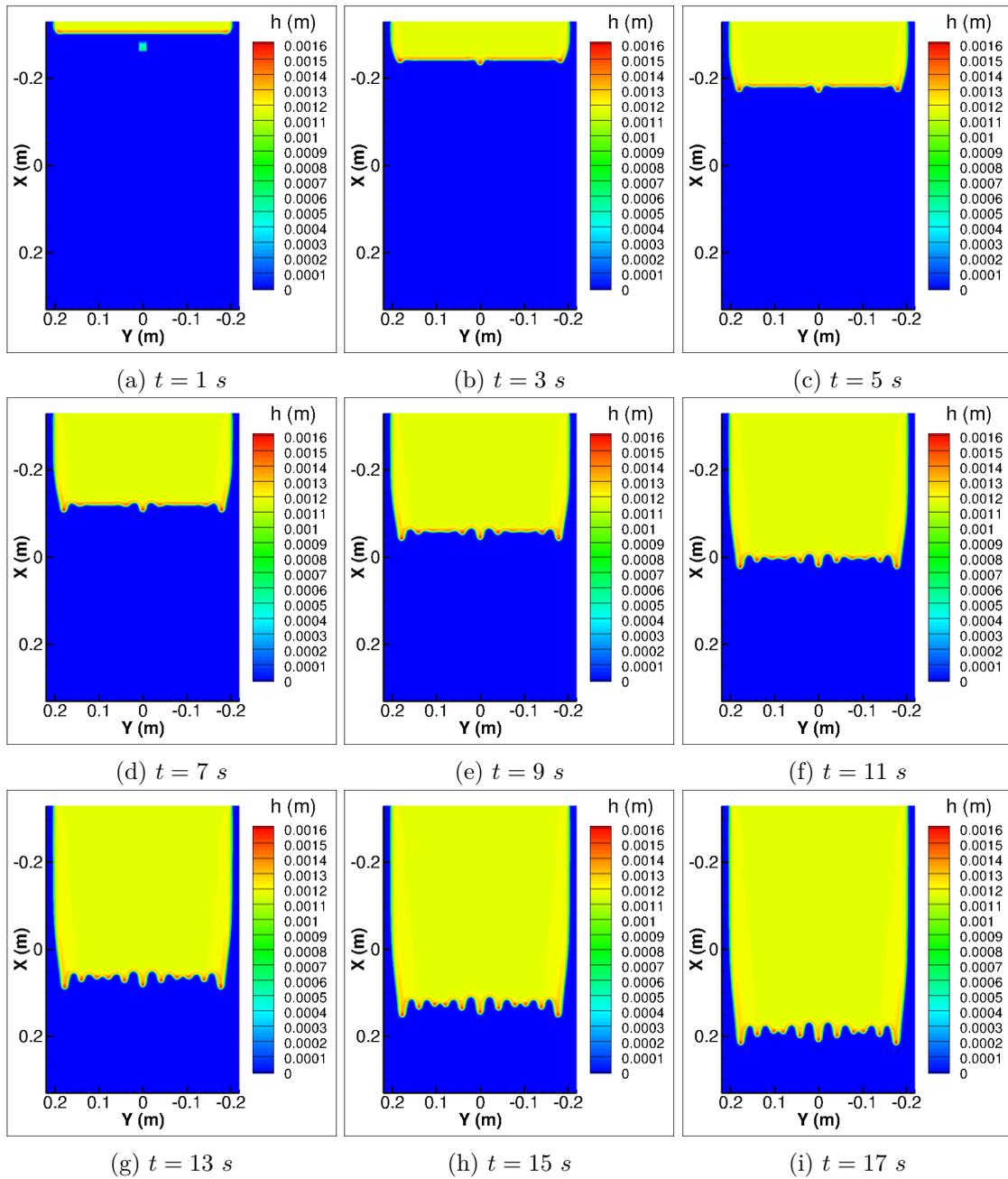
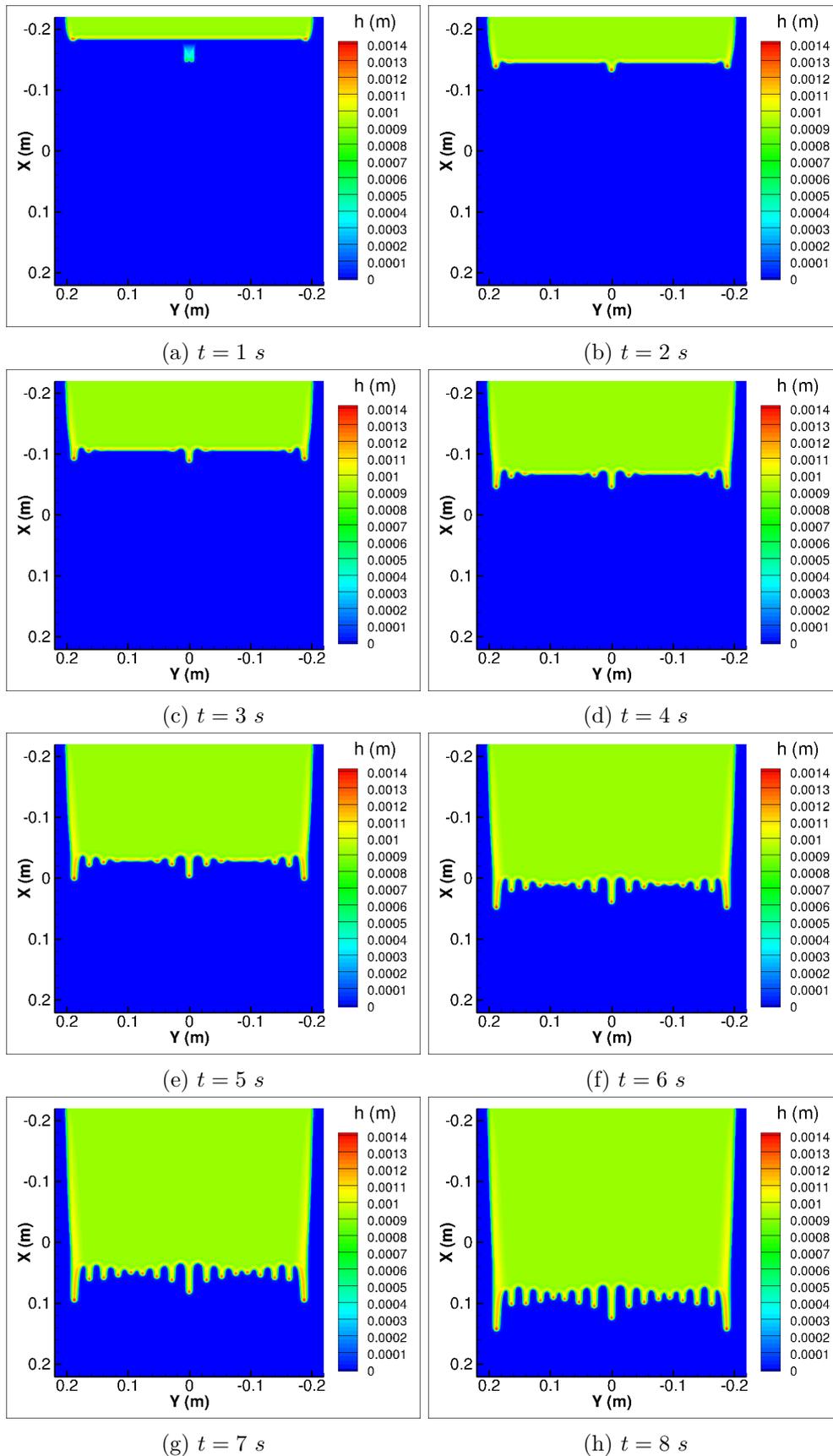


FIGURE 7.12 –  $Re = 0,52$  et  $\beta = 13,9^\circ$

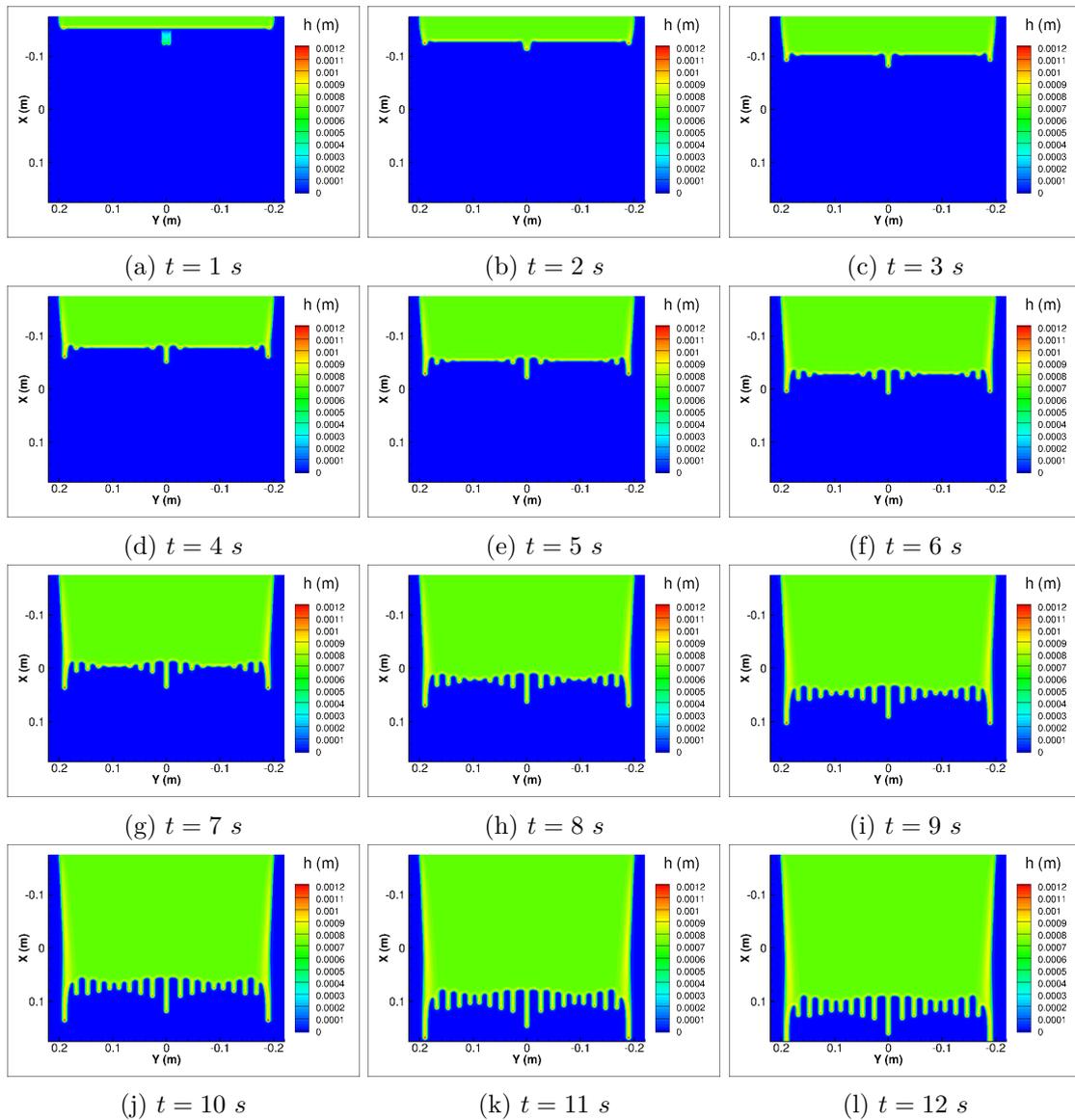
FIGURE 7.13 –  $Re = 0,52$  et  $\beta = 27,9^\circ$

FIGURE 7.14 –  $Re = 0,52$  et  $\beta = 90^\circ$

Simulation numérique du cas correspondant à  $Re = 0,26$ 

TABLE 7.14 – Récapitulatif des paramètres numériques.

$Re$	$\beta$ ( $^\circ$ )	$h^{Nu}$ (m)	$h_* = \frac{h^{Nu}}{10}$ (m)	$b$ (m)	$\Delta\Omega$ (m)	CFL	$\Delta t$ (s)
0,26	90	$7,234 \times 10^{-4}$	$7,234 \times 10^{-5}$	$10^{-8}$	$10^{-3}$	0,1	$\simeq 5 \times 10^{-5}$

FIGURE 7.15 –  $Re = 0,26$  et  $\beta = 90^\circ$

Simulations numériques des cas correspondant à  $Re = 0,13$

TABLE 7.15 – Récapitulatif des paramètres numériques.

$Re$	$\beta$ ( $^\circ$ )	$h^{Nu}$ (m)	$h_* = h^{Nu}/10$ (m)	$b$ (m)	$\Delta\Omega$ (m)	CFL	$\Delta t$ (s)
0,13	90	$5,742 \times 10^{-4}$	$5,742 \times 10^{-5}$	$10^{-8}$	$10^{-3}$	0,1	$\simeq 5 \times 10^{-5}$
	27,9	$7,396 \times 10^{-4}$	$7,396 \times 10^{-5}$				
	13,9	$9,236 \times 10^{-4}$	$9,236 \times 10^{-5}$				

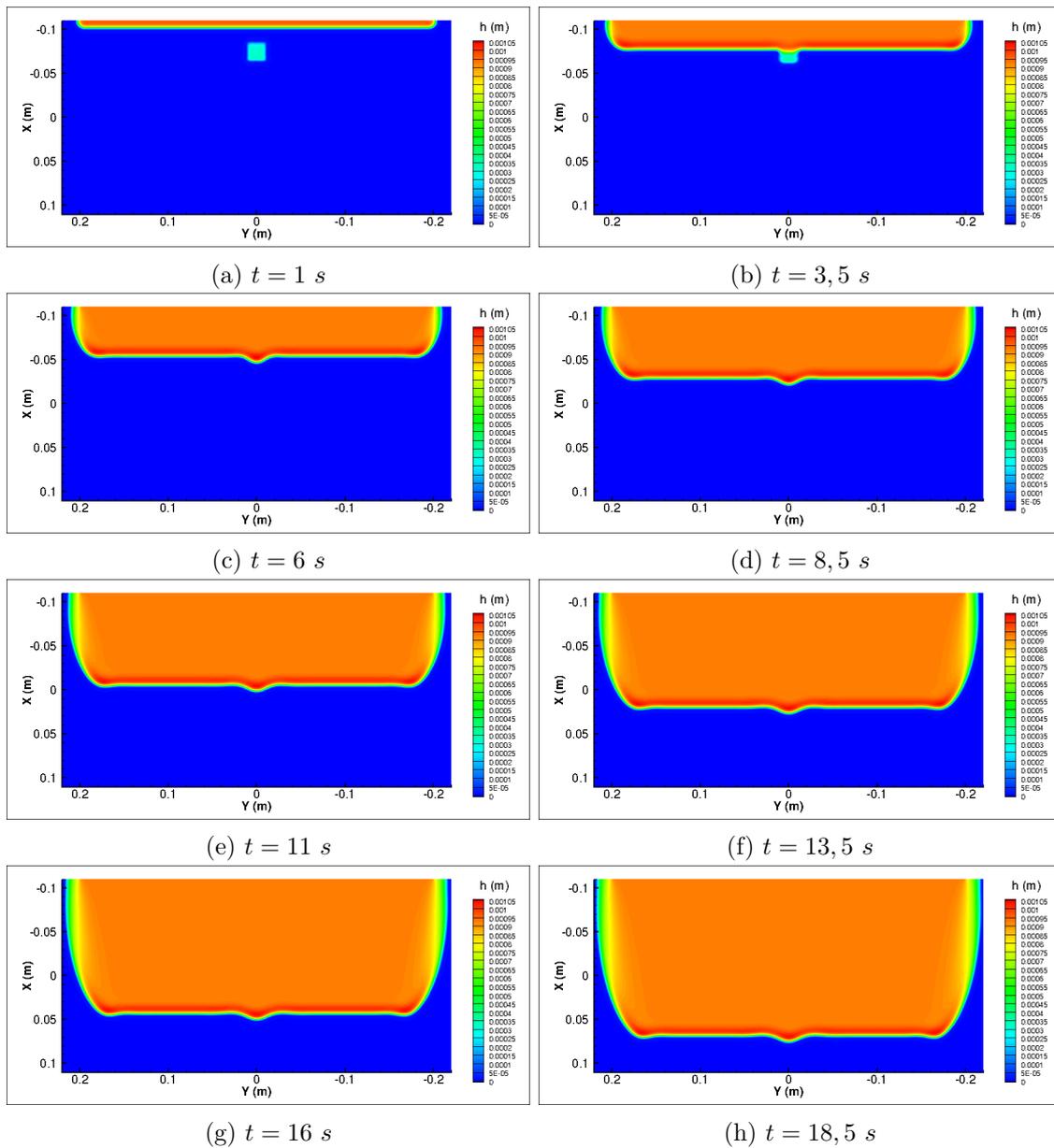
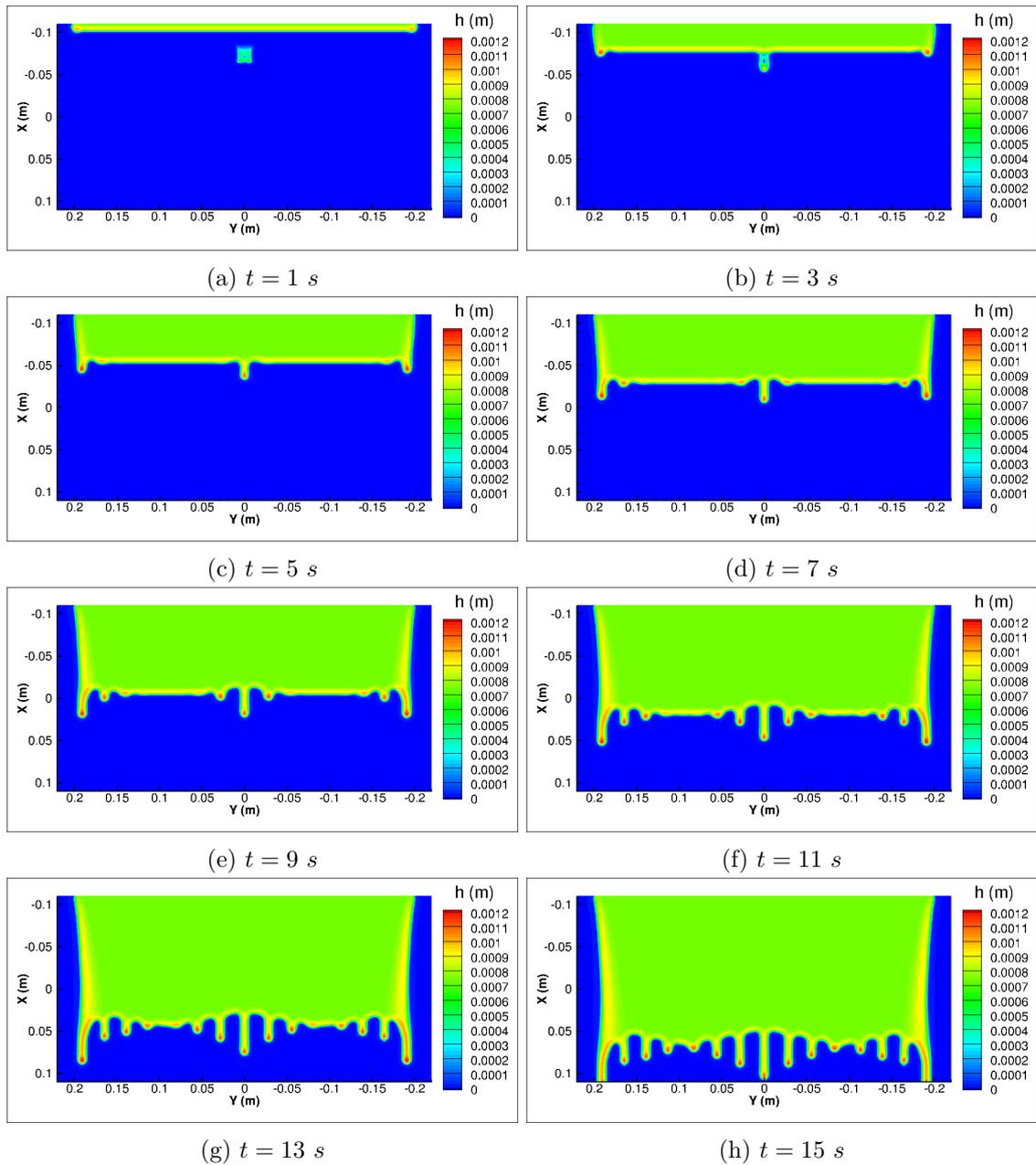
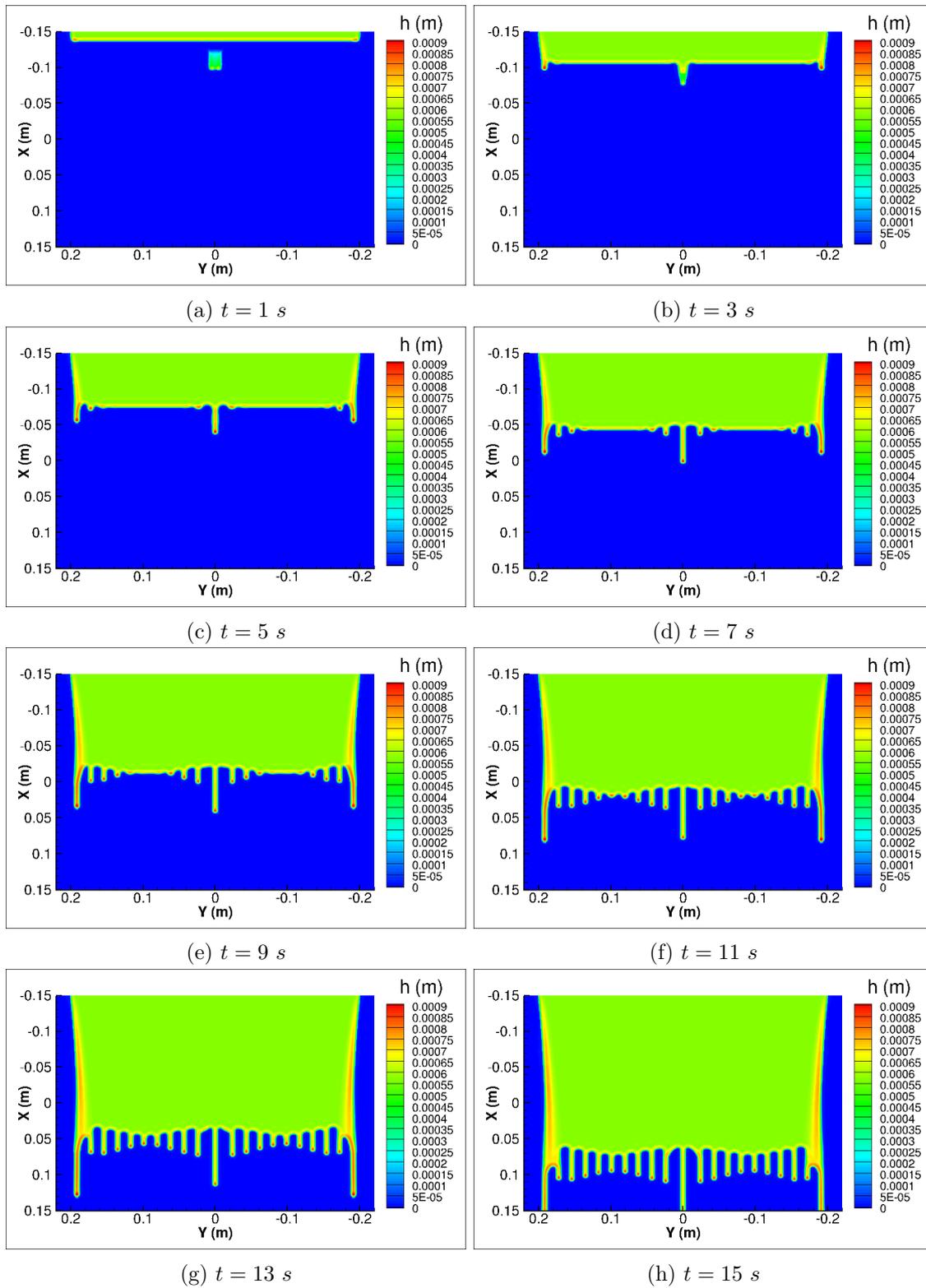


FIGURE 7.16 –  $Re = 0,13$  et  $\beta = 13,9^\circ$

FIGURE 7.17 –  $Re = 0, 13$  et  $\beta = 27, 9^\circ$

FIGURE 7.18 –  $Re = 0,13$  et  $\beta = 90^\circ$

### 7.2.4 Discussion

On trouve dans la littérature de nombreuses études (voir section 2.2.7) qui présentent la transition d'un film en ruisselet comme le résultat d'une instabilité linéaire en réponse à une perturbation transversale. L'espacement entre les ruisselets serait ainsi défini par l'amplification de la longueur d'onde (ou du nombre d'onde  $k$ ) de la perturbation qui induit le facteur d'amplification temporel  $\omega_i(k)$  le plus élevé.

Cependant, nos simulations semblent nuancer ce résultat et s'accordent donc bien avec les conclusions de Slade [117], à savoir que l'analyse de stabilité linéaire constitue un bon outil pour prédire si un film va transitionner en ruisselets ou non, mais s'avère insuffisante pour prédire correctement leur espacement. En effet, si nous supposons que cet espacement est uniquement expliqué par l'analyse de stabilité linéaire de la section 6.2, le profil du bourrelet, qui intervient dans la relation de dispersion (6.58b), devrait à priori être exactement modélisé pour retrouver la bonne longueur d'onde associée au facteur d'amplification maximal. Puisque nous avons montré via des simulations numériques que même un profil très éloigné de sa solution théorique permet de retrouver les caractéristiques spatiales des ruisselets, la relation de dispersion est insuffisante à elle seule pour tout expliquer.

Enfin, nous avons constaté que la vitesse d'apparition des ruisselets des simulations numériques semble plus lente que celles des résultats expérimentaux. L'explication de ce décalage temporel semble toujours être liée au bourrelet au voisinage du point triple. En effet, on rappelle que la hauteur du bourrelet a été sous-évaluée lors des simulations numériques à cause de la résolution grossière du maillage pour des raisons de temps de calcul. Le facteur d'amplification temporel  $\omega_i$  étant d'autant plus petit que la taille du bourrelet est réduite, celui-ci est donc inférieur à sa valeur réelle et peut expliquer pourquoi l'amplification d'une perturbation dans les simulations est plus lente que dans les expériences.

Ainsi, la conclusion générale est que le profil du bourrelet au voisinage du point triple semble davantage influencer la vitesse d'apparition des ruisselets que leur espacement et leur étalement. Cette conclusion, qu'il faudrait toutefois vérifier à posteriori avec des études complémentaires, ouvre des pistes de réflexions intéressantes sur la nature de la transition d'un film en ruisselets.

## 7.3 Pincement instationnaire d'un film tombant

### 7.3.1 Présentation de l'étude

Nous revenons dans cette section sur l'une des configurations de pincement étudiée à la section 7.1. Nous nous étions fixé jusqu'ici uniquement de retrouver l'état stationnaire d'un film tombant et non de retrouver la phase transitoire. Nous allons nous focaliser de nouveau sur la configuration avec le débit volumique d'injection  $Q = 1,25 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$  et le mélange "Eau/Glycérine 80" car elle admet une phase transitoire particulièrement intéressante que nous souhaitons simuler numériquement. En effet, on voit sur les clichés expérimentaux instationnaires de la figure 7.19 qu'aux courts instants ( $t \sim 0,1 \text{ s}$ ), trois ruisselets apparaissent et changent donc considérablement la dynamique d'étalement du film. Ce n'est qu'aux temps très longs ( $t > 3 \text{ s}$ ) que l'on retrouve le pincement stationnaire. Nous souhaitons ainsi vérifier si il est possible de simuler au moins qualitativement cette dynamique particulière.

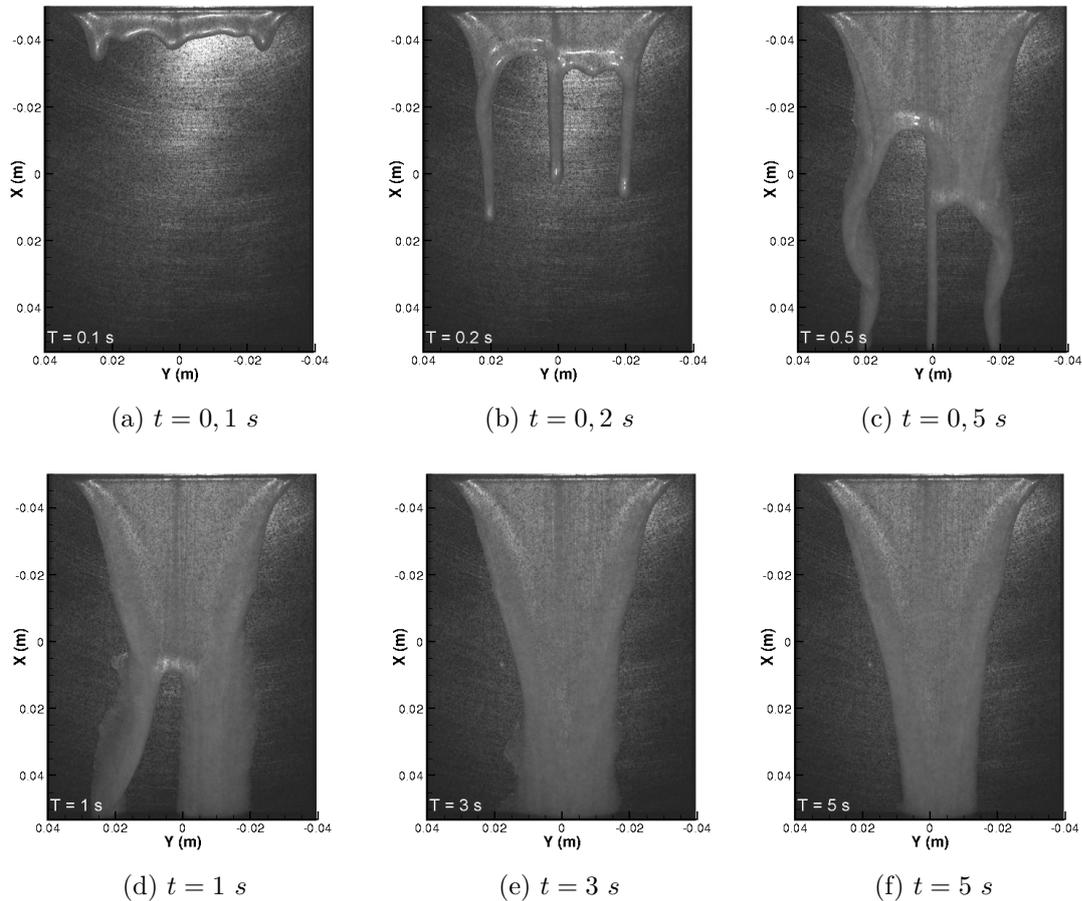


FIGURE 7.19 – Clichés expérimentaux du mélange "Eau/Glycérine 80" injecté sur une plaque verticale avec un débit volumique  $Q = 1,25 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ .

### 7.3.2 Prédiction de la stabilité du film

Les paramètres numériques sont pris identiques à ceux choisis à la section 7.1, soit un rayon d'action moléculaire, une longueur de glissement et une résolution du maillage respectivement de

$$h_* = 10^{-4} \text{ m} \simeq \frac{h^{Nu}}{12}, \quad b = 10^{-8} \text{ m}, \quad \Delta_\Omega = 3 \times 10^{-4} \text{ m} = 3 h_* \quad (7.13)$$

Le facteur d'amplification temporel  $\omega_i$  d'une perturbation, qui se calcul à partir du profil d'épaisseur 2D du film (tracé sur la figure 7.20) injecté avec les conditions numériques et expérimentales choisies, vaut

$$\omega_i = + 7,38 \times 10^{-4} \times k^2 \text{ s}^{-1} \quad (7.14)$$

Le signe positif du facteur d'amplification nous garantit donc que le film est bien susceptible de transitionner en ruisselets lors de la simulation numérique. Toutefois, si on s'appuie sur les conclusions de la section 7.2, on peut déjà anticiper que la vitesse de développement des ruisselets sera plus lente dans nos simulations que dans les expériences, puisque le facteur d'amplification temporel est sous-évalué si  $\Delta_\Omega > h_*$ .

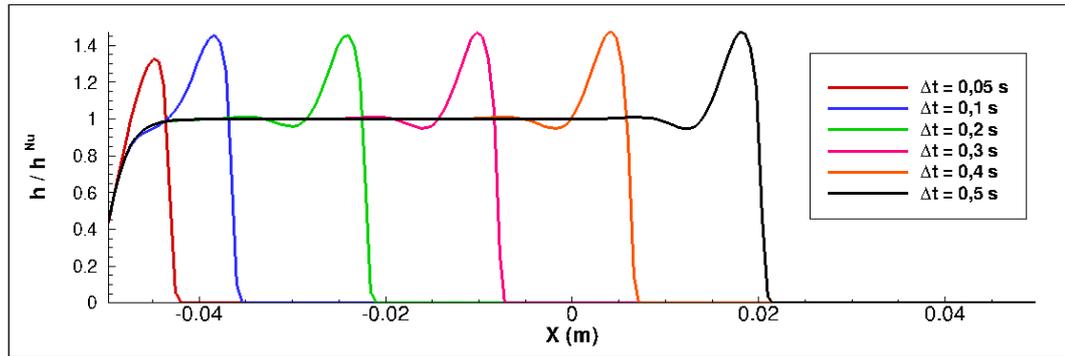


FIGURE 7.20 – Simulation numérique de l'écoulement 2D du mélange "Eau/Glycérine 80" injecté sur une plaque verticale avec un débit volumique linéaire  $q^x = 1,79 \times 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ . Le rayon d'action  $h_*$  vaut  $10^{-4} \text{ m}$ , l'angle de contact statique  $\theta_s$  vaut  $82,5^\circ$ , la longueur de glissement  $b$  vaut  $10^{-8} \text{ m}$  et la pas de maillage  $\Delta x$  vaut  $3 \times 10^{-4} \text{ m}$ . L'épaisseur du film est adimensionnée par celle de l'écoulement de Nusselt  $h^{Nu}$ . Le facteur d'amplification temporel calculé à partir du profil d'épaisseur vaut  $\omega_i = + 7,38 \times 10^{-4} \times k^2 \text{ s}^{-1}$ .

Pour finir, on rappelle que l'angle de contact statique  $\theta_s$  peut expérimentalement prendre n'importe quelle valeur entre  $79^\circ$  et  $86^\circ$  sur le substrat. Afin de se rapprocher de ces conditions expérimentales, on propose de modéliser de manière simplifiée les hétérogénéités du substrat en appliquant de façon aléatoire à l'initialisation du calcul un angle de contact statique  $\theta_s$  compris  $79^\circ$  et  $86^\circ$  sur chaque cellule du maillage. La répartition d'angle de contact statique est représentée sur la figure suivante.

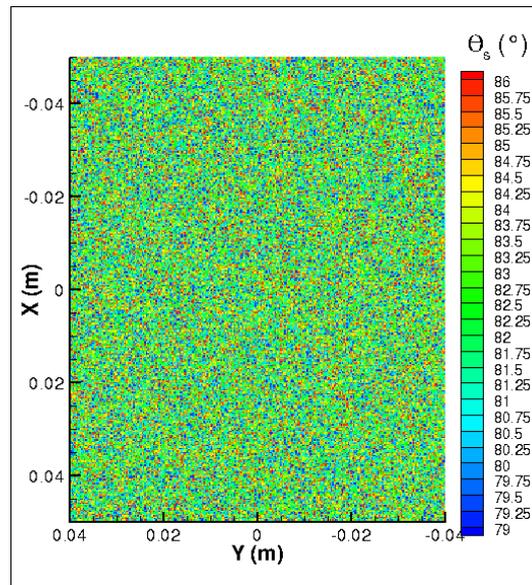


FIGURE 7.21 – Répartition aléatoire de l'angle de contact statique  $\theta_s$  obtenue à partir de la fonction FORTRAN  $rand(0)$ .

### 7.3.3 Résultats

L'écoulement instationnaire du film tombant obtenu par simulation numérique est comparé aux mêmes instants aux clichés expérimentaux sur la figure 7.22. On constate que les résultats sont très satisfaisants, puisque d'un point de vue qualitatif, on observe trois ruisselets avec un espacement qui se rapproche de celui de l'expérience. De plus l'étalement du film aux temps longs ( $t > 0,4 s$ ) semble bien retrouvé. Les moments où l'étalement obtenu par simulation numérique diffère de celui des expériences correspondent aux courts instants ( $t < 0,4 s$ ). En effet, les ruisselets simulés apparaissent moins vite que dans la configuration expérimentale. On voit par exemple que les ruisselets simulés ont traversés  $2/3$  de la longueur de la plaque à  $t = 0,3 s$ , alors que les ruisselets expérimentaux les ont traversés dès  $t = 0,2 s$ .

On en revient finalement à la même conclusion que celle formulée à l'issue de la section 7.2, à savoir qu'une mauvaise évaluation du facteur d'amplification temporel  $\omega_i$  induit un décalage temporel sur l'apparition des ruisselets mais ne semble pas avoir d'impact sur leur espacement (tant que le facteur d'amplification temporel numérique reste positif). Puisque la résolution du maillage utilisée induit une valeur de ce facteur plus petite que sa valeur théorique, ceci expliquerait pourquoi il existe un retard aux temps courts.

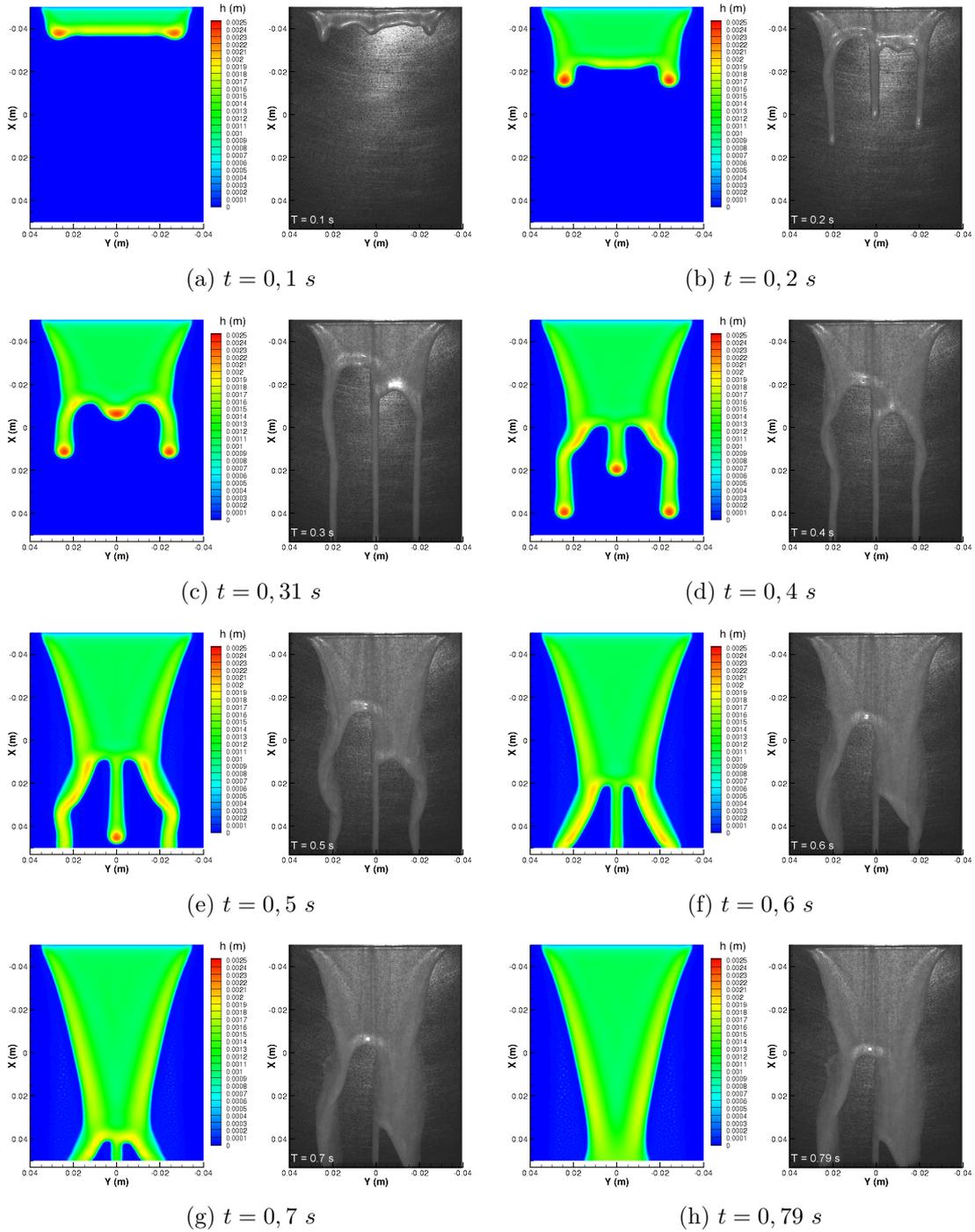


FIGURE 7.22 – Evolution temporelle de l'épaisseur du film d'un mélange eau/glycérine injecté sur un substrat vertical avec un débit volumique  $Q = 1,25 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ .

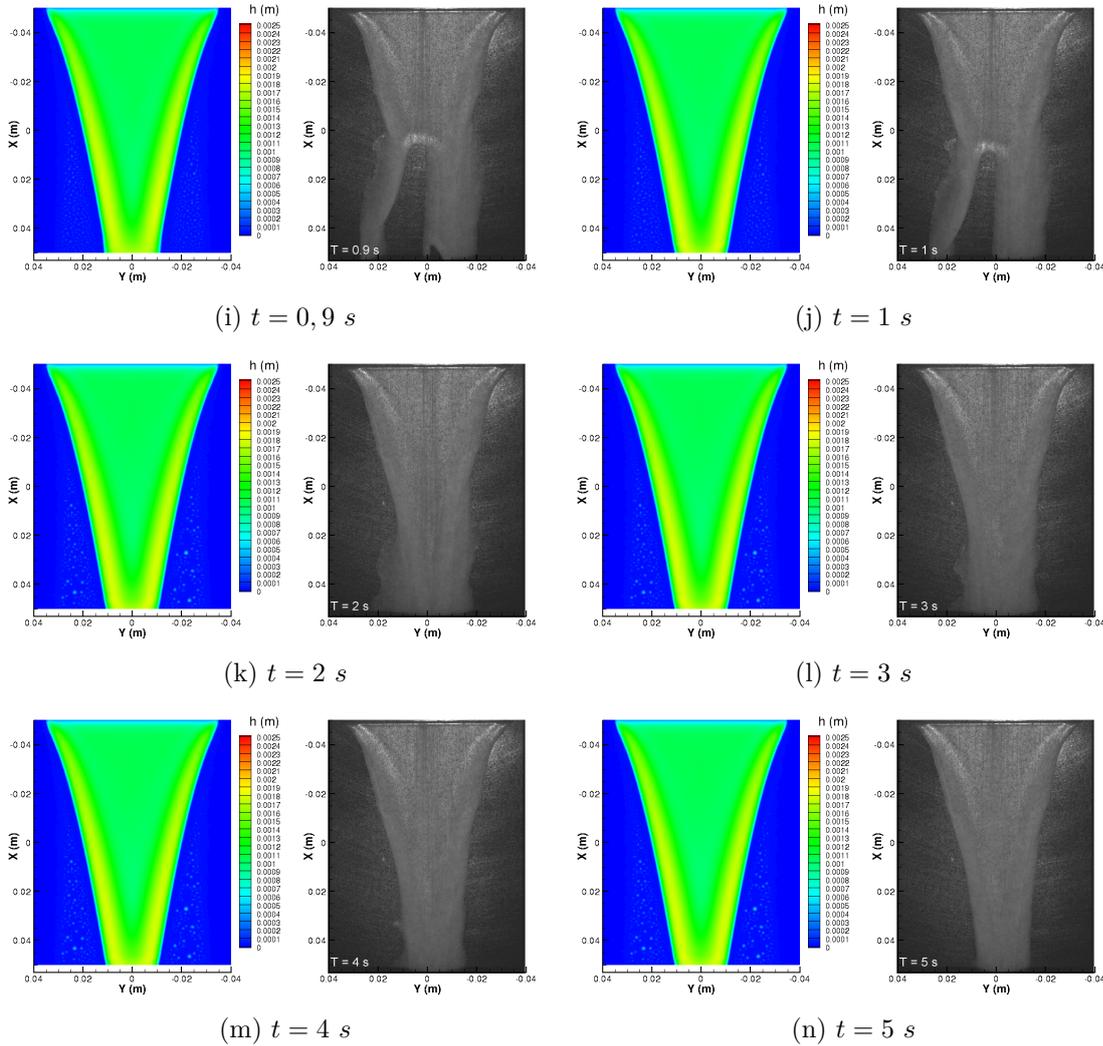


FIGURE 7.22 – Evolution temporelle de l'épaisseur du film d'un mélange eau/glycérine injecté sur un substrat vertical avec un débit volumique  $Q = 1,25 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ .

## 7.4 Transition en ruisselets d'un film cisailé

### 7.4.1 Présentation de l'étude

On s'intéresse à présent à la simulation numérique d'un film liquide cisailé par un gaz. Cette étude est purement numérique dans le sens où elle ne sera pas comparée à des résultats expérimentaux. La raison, déjà expliquée à la section 2.2.2, est que la littérature sur les films cisailés est encore à ce jour très mince [115, 116]. L'objectif de cette étude est seulement de vérifier la capacité du modèle à simuler la transition en ruisselets d'un film cisailé et ainsi justifier des ouvertures pour de futures applications.

On propose de réaliser plusieurs configurations où le film injecté sur une plaque ne s'écoulera plus sous l'effet de la gravité par inclinaison du plan, mais s'écoulera uniquement sous l'effet du cisaillement d'un gaz  $\tau_i^x$  sur un plan horizontal ( $\beta^y = 0$ ). Le nombre de

Reynolds d'injection du liquide est donné par

$$Re = \frac{q^x}{\nu} \quad (7.15)$$

avec  $q^x$  le débit volumique linéique d'injection. L'épaisseur théorique  $h^{Nu}$  de l'écoulement de Nusselt stationnaire correspondant au débit imposé s'écrit dans le cas d'un film cisailé sur un plan horizontal

$$h^{Nu} = \left[ \frac{3 \rho \mu q^x}{\tau_i^x} \right]^{1/2} \quad (7.16)$$

En reprenant les propriétés du fluide B des expériences de Johnson données dans le tableau 7.9, nous allons simuler les trois configurations suivantes

TABLE 7.16 – Débit linéique d'injection et taux de cisaillement des configurations simulées.

$Re$	$q^x$ ( $m^2.s^{-1}$ )	$\beta^y$ ( $^\circ$ )	$\tau_i^x$ ( $Pa$ )	$h^{Nu}$ ( $m$ )
0,13	$8,97 \times 10^{-6}$		7,212	$5,742 \times 10^{-4}$
0,26	$1,794 \times 10^{-5}$	0	5,725	$7,234 \times 10^{-4}$
0,52	$3,588 \times 10^{-5}$		4,544	$9,114 \times 10^{-4}$

On remarque que les épaisseurs  $h^{Nu}$  de l'écoulement de Nusselt dans la tableau 7.16 correspondent respectivement (de haut en bas) aux épaisseurs obtenues dans les cas ( $Re = 0,13$  ;  $\beta^y = 90^\circ$ ), ( $Re = 0,26$  ;  $\beta^y = 90^\circ$ ) et ( $Re = 0,52$  ;  $\beta^y = 90^\circ$ ) à la section 7.2. On reproduit ainsi trois configurations de film cisailé sur un plan horizontal, analogues aux expériences de Johnson d'un film tombant sur un plan vertical.

#### 7.4.2 Simulations numériques

Les cas étudiés étant similaires à ceux de Johnson, on propose de prendre les mêmes paramètres numériques qu'à la section 7.2, soit

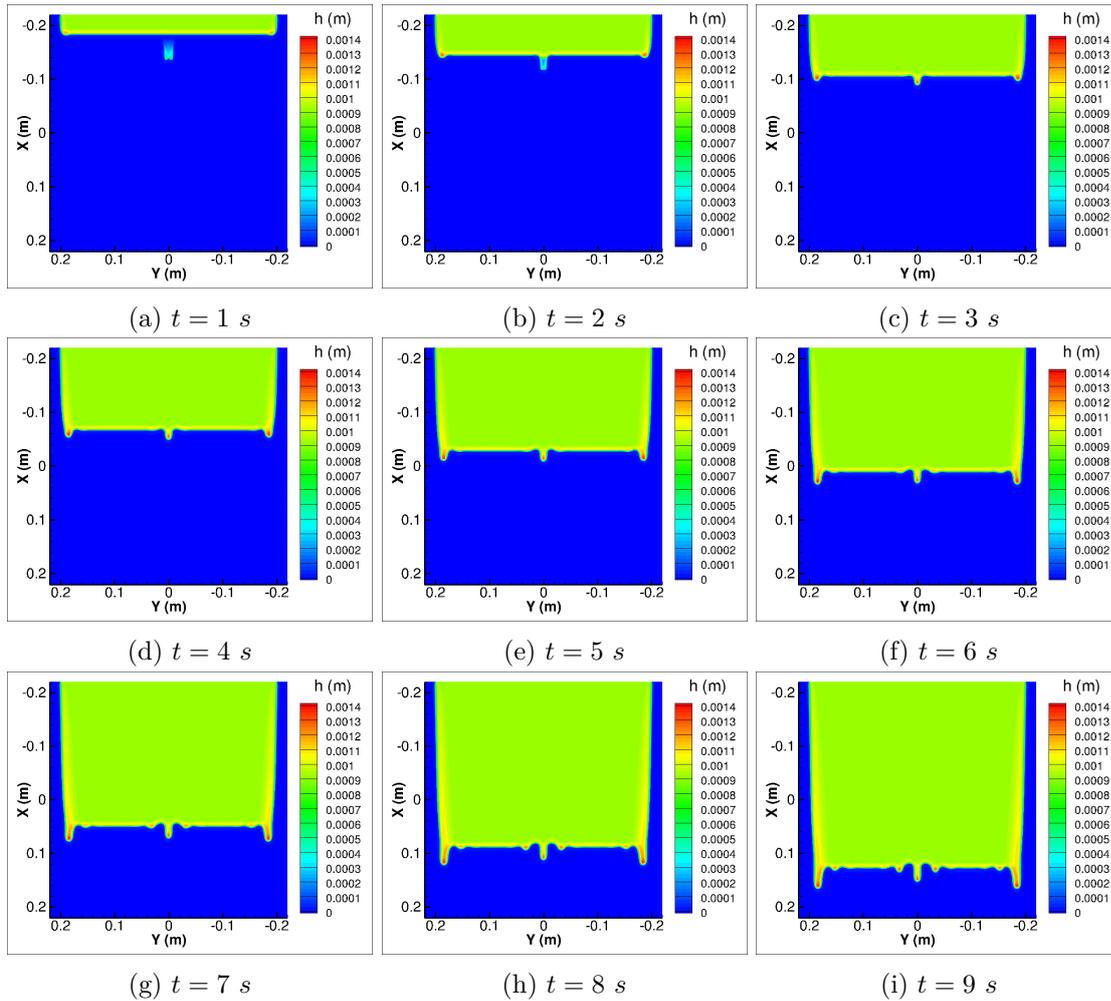
TABLE 7.17 – Récapitulatif des paramètres numériques.

$Re$	$\beta^y$ ( $^\circ$ )	$\tau_i^x$ ( $Pa$ )	$h^{Nu}$ ( $m$ )	$h_* = \frac{h^{Nu}}{10}$ ( $m$ )	$b$ ( $m$ )	$\Delta\Omega$ ( $m$ )	CFL
0.52		7,212	$9,114 \times 10^{-4}$	$9,114 \times 10^{-5}$			
0.26	0	5,725	$7,234 \times 10^{-4}$	$7,234 \times 10^{-5}$	$10^{-8}$	$10^{-3}$	0,1
0.13		4,544	$5,742 \times 10^{-4}$	$5,742 \times 10^{-5}$			

Les simulations correspondant aux trois cas étudiés sont représentées sur les figures ci-dessous. On voit que dans tous les cas, la perturbation (toujours générée par la rencontre entre la ligne triple et une goutte posée initialement sur le substrat) s'amplifie dans le temps et résulte en un arrangement de ruisselets. Bien que nous ne disposons pas d'éléments de comparaisons expérimentaux, les caractéristiques géométriques des ruisselets obtenues par simulation numérique sont données dans le tableau 7.18. L'objectif souhaité de cette étude est donc rempli puisque nous avons pu montrer que la simulation numérique de la transition en ruisselets d'un film cisailé est possible avec le modèle proposé.

TABLE 7.18 – Evolution de l'espacement  $w$  et de la largeur  $d$  des ruisselets en fonction du taux de cisaillement du gaz  $\tau_i^x$  sur un plan horizontal.

$\beta$ ( $^\circ$ )	$\tau_i^x$ (Pa)	$Re$	$d^{num} \times 10^{-3}$ (m)	$w^{num} \times 10^{-3}$ (m)
	7,212	0,52	30,63	16
0	5,725	0.26	26,74	14
	4,544	0.13	23,63	10

FIGURE 7.23 –  $Re = 0,52$ ,  $\beta^y = 0^\circ$ ,  $\tau_i^x = 7,166$  Pa

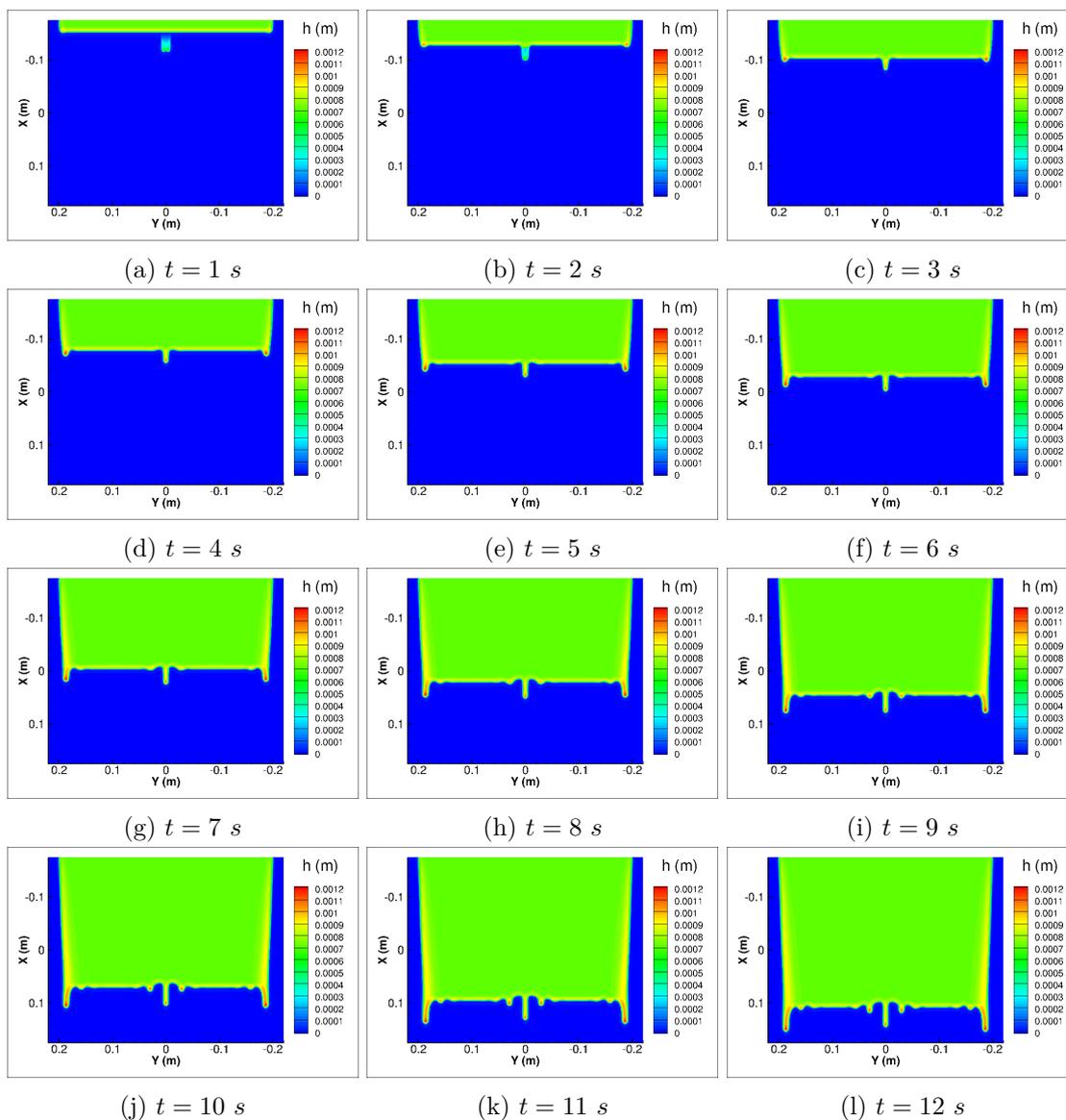


FIGURE 7.24 –  $Re = 0,26$  et  $\beta^y = 0^\circ$ ,  $\tau_i^x = 5,725 \text{ Pa}$

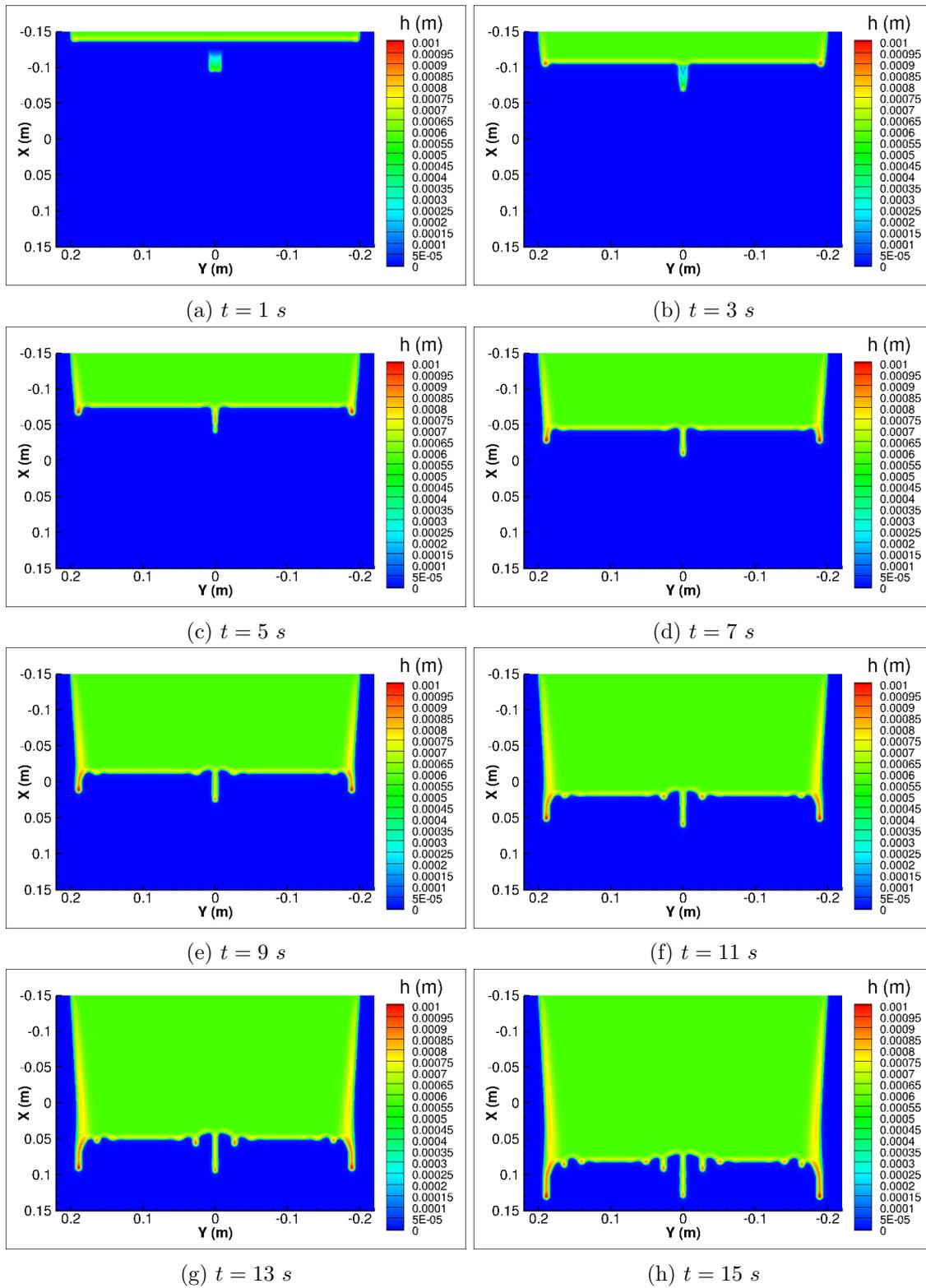


FIGURE 7.25 –  $Re = 0, 13$  et  $\beta^y = 0^\circ$ ,  $\tau_i^x = 4,544 \text{ Pa}$

## 7.5 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté des simulations numériques de film liquide piloté par la gravité ou le cisaillement d'un gaz. À cause des fortes restrictions imposées par la discrétisation spatiale des termes du troisième ordre et la discrétisation explicite en temps du modèle utilisé, nous nous sommes limités à des configurations académiques de film injecté sur un plan incliné rectangulaire. Bien que ces configurations soient simples, elles se sont montrées être suffisantes pour remplir l'objectif principal de l'étude qui est de démontrer que le modèle permet de reproduire qualitativement des situations tridimensionnelles de mouillage (pincement, transition en ruisselets), en particulier sur des cas de films cisailés.

D'un point de vue quantitatif, les simulations de pincements stationnaires sont en très bon accord avec les données expérimentales. Concernant, la reproduction de mécanismes conduisant à la croissance d'instabilités transversales et à la formation de ruisselets, ils semblent seulement différer d'un point de vue temporel pour des raisons de résolution spatiale. Si cette hypothèse (qui nécessite encore d'être confirmée par des études complémentaires) est exacte, alors ce soucis pourrait être corrigé à l'aide d'une discrétisation implicite en temps et le développement d'un maillage dynamique qui se raffine au voisinage de ligne triple [117] afin de garantir que les forces moléculaires soient régularisées à l'échelle du maillage. On peut donc conclure qu'à ce stade du travail, les résultats sont très satisfaisants et encourageants pour des applications futures dans des configurations plus industrielles.

# Conclusion générale et Perspectives

Le but de cette thèse était de développer un nouveau modèle pour la simulation numérique instationnaire de l'étalement d'un film liquide et en particulier des phénomènes de ruissellement. L'enjeu à terme étant d'intégrer ce modèle dans des chaînes de calcul industrielles existantes, le recours à une approche de type DNS traitant de manière détaillée tous les phénomènes physiques quelle que soit leur échelle spatiale (phénomènes moléculaires, capillaires, gravitationnels, visqueux) est impossible. Nous avons donc opté pour des équations intégrales qui, comme leur appellation l'indique, dérivent de l'intégration des équations de Navier-Stokes dans la direction normale à la paroi. Celles-ci sont ensuite réduites en utilisant une approximation "onde longue" en supposant que les variations d'épaisseur du film sont petites devant ses variations longitudinales (longueur d'onde des vagues, longueur d'étalement). Cette hypothèse n'est pas pénalisante en terme de domaine de validité de notre modèle puisque de nombreuses expériences ont confirmé qu'elle est valide dans les régimes d'écoulement des applications visées de films cisailés. L'intérêt principal de ces équations intégrales est qu'elles permettent d'éliminer une variable et rendent possible l'utilisation d'un maillage uniquement surfacique (resp. linéique) pour des application 3D (resp. 2D).

L'objectif principal de ce travail était de proposer un modèle tenant compte de l'ensemble de la physique d'étalement d'un film sans limite de validité en terme de modélisation de la mouillabilité et des phénomènes capillaires. L'effet des interactions entre les molécules du film et de la paroi solide, à l'origine de l'étalement (mouillage) ou de la rétractation (démouillage) d'un film, ont été modélisée via une force linéique dérivant d'une densité surfacique d'énergie (dite de disjonction). Nous avons démontré que si nous ne souhaitons que retrouver l'effet à l'échelle macroscopique des interactions moléculaires, alors l'expression exacte de cette densité d'énergie importe peu tant qu'elle respecte certaines conditions aux limites. D'autre part, elle peut être régularisée jusqu'à des échelles bien plus grande que celles moléculaires tout en conservant le bon comportement macroscopique du film, ce qui permet d'utiliser des maillages millimétriques plutôt que nanométriques. Afin d'aller plus loin que les approches actuelles, nous avons proposé un système à trois équations composé d'un modèle de type Saint Venant à deux équations et d'une équation d'évolution pour le gradient d'épaisseur du film. Ce modèle, formellement équivalent à l'équation de lubrification majoritairement utilisée dans la littérature, à l'avantage de correspondre à un système d'équations différentielles uniquement du seconde ordre en espace, ce qui rend beaucoup plus simple la mise en oeuvre de méthodes numériques de type volume finis adaptées sur des maillages non-structurés pour des applications industrielles.

Afin de valider les choix effectués en terme de modélisation et de méthodes numériques, nous avons commencé par développer un code en dimensions 2. Le schéma est implicite en temps afin de pouvoir simuler des processus de mouillage dans des configurations réalistes, c'est-à-dire des longueurs et des temps d'étalement respectivement de l'ordre du mètre et de plusieurs dizaines de seconde, avec des temps de calcul raisonnables. De nombreuses validations ont été effectuées sur des cas élémentaires et académiques et ont permis de valider la capacité du modèle 2D et du schéma numérique retenu à reproduire avec une précision suffisante les mécanismes physiques (moléculaires, capillaires, gravitationnels, cisaillement) et les régimes d'étalement (inertiel, visqueux) d'un film aussi bien totalement mouillant ( $\theta_s = 0^\circ$ ) que très peu mouillant ( $\theta_s$  proche de  $90^\circ$ ).

L'extension 3D des équations du modèle continu ne lève pas de grosses difficultés et permet d'obtenir un système d'équations conservatif du second ordre en espace adapté à une mise en oeuvre sur des maillages non-structurés généraux. Cependant, le schéma de discrétisation spatial proposé s'est avéré moins évident à généraliser au cas tridimensionnel et est toujours en cours d'étude.

En attendant qu'une solution soit trouvée, un modèle à deux équations, équivalent à celui proposé d'un point de vue continu mais qui est du troisième ordre en espace et discrétisé explicitement en temps, est utilisé. Celui-ci permet de réaliser des premières simulations numériques d'écoulements 3D à condition de se limiter à de faibles pas de temps pour des raisons de stabilité numérique, et à des maillages cartésiens afin de garantir que la discrétisation des opérateurs du troisième ordre soient consistants. Il convient donc de reconnaître que tous les objectifs initiaux n'ont pu être atteints car le modèle ne permet pas, en l'état, de réaliser des simulations sur maillages non-structurés et dans un temps raisonnable.

Bien que les contraintes imposées par le modèle utilisé limitent les cas d'études à des configurations académiques, celles-ci sont tout à fait suffisantes afin de remplir l'objectif le plus important qui est de prouver la faisabilité d'un calcul de transition en ruisselets et de s'assurer du bon comportement qualitatif, voire quantitatif du modèle. Nous avons effectué des simulations tridimensionnelles stationnaires des expériences de Johnson [31] et des expériences réalisées à l'ONERA par Thoraval en nous plaçant dans plusieurs conditions opératoires. Les résultats obtenus peuvent être considérés comme très prometteurs car ils font clairement apparaître la capacité du modèle proposé à retrouver avec bonne précision la forme et l'espacement des ruisselets. Ils ont également démontré les potentialités de l'approche proposée dans la thèse pour la simulation d'applications complexes de films cisailés, même si à ce stade aucune validation quantitative n'a pu être effectuée.

Pour l'avenir, de nombreuses pistes d'améliorations du modèle et de réflexions sur la compréhension des phénomènes pilotant la transition d'un film en ruisselets ont été ouvertes. Premièrement, d'un point de vue numérique, le modèle 3D nécessite encore un certain nombre de développements afin de pouvoir le rendre utilisable dans un contexte industriel. En effet, on rappelle que les simulations numériques 3D ont été réalisées avec un modèle à deux équations, car le modèle initialement proposé à trois équations souffre de difficultés à reproduire des configurations de mouillage, même élémentaires. La raison, expliquée dans les conclusions du chapitre 6, est que la méthode de discrétisation adoptée pour l'équation d'évolution du gradient d'épaisseur du film n'est pas assez précise. Si

cette imprécision peut être corrigée, notamment via l'une des solutions envisagées à la section 6.5.2, alors des calculs sur maillages non-structurés pourraient être testés. Une fois la discrétisation spatiale validée, une discrétisation implicite en temps, éventuellement agrémentée d'une parallélisation du code de calcul devrait être envisagée.

Deuxièmement, d'un point de vue théorique, les résultats de simulations numériques de transition en ruisselets d'un film tombant ouvrent des questionnements sur la nature de la formation des ruisselets. En effet, l'état de l'art du chapitre 2 laisse penser que la transition d'un film en ruisselets semble défendue par de nombreux auteurs comme le résultat d'une instabilité linéaire, soit l'amplification de la longueur d'onde d'une perturbation dans la direction transversale. L'espacement entre les ruisselets, à priori défini par cette longueur d'onde, est fortement dépendant du facteur d'amplification temporel, lui-même fortement dépendant du profil du bourrelet qui se forme au voisinage d'une ligne triple en mouvement. Or, les espacements obtenus par simulations numériques s'accordent étonnamment bien avec ceux de Johnson alors que dans certains cas, le bourrelet est tellement éloigné de sa forme théorique (pour des raisons de résolution de maillage) qu'il induit un décalage de 500% sur le facteur d'amplification linéaire. On est alors en droit de mettre en doute le fait que l'analyse de stabilité puisse expliquer à elle seule la transition en ruisselets.

Enfin, il serait également intéressant de s'intéresser à la modélisation du phénomène d'hystérésis de l'angle de contact et à sa dépendance par rapport aux hétérogénéités et aux rugosités de la paroi. En effet, dans une vision à plus long terme d'intégrer le modèle proposé au sein d'une chaîne complète de calcul de givrage, des gouttes transportées par l'écoulement gazeux vont impacter la paroi étudiée. Afin de pouvoir simuler de manière précise les zones de formations de films par coalescence de gouttes, il faudrait tenir compte des phénomènes d'hystérésis car ils vont influencer le déplacement d'une goutte sur la paroi et peuvent même la maintenir "accrochée" au substrat malgré le cisaillement du gaz. Pour finir, le modèle a été développé en supposant que les propriétés physiques du liquide sont constantes. En conditions réelles sur une paroi chauffée, des expériences ont montré que les propriétés d'un liquide, et en particulier sa tension de surface, peuvent changer de manière non négligeable [124]. De plus, on trouve en annexe F une étude montrant que la valeur de la tension de surface joue un rôle central sur la transition d'un film en ruisselets. Par conséquent, l'effet des transferts thermiques sur les propriétés du film serait intéressant à prendre en compte dans le modèle.



# Bibliographie

- [1] T. Carroll, W. H. McAvoy, The Formation of Ice Upon Airplanes in Flight (1929), [https://ia800501.us.archive.org/11/items/nasa\\_techdoc.19930081134/19930081134.pdf](https://ia800501.us.archive.org/11/items/nasa_techdoc.19930081134/19930081134.pdf).
- [2] L. Benanni, Modélisation bidimensionnelle de systèmes électrothermiques de protection contre le givre, Thèse de doctorat, ISAE, 2014.
- [3] W. Wright, User's Manual for LEWICE Version3.2, NASA (2008).
- [4] K. Al-Khalil , T. Keith, K. de Witt, 5th Symp. Numerical and Physical aspects of Aerodynamic Flows (1992).
- [5] L.G. da Silva , Mattos Silvaes O., Zerbini E., 9th AIAA Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference (2006).
- [6] Benney, D. J., Long waves on liquid films, *J. Math. and Phys.* 45, 150, 1966.
- [7] S.P. Lin, Finite-amplitude stability of a parallel flow with a free surface, *Journal of Fluid Mechanics* 36, 113–126, 1969.
- [8] B. Gjevik, Occurrence of Finite-Amplitude Surface Waves on Falling Liquid Films, *Physics of Fluids* 13, 1918–1925, 1970.
- [9] V.Y. Shkadov, Wave Flow Regimes of a Thin Layer of Viscous Fluid subject to Gravity, *Izv. Akad. Nauk SSSR, Mekh. Zhidk. i Gaza* 2, 1 , 43-51 (1970).
- [10] C. Ruyer-Quil and al., Modeling film flows down inclined planes, *The European Physical Journal B* 6, 2, 277-292, November 1998.
- [11] G. Lavallo, Integral modeling of liquid films sheared by a gas flow, Thèse de doctorat, ONERA, 2014.
- [12] P. Noble, J.-P. Vila, Stability theory for difference approximations of some dispersive shallow water equations and application to thin film flows, *arXiv :1304.3805* (2013).
- [13] P.G. de Gennes, Wetting : Statics and dynamics, *Rev. Mod. Phys.* 57, 827 (1985).
- [14] P.G. de Gennes, X. Hua, P. Levinson, Dynamics of wetting : local contact angles, *J. Fluid Mech.*, 212, p.55-63 (1990).
- [15] P.G. de Gennes, F. Brochard-Wyart, D. Quéré, *Capillarity and Wetting Phenomena : Drops, Bubbles, Pearls, Waves*, Springer, New York (2004).
- [16] O.V. Voïnov, Hydrodynamics of wetting, *Fluid Dyn.*, 11, p.714-721 (1976).
- [17] E.B. Dussan, The moving contact line : the slip boundary condition, *J. Fluid Mech.* 77, 665-684 (1976).
- [18] E.B. Dussan, On the spreading of liquids on solid surfaces : static and dynamic contact lines, *Fluid Mech.* 11, 371-400 (1979).
- [19] D. Bonn, J. Eggers, J. Indekeu, J. Meunier, E. Rolley, Wetting and spreading, *Rev. Mod. Phys.* 81, 739 (2009).

- [20] R. Golestian, E. Raphaël, Roughening transition in a moving contact line, *Phys. Rev. E*, 67, p.031603-1-14 (2003).
- [21] E. Rio, Gouttes, Flaques et Arches sèches : des lignes de contact en présence d'un écoulement, Thèse de doctorat de l'Université Paris 6 (2005).
- [22] N. Le Grand-Piteira, Ruissellement avec effets de mouillage : Gouttes et méandres sur un plan incliné, Thèse de doctorat de l'Université Paris 7 (2006).
- [23] R. Ablett, An investigation of the angle of contact between paraffin wax and water, *Phil. Mag.*, 46, p.244-256 (1923).
- [24] V. Dussan, On the spreading of liquids on solid surfaces : Static and dynamic contact lines, *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 11, p.371-400 (1979).
- [25] E. Chibowski, M. Jurak, Comparison of contact angle hysteresis of different probe liquids on the same solid surface, *Colloid and Polymer Science*, 291(2), 391–399 (2013)
- [26] H.E. Huppert, Flow and instability of a viscous current down a slope, *Nature* 300(5891), 427–9 (1982).
- [27] N. Silvi, E.B. Dussan, The rewetting of an inclined solid surface by a liquid, *Physics of Fluids* 28(1), 5–7 (1985).
- [28] J.M. Jerrett, J.R. de Bruyn, Fingering instability of a gravitationally driven contact line, *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics* 4(2), 234–242 (1992).
- [29] J.R. de Bruyn, Growth of fingers at a driven three-phase contact line. *Physical Review A*, 46(8), R4500, (1992).
- [30] A.M. Cazabat, F. Heslot, P. Carles, S.M. Troian, Hydrodynamic fingering instability of driven wetting films, *Adv. Colloid Interface Sci.* 39,61 (1992)
- [31] M.F.G. Johnson, R.A. Schluter, M.J. Miksis, S.G. Bankoff, Experimental study of rivulet formation on an inclined plate by fluorescent imaging, *J. Fluid Mech.* 394, 339-354 (1999).
- [32] A.K. Njifenju, Flow of drops and liquid films in automobile aerodynamics, Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, (2010).
- [33] G. McAlister, R. Ettema, J. S. Marshall, Wind-Driven Rivulet Breakoff and Droplet Flows in Microgravity and Terrestrial-Gravity Conditions, *Journal of Fluids Engineering* 127(2), 257 (2005).
- [34] R.K. Singh, J.E. Galvin, G.A. Whyatt, X. Sun, Breakup of a liquid rivulet falling over an inclined plate : Identification of a critical Weber number, *Physics of Fluids* 29(5), 052101, (2017).
- [35] J.H. Snoeijer, B. Andreotti, Moving Contact Lines : Scales, Regimes and Transitions, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 45, 269-92 (2013).
- [36] A.N. Frumkin, On the phenomena of wetting and sticking of bubbles, *Zh. Fiz. Khim.* 12, 337 (1938).
- [37] B.V. Deryaguin, *Zh. Fiz. Khim.* 14, 137 (1940).
- [38] B.V. Derjaguin, N.V. Churaev, V.M. Muller, *Surface Forces*, Plenum Press. 13, 35 (1987).
- [39] N.V. Churaev, Wetting films and wetting, *Phys. Appl.* 23, 975-987 (1988).
- [40] N.V. Churaev, V.D. Sobolev, Prediction of contact angles on the basis of the Frumkin-Derjaguin approach, *Advances in Colloid and Interface Science* 61, 1-16 (1995).

- [41] T. Young, An essay on the cohesion of fluids Philos. Trans. R. Soc. Lond. 95, 65 (1805).
- [42] A.T. Jameel, A. Sharma, Morphological phase separation in thin liquid films : II. equilibrium contact angles of nanodrops coexisting with thin films, Journal of Colloid and Interface Science 164(2), 416–427, 36 (1994).
- [43] V.S. Mitlin, N.V. Petviashvili, Nonlinear dynamics of dewetting : kinetically stable structures, Physics Letters A 192(5-6), 323–326, 36 (1994).
- [44] M. Potash, P.C. Wayner, Evaporation from a two-dimensional extended meniscus, Int. J. Heat Mass Transfer , 15(10) :1851–1863 (1972).
- [45] V.M. Starov, Equilibrium and hysteresis contact angles, Adv. Colloid Interface Sci. 39, 147-173 (1992).
- [46] B.V. Toshev, D. Platikanov, Disjoining pressure, contact angles and line tension in free thin liquid films, Adv. Colloid Interface Sci. 39, 157-189 (1992).
- [47] L.W. Schwartz, R.R. Eley, Simulation of Droplet Motion on Low-Energy and Heterogeneous Surfaces, Journal of Colloid and Interface Science 202, 173–188 (1998).
- [48] L.W. Schwartz, D. Roux, J.J. Cooper-White, On the shapes of droplets that are sliding on a vertical wall, Physica D 209, 236-244 (2005).
- [49] K.B. Glasner, Spreading of droplets under the influence of intermolecular forces, Physics of fluids 15, 7 (2003).
- [50] A. Sharma, Relationship of thin film stability and morphology to macroscopic parameters of wetting in the apolar and polar systems, Langmuir 9, 861-869 (1993).
- [51] A. Sharma, R. Khanna, Pattern Formation in Spontaneous Dewetting of Thin Apolar Films, Journal of Colloid and Interface science 195, 42-50 (1997).
- [52] P. Beltrame, E. Knobloch, P. Hanggi, U. Thiele, Rayleigh and depinning instabilities of forces liquid ridges on heterogeneous substrates, Physical Review E 83, 016305 (2011).
- [53] L.M. Pismen, Y. Pomeau, Disjoining potential and spreading of thin liquid layers in the diffuse-interface model coupled to hydrodynamics, Physical Review E 62, 2480 (2000).
- [54] U. Thiele, M. Mertig, W. Pompe, Dewetting of an Evaporating Thin Liquid Film : Heterogeneous Nucleation and Surface Instability, Phys. Rev. Lett. 80, 2869 (1998).
- [55] U. Thiele, M.G. Velarde, K. Neuffer, Y. Pomeau, Film rupture in the diffuse interface model coupled to hydrodynamics, Physical Review 5 64, 031602 (2001).
- [56] U. Thiele, M.G. Velarde, K. Neuffer, Y. Pomeau, On the importance of nucleation solutions for the rupture of thin liquid films, Colloids Surfaces A 206, 135 (2002).
- [57] B. Dai, L. Gary Leal, A. Redondo, Disjoining pressure for nonuniform thin films, Physical Review E 78, 061602 (2008).
- [58] L.M. Hocking, The influence of intermolecular forces on thin fluid layers, Physics of fluids A : Fluid Dynamics 5, 793 (1993).
- [59] H.K. Moffatt, Viscous and resistive eddies near a sharp corner, J. Fluid Mech. 18, 1-17 (1964).
- [60] C. Huh, L.E. Scriven, Hydrodynamical model of steady movement of a liquid/solid/fluid contact line, J. Colloid Interface Sci. 35, 85-101 (1971).

- [61] H.P. Greenspan, On the motion of a small viscous droplet that wets a surface, *Journal of Fluid Mechanics*, 84(01) :125 (1978).
- [62] C.L.M.H. Navier, Mémoire sur les lois du mouvement des fluides, *Mémoire de l'académie royale des sciences de l'institut de France*.VI, 389-440 (1823).
- [63] J.C. Maxwell, On stresses in rarefied gases arising from inequalities of temperature, *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond.* 170, 231-256 (1879).
- [64] A.L. Bertozzi, M.P. Brenner, Linear stability and transient growth in driven contact lines, *Physics of Fluids* 9, 530 (1997).
- [65] M. Roux, Modèles de fronts pour films minces, Thèse de doctorat, INSA Toulouse (2012).
- [66] R.G. Cox, The dynamics of the spreading of liquids on a solid surface. Part 1 : Viscous flows, *J. Fluid Mech.*, 168, p. 169-194 (1986).
- [67] P. De Gennes, X. Hua, P. Levinson, Dynamics of wetting : local contact angles, *J. Fluid Mech.*, 212, p. 55-63 (1990).
- [68] L.H. Tanner, The spreading of silicone oil drops on horizontal surfaces, *J. Phys. D* 12, 1473 (1979).
- [69] T.D. Blake, K.J. Ruschak, Wetting : static and dynamic contact lines, *Liquid Film Coating - Scientific Principles and their Applications*, Éd. Springer, p. 63-97 (1997).
- [70] Y. Pomeau, Représentation de la ligne de contact mobile dans les équations de la mécanique des fluides, *C. R. Acad. Sci., Mécanique des fluides*, 328 (IIb), p. 411-416 (2000).
- [71] A. Zosel, Studies of the wetting kinetics of liquid drops on solid surfaces, *Colloid Polym. Sci.* 271, 680 (1993).
- [72] J.A. Diez, L. Kondic, On the breakup of fluid films of finite and infinite extent, *Physics of Fluids* 19, 072107 (2007).
- [73] H.S. Kheshgi, L.E. Scriven, Dewetting : Nucleation and Growth of dry regions, *Chem. Eng. Sci.* 46, 519 (1991).
- [74] G. Reiter, Dewetting of Thin Polymer Films, *Phys. Rev. Lett.* 68, 75 (1992).
- [75] R. Seemann, K. Jacobs, S. Herminghaus, Dewetting Patterns and Molecular Forces : A Reconciliation, *Phys. Rev. Lett.* 86, 5534 (2001).
- [76] K. Zhang, An experimental investigation on the surface water transport process over an airfoil by using a digital image projection technique, *Exp Fluids* 56, 173 (2015).
- [77] P. Noble, JP Vila, Stability theory for difference approximations of some dispersive shallow water equations and application to thin film flows, *SIAM J. Numer. Anal.*, 52(6), 2770-2791 (2014).
- [78] M.S. Liou, C.J. Steffen, A new flux splitting scheme, *Journal of Computational Physics* 107, 23-39 (1993).
- [79] S.K. Godunov, A finite difference method for the numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics, *Math. Sbornik* 47, 273-295 (1959).
- [80] P.D. Lax, B. Wendroff, Systems of conservation laws, *Communications in Pure and Applied Mathematics* 13, 217-237 (1960).
- [81] P.L. Roe, Approximate Riemann solvers, parameters vectors, and difference schemes, *Journal of Computational Physics* 43, 357-372 (1981).

- [82] P.D. Lax, Hyperbolic systems of conservation laws, II, *Comm. Pure Appl. Math.* 10, pp 537-566 (1957).
- [83] Thomas, L.H. , *Elliptic Problems in Linear Differential Equations over a Network*, Watson Sci. Comput. Lab Report, Columbia University, New York (1949).
- [84] R. Chauvin, *Un modèle unifié pour les phénomènes de givrage en aéronautique et les systèmes de protection thermiques*, Thèse de doctorat, ONERA (2015).
- [85] G. Fortin, *Simulation de l'accrétion de glace sur un obstacle bidimensionnel par la méthode des bissectrices et par la modélisation des ruisselets et des gouttes de surface*, Thèse de doctorat, Université du Québec (2003).
- [86] S.M. Troian, E. Herbolzheimer, S.A. Safran, J.F. Joanny, *Fingering Instabilities of Driven Spreading Films*, *Europhys. Lett.*, 10 (1), 25-30 (1989).
- [87] L. Bertozzi, M.P. Brenner, *Linear stability and transient growth in driven contact lines*, *Physics of Fluids* 9, 530 (1997).
- [88] M. Davis and S.M. Troian, *On a generalized approach to the linear stability of spatially nonuniform thin film flows*, *Physics of Fluids* 15, 5 (2003).
- [89] L. Kondic, *Instabilities in Gravity Driven Flow of Thin Fluid Films*, *SIAM Review* 45, 1, 95-115 (2003).
- [90] R.O. Grigoriev, *Transient growth in driven contact lines*, *Physica D* 209, 105-116 (2005).
- [91] L.W. Schwartz, *Viscous flows down an inclined plane : Instability and finger formation*, *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics* 1(3), 443-445. 9, 48 (1989).
- [92] M.H. Eres, L.W. Schwartz, R.V. Roy *Fingering phenomena for driven coating films*, *Physics of Fluids* 12(6), 1278-1295. 9, 14 (2000).
- [93] L. Kondic, J. Diez, *Pattern formation in the flow of thin films down an incline : Constant flux configuration*, *Physics of Fluids* 13(11), 3168-3184 (2001).
- [94] L. Kondic, J. Diez, *Flow of thin films on patterned surfaces : Controlling the instability*, *Physical Review E* 65(4). 11, 110, 113 (2002).
- [95] L. Kondic, J. Diez, *Instabilities in the flow of thin films on heterogeneous surfaces*, *Physics of Fluids* 16(9), 3341-3360. 9, 11, 14, 76 (2004).
- [96] L. Kondic, J. Diez, *On nontrivial traveling waves in thin film flows including contact lines*, *Physica D : Nonlinear Phenomena* 209(1-4), 135-144. 9, 74 (2005).
- [97] J.S. Marshall, S. Wang, *Contact line fingering and rivulet formation in the presence of surface contamination*, *Computers and Fluids* 34, 664-683 (2005).
- [98] Y. Zhao, J.S. Marshall, *Dynamics of driven liquid films on heterogeneous surfaces*, *J. Fluid Mech.* 559, 355-378 (2006).
- [99] P. L. Kapitza, *Wave flow of a thin viscous fluid layers*, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 18, 1 (1948).
- [100] J. Liu, J. P. Gollub, *Solitary wave dynamics of film flows*, *Physics of Fluids* 6, 5, 1702-1712 (1994).
- [101] T. Nosoko, P. N. Yoshimura, T. Nagata, and K. Oyakawa, *Characteristics of Two-Dimensional Waves on a Falling Liquid Film*, *Chemical Engineering Science* 51, 5, 725-732 (1996).

- [102] S. V. Alekseenko, V. Y. Nakoryakov, and B. G. Pokusaev, Wave Formation on a Vertical Falling Liquid Film, *AIChE Journal* 31, 9, 1446–1460 (1985).
- [103] C. D. Park, T. Nosoko, Three-dimensional wave dynamics on a falling film and associated mass transfer, *AIChE Journal* 49, 11, 2715–2727 (2003).
- [104] T. Nosoko, and A. Miyara, The evolution and subsequent dynamics of waves on a vertically falling liquid film, *Physics of Fluids* 16, 4, 1118–1126 (2004).
- [105] T. B. Benjamin, Wave formation in laminar flow down an inclined plane, *Journal of Fluid Mechanics* 2, 554–574 (1957).
- [106] C. S. Yih, Stability of Liquid Flow down an Inclined Plane, *Physics of Fluids* 6, 3, 321–334 (1963).
- [107] R.O. Grigoriev, Transient growth in driven contact lines, *Physica D* 209, 105–116 (2005).
- [108] J. Burguete, P. Garcia-Navarro, J. Murillo, Friction term discretization and limitation to preserve stability and conservation in the 1D shallow-water model : application to unsteady irrigation and river flow, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 00 :1–6 (2007).
- [109] Q. Liang, F. Marche, Numerical resolution of well-balanced shallow water equations with complex source terms, *Advances in Water Resources* 32, 873–884 (2009).
- [110] E.A. Whalen, A.P. Broeren, M.G Bragg, Characteristics of Runback Ice Accretions and Their Aerodynamic Effects, Federal Aviation Administration (2007). <http://www.tc.faa.gov/its/worldpac/techrpt/ar0716.pdf>
- [111] Y. Coudière, J.P. Vila, P. Villedieu, Convergence rate of a finite volume scheme for a two dimensional convection diffusion problem, *ESAIM : Modélisation mathématique et analyse numérique*, 33, 3, 493–516 (1999).
- [112] U.M. Ascher, S.J. Ruuth, B.T. Wetton, Implicit-explicit methods for time-dependent partial differential equations, *SIAM Journal on Numerical Analysis* 32.3, p.797–823 (1995).
- [113] A.J. Chorin, Numerical solution of the navier-stokes equations, *Math. Comput.* 22 :745–762 (1968).
- [114] A.B. Langdon, On enforcing Gauss’s law in electromagnetic particle-in-cell codes, *Comput. Phys. Commun.* 70, 447–450 (1992).
- [115] K. Zhang, T. Wei, H. Hu, An experimental investigation on the surface water transport process over an airfoil by using a digital image projection technique, *Experiments in Fluids* 56 (2015).
- [116] K. Zhang, H. Hu, An Experimental Investigation on the Dynamic Water Runback Process Over an Airfoil Surface Pertinent to Aircraft Icing Phenomena, American Institute of Aeronautics and Astronautics (2016).
- [117] D.R.J. Slade, Gravity-driven thin liquid films : rivulets and flow dynamics, Thèse de doctorat de l’Université de Leeds, Royaume-Uni (2013).
- [118] Décomposition de Hodge-Helmholtz discrète, Thèse de doctorat, Université de Bordeaux (2014).
- [119] Vivette Girault and Pierre-Arnaud Raviart, Finite element methods for Navier-Stokes equations, Springer-Verlag, New-York (1986).

- [120] F. M. Denaro, On the application of the Helmholtz–Hodge decomposition in projection methods for incompressible flows with general boundary conditions, *Int. J. Numer. Meth. Fluids* 43 :43–69 (2003).
- [121] Jean-Paul Caltagirone, Application de la décomposition de Hodge-Helmholtz discrète aux écoulements incompressibles, hal-01099958 (2015).
- [122] M. Yoon, G. Yoon, C. Min, On Solving the Singular System Arisen from Poisson Equation with Neumann Boundary Condition, *J. Sci. Comput.*, 69 :391-405 (2016).
- [123] M. A. Uh Zapata, F. J. Hernandez-Lopez ; A GPU Parallel Finite Volume Method for a 3D Poisson Equation on Arbitrary Geometries, *International Journal of Combinatorial Optimization Problems and Informatics*, Vol. 9, No. 1 (2018).
- [124] E Mezger, Loi de variation de la tension superficielle avec la température, *J. Phys. Radium* (1946)



# Annexes



## Annexe A

# Estimation des nombres adimensionnés de Reynolds, de Froude et de Weber d'un film liquide fortement cisailé.

On évalue dans cette annexe les nombres adimensionnés de Reynolds, de Froude et de Weber associés aux écoulements de films minces rencontrés dans les applications de givrage aéronautique. La formation d'un film mince sur un profil d'aile peut se décomposer en trois zones schématisées sur la figure A.1 :

- Des gouttelettes (diamètre  $\sim 10 - 50\mu m$ ) transportées par l'écoulement d'air se déposent sur le bord d'attaque du profil d'aile ;
- Ces gouttes vont se déplacer sur le profil sous l'effet des efforts aérodynamiques et coalescer ;
- Un film continu se forme dont l'épaisseur moyenne  $h_o$  et la vitesse moyenne  $u_o$  dépendent du débit massique linéique  $\dot{m}$  de liquide qui s'est déposé sur le profil, et du taux de cisaillement  $\tau_i^x$  de la couche limite gazeuse .

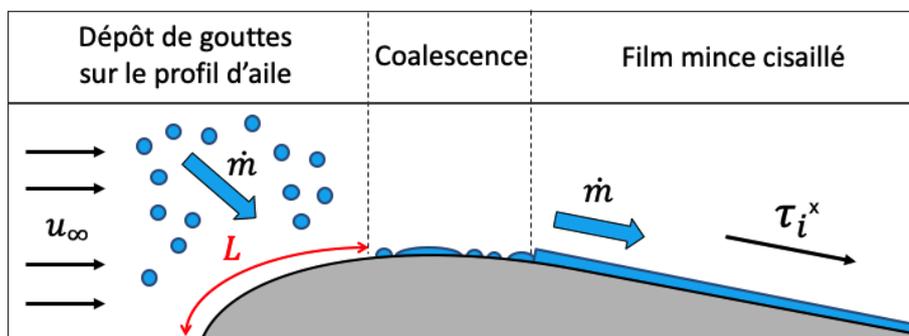


FIGURE A.1 – Représentation simplifiée de la formation d'un film mince sur un profil d'aile aéronautique.

On suppose que le liquide est de l'eau dont les propriétés sont prises à température ambiante, soit

$$\rho = 10^3 \text{ kg.m}^{-3}, \quad \mu = 10^{-3} \text{ Pa.s}, \quad \gamma_{lg} = 7 \times 10^{-2} \text{ N.m}^{-1} \quad (\text{A.1})$$

### Calcul du débit massique

Le débit massique linéique  $\dot{m}$  de liquide se déposant sur la surface peut être évalué à partir de la relation suivante :

$$\dot{m} = \rho u_\infty L \mathcal{K} \quad (\text{A.2})$$

avec  $u_\infty = 80 \text{ m.s}^{-1}$  la vitesse amont de l'écoulement gazeux, que l'on suppose égale à la vitesse d'impact des gouttes,  $L = 0,5 \text{ m}$  la longueur d'impact (voir figure A.1) et  $\mathcal{K} = 0,5$  un taux de captation expérimental [85]. On a alors

$$\dot{m} = 2 \times 10^{-3} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1} \quad (\text{A.3})$$

### Calcul du taux de cisaillement

Le taux de cisaillement  $\tau_i^x$  qu'exerce l'écoulement d'air sur le film liquide s'exprime par

$$\tau_i^x = \frac{1}{2} C_f \rho_g u_\infty^2 \quad (\text{A.4})$$

avec  $C_f$  le coefficient de traînée et  $\rho_g$  la densité du gaz. Dans le cas de nos applications, on a [85]

$$C_f = 3 \times 10^{-3}, \quad \rho_g = 1 \text{ kg.m}^{-3} \quad (\text{A.5})$$

soit un taux de cisaillement estimé à

$$\tau_i^x = 10 \text{ N.m}^{-2} \quad (\text{A.6})$$

### Ordre de grandeur des nombres adimensionnés

En se plaçant dans le cas d'un écoulement stationnaire sur plan incliné (figure A.2), et en négligeant le gradient de pression dans la couche limite gazeuse, l'expression du débit massique linéique  $\dot{m}$  est donnée par celle d'un écoulement de Nusselt, soit

$$\dot{m} = \rho u_o h_o = \frac{h_o^3}{3\mu} \left[ \rho g^x + \frac{3\tau_i^x}{2h_o} \right] \quad (\text{A.7})$$

avec  $g^x$  l'accélération de la gravité projetée sur le plan.

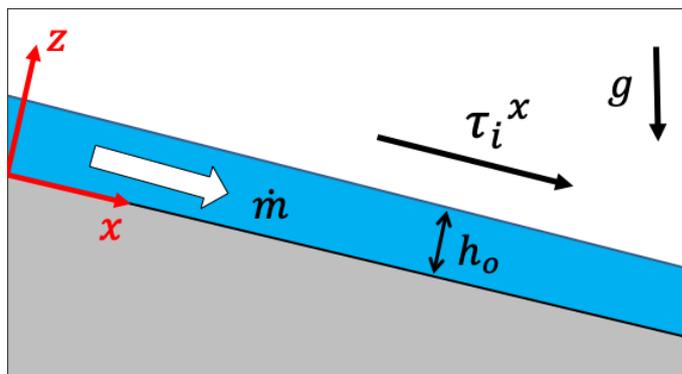


FIGURE A.2 – Représentation de l'écoulement stationnaire d'un film piloté par la gravité et le cisaillement gazeux.

En supposant que la dynamique de l'écoulement est dominée par le cisaillement du gaz (vrai si  $\tau_i^x / (\rho g h_o) \gg 1$ ), l'épaisseur du film vaut

$$h_o = \left( \frac{2 \mu \dot{m}}{\tau_i^x} \right)^{1/2} = 2 \times 10^{-5} \text{ m.} \quad (\text{A.8})$$

et on a  $\tau_i^x / (\rho g h_o) \simeq 50$  justifiant que les forces gravitationnelles sont bien négligeables devant les forces aérodynamiques. La vitesse moyenne vaut alors

$$u_o = \frac{h_o}{2\mu} \tau_i^x = 10^{-1} \text{ m.s}^{-1} \quad (\text{A.9})$$

On en déduit que les nombres de Reynolds de Froude et de Weber ont pour ordre de grandeur

$$Re = \frac{\rho u_o h_o}{\mu} = 2 \quad (\text{A.10a})$$

$$Fr = \frac{u_o^2}{g h_o} = 50 \quad (\text{A.10b})$$

$$We = \frac{\rho u_o^2 h_o}{\gamma_{lg}} = 3 \times 10^{-3} \quad (\text{A.10c})$$

soit des forces capillaires dominantes devant les forces visqueuses et inertiels (qui sont comparables) et des forces gravitationnelles négligeables.



## Annexe B

# Discrétisation temporelle du modèle bi-dimensionnel

### B.1 Justification du choix d'une méthode implicite

#### B.1.1 Présentation et inconvénient de la méthode explicite

La méthode la plus simple pour résoudre le système discrétisé (4.4) consiste à utiliser une méthode d'Euler explicite. On cherche ainsi à résoudre dans chaque cellule  $i$  le problème suivant :

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x} (F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n) = \frac{1}{\Delta x} (B_{i+1/2}^n - B_{i-1/2}^n) + S_i^n \quad (\text{B.1})$$

avec les indices  $n$  et  $n + 1$  qui représentent respectivement une valeur à l'instant  $t^n$  et une valeur à l'instant suivant  $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ , avec  $\Delta t$  le pas de temps. Cette équation se ré-écrit sous forme condensée :

$$\begin{cases} U_i^{n+1} = U_i^n + \Delta t R_i(U_{i-1}^n, U_i^n, U_{i+1}^n) \\ R_i(U_{i-1}^n, U_i^n, U_{i+1}^n) = \frac{- (F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n) + (B_{i+1/2}^n - B_{i-1/2}^n)}{\Delta x} + S_i^n \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

où  $R_i(U_{i-1}^n, U_i^n, U_{i+1}^n)$  est appelé "reste explicite", dans le sens qu'il s'exprime uniquement en fonction des variables connues à l'instant  $t^n$ . Dans chaque cellule  $i$ , l'équation (B.2) n'admet alors qu'une seule inconnue  $U_i^{n+1}$  à l'instant  $t^{n+1}$  qui peut être directement calculée.

Cette méthode est très utilisée dans la littérature mais n'est toutefois pas adaptée à nos applications car elle impose une condition sévère sur le pas de temps  $\Delta t$  pour garantir la stabilité numérique de la simulation. En effet, nous avons montré à la section 3.5.4 que la prise en compte des forces capillaires, qui jouent un rôle essentiel, entraîne une condition de la forme  $\Delta t \sim \Delta x^2$ . Une telle condition rend impossible des simulations de dynamique de mouillage dans un contexte industriel. Par conséquent, une méthode d'Euler implicite est adoptée pour s'affranchir de cette contrainte sur le pas de temps.

### B.1.2 Présentation de la méthode implicite

La méthode d'Euler implicite consiste à résoudre pour chaque cellule  $i$  l'équation suivante :

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x} (F_{i+1/2}^{n+1} - F_{i-1/2}^{n+1}) = \frac{1}{\Delta x} (B_{i+1/2}^{n+1} - B_{i-1/2}^{n+1}) + S_i^{n+1} \quad (\text{B.3})$$

qui est équivalente à :

$$\begin{cases} U_i^{n+1} = U_i^n + \Delta t R_i(U_{i-1}^{n+1}, U_i^{n+1}, U_{i+1}^{n+1}) \\ R_i(U_{i-1}^{n+1}, U_i^{n+1}, U_{i+1}^{n+1}) = \frac{(F_{i-1/2}^{n+1} - F_{i+1/2}^{n+1}) + (B_{i+1/2}^{n+1} - B_{i-1/2}^{n+1})}{\Delta x} + S_i^{n+1} \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

où  $R_i(U_{i-1}^{n+1}, U_i^{n+1}, U_{i+1}^{n+1})$  est appelé "reste implicite", car il s'exprime en fonction des inconnues à l'instant  $t^{n+1}$ . Contrairement, à la méthode explicite, on ne peut pas résoudre (B.4) localement en chaque cellule  $i$ , car nous n'avons qu'une seule équation pour déterminer trois inconnues. Il faut alors résoudre globalement le problème pour toutes les cellules sous la forme d'un système d'équations linéaire.

## B.2 Résolution du système linéaire

### B.2.1 Méthode de Newton

Si on introduit  $\mathcal{X} = {}^t(\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_N) \in \mathbb{R}^{3N}$  une inconnue, résoudre l'équation (B.4) est équivalent à résoudre pour chaque cellule  $i$

$$P_i(\mathbf{X}_{i-1}, \mathbf{X}_i, \mathbf{X}_{i+1}) = \frac{X_i - U_i^n}{\Delta t} - R_i(\mathbf{X}_{i-1}, \mathbf{X}_i, \mathbf{X}_{i+1}) = 0 \quad (\text{B.5})$$

Ainsi, si on introduit également les variables  $\mathcal{U}^n$ ,  $\mathcal{R}$  et  $\mathcal{P} \in \mathbb{R}^{3N}$  suivantes :

$$\mathcal{U}^n = \begin{pmatrix} U_1^n \\ U_2^n \\ \vdots \\ U_N^n \end{pmatrix}, \quad \mathcal{R}(\mathcal{X}) = \begin{pmatrix} R_1 \\ R_2 \\ \vdots \\ R_N \end{pmatrix}, \quad \mathcal{P}(\mathcal{X}) = \begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \\ \vdots \\ P_N \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

On peut écrire le système d'équation linéaire suivant :

$$\mathcal{P}(\mathcal{X}) = \frac{1}{\Delta t} [\mathcal{X} - \mathcal{U}^n] - \mathcal{R}(\mathcal{X}) = 0 \quad (\text{B.7})$$

qui se compose de  $N$  équations pour  $N$  inconnues  $\mathbf{X}_i$ , et peut donc être résolu. On propose d'utiliser une méthode de Newton qui consiste à écrire un développement limité d'ordre 1 en  $\mathcal{U}^n$  de la fonction  $\mathcal{P}(\mathcal{X})$ , soit :

$$\mathcal{P}(\mathcal{X}) = \mathcal{P}(\mathcal{U}^n) + \underline{J_{(\mathcal{X}=\mathcal{U}^n)}} [\mathcal{X} - \mathcal{U}^n] = 0 \quad (\text{B.8})$$

avec  $\underline{\underline{J(\boldsymbol{x}=\boldsymbol{u}^n)}}$  la matrice jacobienne de la fonction  $\mathcal{P}(\boldsymbol{x})$  en  $\boldsymbol{u}^n$  qui s'écrit :

$$\underline{\underline{J(\boldsymbol{x}=\boldsymbol{u}^n)}} = [\nabla \boldsymbol{x} \mathcal{P}]_{(\boldsymbol{x}=\boldsymbol{u}^n)} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{j_{1,1}}} & \underline{\underline{j_{1,2}}} & \cdots & \underline{\underline{j_{1,N}}} \\ \underline{\underline{j_{2,1}}} & \underline{\underline{j_{2,2}}} & \cdots & \underline{\underline{j_{2,N}}} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \underline{\underline{j_{N,1}}} & \underline{\underline{j_{N,2}}} & \cdots & \underline{\underline{j_{N,N}}} \end{bmatrix} \quad (\text{B.9})$$

où chaque bloc matriciel  $\underline{\underline{j_{k,l}}}$  de taille  $[3 \times 3]$  est donné par :

$$\forall k, l \in \llbracket 1; N \rrbracket, \underline{\underline{j_{k,l}}} = [\nabla \boldsymbol{x}_l \boldsymbol{P}_k]_{(\boldsymbol{x}_l=\boldsymbol{u}_l^n)} \quad (\text{B.10})$$

En supposant que la jacobienne  $\underline{\underline{J}}$  est inversible, on obtient finalement l'inconnu  $\boldsymbol{x}$ , et donc  $\boldsymbol{u}^{n+1}$ , via l'équation suivante :

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = \boldsymbol{x} = \boldsymbol{u}^n - \left[ \underline{\underline{J(\boldsymbol{x}=\boldsymbol{u}^n)}} \right]^{-1} \mathcal{P}(\boldsymbol{u}^n) \quad (\text{B.11})$$

qui ne dépend que des variables à l'instant  $t^n$ .

### B.2.2 Méthode de Newton itérative

Soit  $\boldsymbol{u}^{(n+1),1}$  la solution obtenue à partir de la méthode de Newton, il peut arriver que cette solution ne soit pas précise, i.e. qu'elle ne vérifie pas l'équation (B.7), et on a :

$$\mathcal{P}(\boldsymbol{u}^{(n+1),1}) \neq \mathbf{0} \quad (\text{B.12})$$

On évalue alors la précision de cette solution en calculant la norme  $\mathcal{N}$  suivante :

$$\mathcal{N} = \left[ \left\{ \mathcal{P}(\boldsymbol{u}^{(n+1),1}) \mid \mathcal{P}(\boldsymbol{u}^{(n+1),1}) \right\} \right]^{1/2} \quad (\text{B.13})$$

Idéalement, cette norme est nulle si la solution calculée est exacte. Dans notre cas, la solution est approchée et on aura toujours  $\mathcal{N} > 0$ . On définit alors un seuil  $\xi > 0$  tel que si  $\mathcal{N} < \xi$  alors on considère que la solution est suffisamment précise, et si  $\mathcal{N} > \xi$  elle ne l'est pas. Dans ce dernier cas, une solution consiste à itérer la méthode de Newton en utilisant la solution approchée  $\boldsymbol{u}^{(n+1),1}$ . En écrivant un développement limité d'ordre 1 de la fonction  $\mathcal{P}(\boldsymbol{x})$  en  $\boldsymbol{u}^{(n+1),1}$ , on a :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\boldsymbol{u}^{(n+1),1}) + \underline{\underline{J(\boldsymbol{x}=\boldsymbol{u}^{(n+1),1})}} \left[ \boldsymbol{x} - \boldsymbol{u}^{(n+1),1} \right] &= \mathbf{0} \\ \implies \boldsymbol{x} = \boldsymbol{u}^{(n+1),1} - \left[ \underline{\underline{J(\boldsymbol{x}=\boldsymbol{u}^{(n+1),1})}} \right]^{-1} \mathcal{P}(\boldsymbol{u}^{(n+1),1}) \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Et on obtient une nouvelle solution  $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{u}^{(n+1),2}$  dont on évalue la norme  $\mathcal{N}$ . On réitère l'opération jusqu'à ce que la norme  $\mathcal{N}$  de la  $k^{\text{ième}}$  solution  $\boldsymbol{u}^{(n+1),k}$  soit inférieure à  $\xi$ . On garantit ainsi que le système de Saint Venant implicite en temps soit bien résolu.

**Remarque 15**

*L'inconvénient d'une méthode implicite est qu'elle nécessite de calculer et d'inverser un système linéaire à chaque nouveau instant. La discrétisation spatiale que nous avons adoptée correspond à un schéma dit à 3 points. En d'autres termes, une solution d'une cellule  $i$  ne dépend que des solutions des plus proches cellules voisines  $i - 1$  et  $i + 1$ . Par conséquent, la jacobienne  $\underline{\underline{J}}$  est une matrice tridiagonale par bloc, soit*

$$\underline{\underline{J}} = \begin{bmatrix} \underline{\underline{j_{1,1}}} & \underline{\underline{j_{1,2}}} & & 0 \\ \underline{\underline{j_{2,1}}} & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \underline{\underline{j_{N-1,N}}} \\ 0 & & \underline{\underline{j_{N,N-1}}} & \underline{\underline{j_{N,N}}} \end{bmatrix} \quad (\text{B.15})$$

*Le système peut donc être inversé efficacement à chaque itération par un algorithme de Thomas [83] qui est une méthode simplifiée d'élimination de Gauss.*

## Annexe C

# Analyse de stabilité linéaire 3D - Transition en ruisselets

On présente dans cette annexe une analyse de stabilité linéaire d'un film liquide injecté à débit constant sur un plan incliné et avec une couche limite gazeuse au repos. La stabilité du film liquide est étudiée en utilisant l'équation de lubrification (6.9).

### C.1 Etablissement des équations et adimensionnement

On considère un film liquide injecté avec un débit volumique linéique  $\mathbf{q} = {}^t [q_0, 0]$  uniforme dans la direction  $y$  sur un plan incliné d'un angle  $\beta$  par rotation autour de l'axe  $y$ , on a alors :

$$\mathbf{g}_t = \begin{bmatrix} g \sin(\beta) \\ 0 \end{bmatrix}, \quad g^z = g \cos(\beta), \quad \boldsymbol{\tau}_i = \mathbf{0}, \quad \nabla P_g = \mathbf{0} \quad (\text{C.1})$$

Les profils issus de résultats expérimentaux [31] et de simulations numériques [97] montrent que si aucune perturbation n'est imposée au voisinage de la ligne triple, elle avance à vitesse constante  $\mathbf{V} = {}^t [V^x, 0]$  sans développer aucune structure dans la direction  $y$ , comme représenté sur la figure C.1. Le champ d'épaisseur du film se caractérise par un bourrelet près de la ligne triple, un écoulement de Nusselt loin de la ligne, et peut être décrit par  $h(x, y, t) = h_o(\xi)$  avec  $\xi = x - V^x t$ , correspondant à un profil d'onde progressive avançant à vitesse constante  $V^x$ .

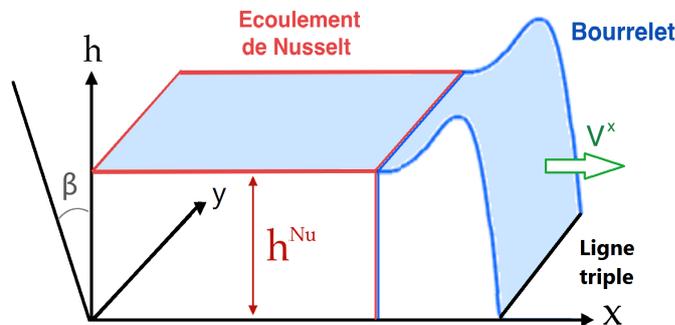


FIGURE C.1 – Représentation d'un film s'écoulant à débit constant uniformément dans la direction transversale  $y$ .

Sous les hypothèses (C.1), et en appliquant les changements de variable

$$\xi = x - V^x t \quad (\text{C.2a})$$

$$\bar{\mathbf{u}}^* = \bar{\mathbf{u}} - \mathbf{V} \quad (\text{C.2b})$$

l'évolution temporelle de l'épaisseur  $h(\xi, y, t)$  du film dans le repère mobile avançant à vitesse constante  $\mathbf{V}$  est donnée par l'équation de lubrification suivante

$$\frac{\partial h}{\partial t} - V^x \frac{\partial h}{\partial \xi} = \left[ \begin{array}{l} \nabla \cdot \left( \frac{h^2(h+b)}{3\mu} \nabla \left[ \begin{array}{l} \gamma l g \nabla \cdot \left[ \frac{-\nabla h}{(1+|\nabla h|^2)^{1/2}} \right] \\ + \rho g \cos(\beta) [h-z] + \left( \frac{\partial e_{disj}}{\partial h} \right) \end{array} \right] \right) \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{h^2(h+b)}{3\mu} \rho g \sin(\beta) \right] \end{array} \right] \quad (\text{C.3})$$

En procédant à un adimensionnement en posant

$$\xi = \tilde{\xi} L_o, \quad y = \tilde{y} L_o, \quad V^x = \tilde{V}^x \bar{u}^{Nu}, \quad t = \tilde{t} t_o \quad (\text{C.4a})$$

$$h = \tilde{h} h^{Nu}, \quad b = \tilde{b} h^{Nu}, \quad e_{disj} = \tilde{e}_{disj} \gamma l g \quad (\text{C.4b})$$

avec

$$\bar{u}^{Nu} = \frac{h^{Nu}(h^{Nu} + b)}{3\mu} \rho g \sin(\beta), \quad t_o = \frac{L_o}{\bar{u}^{Nu}}, \quad L_o = \left[ \frac{h^{Nu} l_c^2}{\sin(\beta)} \right]^{1/3}, \quad l_c = \sqrt{\frac{\gamma l g}{\rho g}} \quad (\text{C.5})$$

L'équation de lubrification décrivant l'évolution de l'épaisseur  $\tilde{h}(\tilde{\xi}, \tilde{y}, \tilde{t})$  d'un film s'écrit :

$$\frac{\partial \tilde{h}}{\partial \tilde{t}} - \tilde{V}^x \frac{\partial \tilde{h}}{\partial \tilde{\xi}} = \frac{1}{1 + \tilde{b}} \left( \begin{array}{l} D_g(\beta) \nabla \cdot \left[ \tilde{h}^2(\tilde{h} + \tilde{b}) \nabla \tilde{h} \right] \\ - \nabla \cdot \left[ \tilde{h}^2(\tilde{h} + \tilde{b}) \nabla \left( \nabla \cdot \left[ \frac{\nabla \tilde{h}}{(1+|\nabla \tilde{h}|^2)^{1/2}} \right] \right) \right] \\ + D_{disj}(\beta) \nabla \cdot \left[ \tilde{h}^2(\tilde{h} + \tilde{b}) \underbrace{\nabla \left( \frac{\partial \tilde{e}_{disj}}{\partial \tilde{h}} \right)}_{= f_d(\tilde{h}) \nabla \tilde{h}} \right] \\ - \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} \left[ \tilde{h}^2(\tilde{h} + \tilde{b}) \right] \end{array} \right) \quad (\text{C.6})$$

où  $D_{disj}(\beta)$ ,  $D_g(\beta)$ ,  $C_a$  et  $f_d(\tilde{h})$  ont pour expression

$$D_{disj}(\beta) = \left( \frac{3 C_a}{1 + \tilde{b}} \right)^{-2/3}, \quad C_a = \frac{\mu \bar{u}^{Nu}}{\gamma l g} \quad (\text{C.7a})$$

$$D_g(\beta) = \left( \frac{3 C_a}{1 + \tilde{b}} \right)^{1/3} \cot(\beta), \quad f_d(\tilde{h}) = \left( \frac{\partial^2 \tilde{e}_{disj}}{\partial \tilde{h}^2} \right) \quad (\text{C.7b})$$

## C.2 Linéarisation du système autour d'un état d'équilibre

Si la ligne triple est perturbée (par des forces extérieures ou des hétérogénéités du substrat), on constate expérimentalement qu'une instabilité transversale à l'écoulement (dans la direction  $\tilde{y}$ ) peut apparaître et le front d'avancement du liquide transitionne en ruisselets, comme représenté sur la figure (C.2).

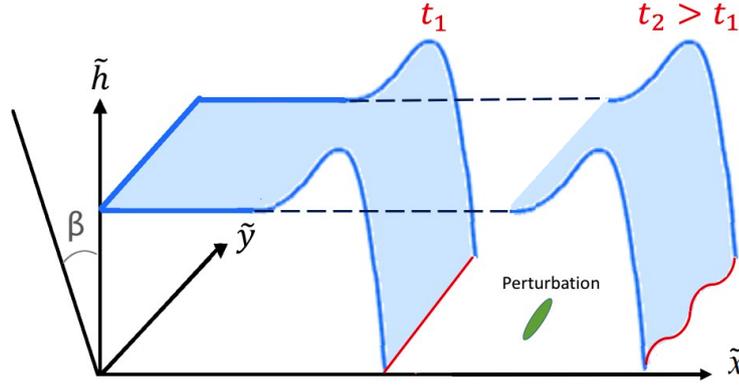


FIGURE C.2 – Représentation de l'apparition d'une instabilité transversale au voisinage du point triple d'un film s'écoulant à débit constant uniformément dans la direction transversale  $\tilde{y}$ .

On étudie alors la stabilité du film liquide en imposant :

$$\tilde{h}(\tilde{\xi}, \tilde{y}, \tilde{t}) = \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \varepsilon \tilde{h}_1(\tilde{\xi}, \tilde{y}, \tilde{t}) \quad (\text{C.8})$$

qui se compose du profil en onde progressive  $\tilde{h}_o(\tilde{\xi})$  auquel on applique une perturbation  $\varepsilon \tilde{h}_1(\tilde{\xi}, \tilde{y}, \tilde{t})$  dans la direction transversale  $\tilde{y}$ , avec  $\varepsilon \ll 1$  l'amplitude infinitésimale de la perturbation. En injectant cette décomposition dans l'équation de lubrification (C.6), en utilisant les développements limités suivant :

$$\tilde{h}^2 = \tilde{h}_o^2(\tilde{\xi}) + \varepsilon \left( 2 \tilde{h}_1 \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) \right) + O(\varepsilon^2) \quad (\text{C.9a})$$

$$f_d(\tilde{h}) = f_d(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) + \left( \frac{\partial f_d}{\partial \tilde{h}} \right)_{(\tilde{h}_o(\tilde{\xi}))} \varepsilon \tilde{h}_1 + O(\varepsilon^2) \quad (\text{C.9b})$$

et en se plaçant dans l'hypothèse "onde longue", soit

$$\nabla \tilde{h} \ll \mathbf{1} \implies \left[ \frac{\nabla \tilde{h}}{(1 + |\nabla \tilde{h}|^2)^{1/2}} \right] \simeq \nabla \tilde{h} \quad (\text{C.10})$$

On obtient le système linéarisé suivant :

$$\left[ \begin{array}{c} -\tilde{V}^x \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} \\ + \varepsilon \left( \frac{\partial \tilde{h}_1}{\partial \tilde{t}} - \tilde{V}^x \frac{\partial \tilde{h}_1}{\partial \tilde{\xi}} \right) \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \frac{1}{1 + \tilde{b}} L_o(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) \\ + \varepsilon \frac{1}{1 + \tilde{b}} L_1(\tilde{h}_o(\tilde{\xi}), \tilde{h}_1) \end{array} \right] + O(\varepsilon^2) \quad (\text{C.11})$$

avec  $L_o$  et  $L_1$  des opérateurs linéaires du quatrième ordre respectivement donnés par :

$$L_o(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) = \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left[ \tilde{h}_o^2(\tilde{\xi}) [\tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \tilde{b}] \left( \begin{array}{l} D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} \\ + D_g(\beta) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} - \frac{\partial^3 \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}^3} - 1 \end{array} \right) \right] \quad (C.12)$$

et par :

$$L_1(\tilde{h}_o(\tilde{\xi}), \tilde{h}_1) = \left[ \begin{array}{l} -\nabla \cdot \left( \begin{array}{l} \tilde{h}_o^2(\tilde{\xi}) [\tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \tilde{b}] \nabla [\nabla \cdot (\nabla \tilde{h}_1)] \\ + 3 \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) [\tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \frac{2}{3} \tilde{b}] \tilde{h}_1 \nabla [\nabla \cdot (\nabla \tilde{h}_o(\tilde{\xi}))] \end{array} \right) \\ + \nabla \cdot \left( \begin{array}{l} D_{disj}(\beta) \left[ \begin{array}{l} \tilde{h}_o^2(\tilde{\xi}) [\tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \tilde{b}] [f_d(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) \nabla \tilde{h}_1] \\ + \tilde{h}_o^2(\tilde{\xi}) [\tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \tilde{b}] \left[ \left( \frac{\partial f_d}{\partial \tilde{h}} \right)_{(\tilde{h}_o(\tilde{\xi}))} \tilde{h}_1 \nabla \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) \right] \end{array} \right] \\ + 3 \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) [\tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \frac{2}{3} \tilde{b}] \tilde{h}_1 f_d(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) \nabla \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) \end{array} \right) \\ + \nabla \cdot \left( \begin{array}{l} D_g(\beta) \left[ \begin{array}{l} \tilde{h}_o^2(\tilde{\xi}) [\tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \tilde{b}] \nabla \tilde{h}_1 \\ + 3 \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) [\tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \frac{2}{3} \tilde{b}] \tilde{h}_1 \nabla \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) \end{array} \right] \\ - \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left( 3 \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) [\tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \frac{2}{3} \tilde{b}] \tilde{h}_1 \right) \end{array} \right) \end{array} \right] \quad (C.13)$$

### C.3 Etude de la solution non-perturbée

#### C.3.1 Equation différentielle du troisième ordre vérifiée par $\tilde{h}_o(\tilde{\xi})$

L'équation (C.11) s'écrit en l'absence de perturbation ( $\tilde{h}_1 = 0$ ) :

$$\tilde{V}^x \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} + \frac{1}{1 + \tilde{b}} L_o(\tilde{h}_o) = 0 \quad (C.14)$$

soit en développant

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left[ \frac{\tilde{h}_o^2(\tilde{\xi}) [\tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \tilde{b}]}{1 + \tilde{b}} \left( \begin{array}{l} -D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} \\ -D_g(\beta) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} + \frac{\partial^3 \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}^3} + 1 \end{array} \right) - \tilde{V}^x \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) \right] = 0 \quad (C.15)$$

En l'intégrant dans la direction  $\tilde{\xi}$ , on obtient :

$$\frac{\tilde{h}_o^2(\tilde{\xi}) [\tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \tilde{b}]}{1 + \tilde{b}} \left( \begin{array}{l} -D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} \\ -D_g(\beta) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} + \frac{\partial^3 \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}^3} + 1 \end{array} \right) - \tilde{V}^x \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) = \tilde{d} \quad (C.16)$$

avec  $\tilde{d}$  une constante d'intégration. Cette équation différentielle du troisième ordre en espace permet de calculer le profil en onde progressive  $\tilde{h}_o(\tilde{\xi})$  uniforme dans la direction  $\tilde{y}$  qu'adopte le film liquide en l'absence de perturbation. Elle admet toutefois deux inconnues de trop ( $\tilde{d}$  et  $\tilde{V}^x$ ) que l'on peut déterminer à partir de conditions aux limites. Loin du point triple ( $\tilde{\xi} \rightarrow -\infty$ ), il se forme un écoulement de Nusselt, l'épaisseur du film est invariante et on a :

$$\lim_{\tilde{\xi} \rightarrow -\infty} \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) = 1, \quad \lim_{\tilde{\xi} \rightarrow -\infty} \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} = 0 \quad (\text{C.17})$$

Au point triple ( $\tilde{\xi} = 0$ ), nous avons vu à la section 3.4.2 que l'interface *liquide/gaz* rencontre le substrat sec avec une pente nulle, soit :

$$\lim_{\tilde{\xi} \rightarrow 0} \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) = 0, \quad \lim_{\tilde{\xi} \rightarrow 0} \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} = 0 \quad (\text{C.18})$$

A partir de ces conditions aux limites, on obtient :

$$\tilde{d} = 0 \quad (\text{C.19a})$$

$$\tilde{V}^x = 1 \quad (\text{C.19b})$$

Le profil  $\tilde{h}_o(\tilde{\xi})$  est donc solution d'une équation différentielle de la forme

$$L_{\tilde{h}_o}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) = 0 \quad (\text{C.20})$$

avec  $L_{\tilde{h}_o}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi}))$  l'opérateur linéaire du troisième ordre suivant :

$$L_{\tilde{h}_o}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) = \frac{\tilde{h}_o^2(\tilde{\xi}) [\tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \tilde{b}]}{1 + \tilde{b}} \left( \begin{array}{c} -D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} \\ -D_g(\beta) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} + \frac{\partial^3 \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}^3} + 1 \end{array} \right) - \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) \quad (\text{C.21})$$

### C.3.2 Equation différentielle du quatrième ordre vérifiée par $\tilde{h}_o(\tilde{\xi})$

Par invariance en translation le long de l'axe  $\tilde{\xi}$ , toute fonction de la forme  $\tilde{h}_o(\tilde{\xi} + \tilde{l})$  vérifie (C.20), soit :

$$L_{\tilde{h}_o}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi} + \tilde{l})) = 0 \quad (\text{C.22})$$

avec  $L_{\tilde{h}_o}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi} + \tilde{l}))$  l'opérateur linéaire qui s'écrit :

$$L_{\tilde{h}_o}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi} + \tilde{l})) = \left[ \begin{array}{c} \frac{\tilde{h}_o^2(\tilde{\xi} + \tilde{l}) [\tilde{h}_o(\tilde{\xi} + \tilde{l}) + \tilde{b}]}{1 + \tilde{b}} \left( \begin{array}{c} -D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o(\tilde{\xi} + \tilde{l})) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi} + \tilde{l})}{\partial \tilde{\xi}} \\ -D_g(\beta) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi} + \tilde{l})}{\partial \tilde{\xi}} \\ + \frac{\partial^3 \tilde{h}_o(\tilde{\xi} + \tilde{l})}{\partial \tilde{\xi}^3} + 1 \end{array} \right) \\ -\tilde{h}_o(\tilde{\xi} + \tilde{l}) \end{array} \right] \quad (\text{C.23})$$

Dans la limite  $\tilde{l} \ll 1$ , on peut écrire les développements :

$$\tilde{h}_o(\tilde{\xi} + \tilde{l}) = \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \tilde{l} \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} + O(\tilde{l}^2) \quad (\text{C.24a})$$

$$\tilde{h}_o^2(\tilde{\xi} + \tilde{l}) = \tilde{h}_o^2(\tilde{\xi}) + 2 \tilde{l} \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} + O(\tilde{l}^2) \quad (\text{C.24b})$$

$$\tilde{h}_o^3(\tilde{\xi} + \tilde{l}) = \tilde{h}_o^3(\tilde{\xi}) + 3 \tilde{l} \tilde{h}_o^2(\tilde{\xi}) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} + O(\tilde{l}^2) \quad (\text{C.24c})$$

$$f_d(\tilde{h}_o(\tilde{\xi} + \tilde{l})) = f_d(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) + \left( \frac{\partial f_d}{\partial \tilde{h}} \right)_{(\tilde{h}_o(\tilde{\xi}))} \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} \tilde{l} + O(\tilde{l}^2) \quad (\text{C.24d})$$

Et l'équation (C.23) s'écrit sous la forme du développement limité en  $\tilde{l}$  suivant :

$$L_{\tilde{h}_o}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) + \tilde{l} L_{\tilde{h}_o, \tilde{l}}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) + O(\tilde{l}^2) = 0 \quad (\text{C.25})$$

Puisque  $L_{\tilde{h}_o}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) = 0$  d'après (C.20), on a à l'ordre 1 en  $\tilde{l}$  :

$$L_{\tilde{h}_o, \tilde{l}}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) \simeq 0 \quad (\text{C.26})$$

avec  $L_{\tilde{h}_o, \tilde{l}}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi}))$  l'opérateur linéaire du quatrième ordre suivant :

$$L_{\tilde{h}_o, \tilde{l}}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) = \left[ \begin{array}{l} \frac{3 \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) \left[ \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \frac{2\tilde{b}}{3} \right]}{1 + \tilde{b}} \left( \begin{array}{l} -D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} \\ -D_g(\beta) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} \\ + \frac{\partial^3 \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}^3} + 1 \end{array} \right) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} \\ + \frac{\tilde{h}_o^2(\tilde{\xi}) \left[ \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \tilde{b} \right]}{1 + \tilde{b}} \left( \begin{array}{l} -D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) \frac{\partial^2 \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}^2} \\ -D_{disj}(\beta) \left( \frac{\partial f_d}{\partial \tilde{h}} \right)_{(\tilde{h}_o(\tilde{\xi}))} \left( \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} \right)^2 \\ -D_g(\beta) \frac{\partial^2 \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}^2} + \frac{\partial^4 \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}^4} \end{array} \right) \\ - \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} \end{array} \right] \quad (\text{C.27})$$

que l'on peut simplifier en utilisant la relation (C.20)

$$L_{\tilde{h}_o, \tilde{l}}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) = \left[ \begin{array}{l} \frac{\tilde{h}_o^2(\tilde{\xi}) \left[ \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \tilde{b} \right]}{1 + \tilde{b}} \left( \begin{array}{l} -D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) \frac{\partial^2 \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}^2} \\ -D_{disj}(\beta) \left( \frac{\partial f_d}{\partial \tilde{h}} \right)_{(\tilde{h}_o(\tilde{\xi}))} \left( \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} \right)^2 \\ -D_g(\beta) \frac{\partial^2 \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}^2} + \frac{\partial^4 \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}^4} \end{array} \right) \\ + \left( \frac{2 \tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \tilde{b}}{\tilde{h}_o(\tilde{\xi}) + \tilde{b}} \right) \frac{\partial \tilde{h}_o(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} \end{array} \right] \quad (\text{C.28})$$

Nous reviendrons sur l'utilité de la relation (C.28) au paragraphe C. Afin d'alléger la notation, on écrira à présent  $\tilde{h}_o(\tilde{\xi}) = \tilde{h}_o$ .

## C.4 Relation de dispersion

En utilisant le résultat (C.14) du paragraphe précédent, l'équation (C.11) s'écrit :

$$\frac{\partial \tilde{h}_1}{\partial \tilde{t}} = \frac{1}{1 + \tilde{b}} \left[ \begin{array}{l} -\nabla \cdot \left( \tilde{h}_o^2(\tilde{h}_o + \tilde{b}) \nabla \left[ \nabla \cdot (\nabla \tilde{h}_1) \right] \right. \\ \left. + 3 \tilde{h}_o \left[ \tilde{h}_o + \frac{2}{3} \tilde{b} \right] \tilde{h}_1 \nabla \left[ \nabla \cdot (\nabla \tilde{h}_o) \right] \right) \\ + \nabla \cdot \left( D_{disj}(\beta) \left[ \begin{array}{l} \tilde{h}_o^2(\tilde{h}_o + \tilde{b}) \left[ f_d(\tilde{h}_o) \nabla \tilde{h}_1 \right] \\ + \tilde{h}_o^2(\tilde{h}_o + \tilde{b}) \left[ \left( \frac{\partial f_d}{\partial \tilde{h}} \right)_{(\tilde{h}_o)} \tilde{h}_1 \nabla \tilde{h}_o \right] \right] \right. \\ \left. + 3 \tilde{h}_o \left[ \tilde{h}_o + \frac{2}{3} \tilde{b} \right] \tilde{h}_1 f_d(\tilde{h}_o) \nabla \tilde{h}_o \right) \\ + \nabla \cdot \left( D_g(\beta) \left[ \begin{array}{l} \tilde{h}_o^2(\tilde{h}_o + \tilde{b}) \nabla \tilde{h}_1 \\ + 3 \tilde{h}_o \left[ \tilde{h}_o + \frac{2}{3} \tilde{b} \right] \tilde{h}_1 \nabla \tilde{h}_o \right] \right) \\ - \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left( 3 \tilde{h}_o \left[ \tilde{h}_o + \frac{2}{3} \tilde{b} \right] \tilde{h}_1 \right) + [1 + \tilde{b}] \frac{\partial \tilde{h}_1}{\partial \tilde{\xi}} \end{array} \right) \quad (C.29)$$

Afin de pouvoir étudier la stabilité du film en réponse à une perturbation dans la direction  $\tilde{y}$ , on adopte la décomposition suivante :

$$\tilde{h}_1(\tilde{\xi}, \tilde{y}, \tilde{t}) = \varphi(\tilde{\xi}) e^{i[k\tilde{y} - \tilde{\omega}\tilde{t}]} \quad (C.30)$$

avec  $\tilde{k} = 2\pi/\tilde{\lambda}$  le nombre d'onde (adimensionné par  $1/h^{Nu}$ ) de la perturbation,  $\tilde{\lambda}$  sa longueur d'onde, et  $\tilde{\omega}$  le facteur d'amplification temporel (adimensionné par  $1/t_o$ ) qui se compose d'une partie réelle et imaginaire, soit :

$$\tilde{\omega} = \tilde{\omega}_r + i \tilde{\omega}_i \quad (C.31)$$

En injectant cette décomposition dans (C.29) et en utilisant l'équation différentielle du troisième ordre (C.20) vérifiée par  $\tilde{h}_o(\tilde{\xi})$  pour effectuer des simplifications, on obtient :

$$\tilde{\omega}_r = 0 \quad (C.32a)$$

$$\tilde{\omega}_i \varphi(\tilde{\xi}) = \frac{1}{1 + \tilde{b}} L_\varphi(\varphi(\tilde{\xi})) \quad (C.32b)$$

avec  $L_\varphi(\varphi(\tilde{\xi}))$  un opérateur linéaire du quatrième ordre donné par

$$L_\varphi(\varphi(\tilde{\xi})) = \left[ \begin{array}{l} -\tilde{h}_o^2 [\tilde{h}_o + \tilde{b}] \left( \frac{\partial^4 \varphi(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}^4} \right) \\ -\frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left( \tilde{h}_o^2 [\tilde{h}_o + \tilde{b}] \right) \left( \frac{\partial^3 \varphi(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}^3} \right) \\ +\tilde{h}_o^2 [\tilde{h}_o + \tilde{b}] \left( \begin{array}{l} D_g(\beta) + 2 \tilde{k}^2 \\ + D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o) \end{array} \right) \left( \frac{\partial^2 \varphi(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}^2} \right) \\ + \left( \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left( \tilde{h}_o^2 [\tilde{h}_o + \tilde{b}] \right) \left( D_g(\beta) + \tilde{k}^2 + D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o) \right) \\ + 2 \tilde{h}_o^2 [\tilde{h}_o + \tilde{b}] \left( D_{disj}(\beta) \left( \frac{\partial f_d}{\partial \tilde{h}} \right)_{(\tilde{h}_o)} \left( \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} \right) \right) \\ - [1 + \tilde{b}] \left( \frac{2 \tilde{h}_o + \tilde{b}}{\tilde{h}_o + \tilde{b}} \right) \end{array} \right) \left( \frac{\partial \varphi(\tilde{\xi})}{\partial \tilde{\xi}} \right) \\ + \left( \begin{array}{l} -\tilde{h}_o^2 [\tilde{h}_o + \tilde{b}] \left( D_g(\beta) + \tilde{k}^2 + D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o) \right) \tilde{k}^2 \\ + \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left( \tilde{h}_o^2 [\tilde{h}_o + \tilde{b}] D_{disj}(\beta) \left( \frac{\partial f_d}{\partial \tilde{h}} \right)_{(\tilde{h}_o)} \left( \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} \right) \right) \\ - [1 + \tilde{b}] \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left( \frac{2 \tilde{h}_o + \tilde{b}}{\tilde{h}_o + \tilde{b}} \right) \end{array} \right) \varphi(\tilde{\xi}) \end{array} \right] \quad (C.33)$$

L'équation (C.32b) est un problème aux valeurs propres qui est généralement résolu numériquement [97, 107] pour chaque nombre d'onde  $k$ . Il nécessite de connaître le profil non-perturbé en onde progressive  $h_o(\xi)$  que l'on peut obtenir soit par simulation numérique 2D, soit par résolution de l'équation (C.21).

## C.5 Résolution analytique

Toutefois, il est possible d'obtenir une expression analytique du facteur d'amplification temporel  $\tilde{\omega}_i$  en se plaçant dans la limites des grandes longueurs d'onde, soit  $\tilde{k} \ll 1$ . Puisque l'opérateur  $L_\varphi(\varphi(\tilde{\xi}))$  a la forme d'un développement limité en puissance de  $\tilde{k}^2$ , on propose de chercher une expression de  $\tilde{\omega}_i$  et de  $\varphi(\tilde{\xi})$  sous la même forme, soit

$$\tilde{\omega}_i = (\tilde{\omega}_i)_o + \tilde{k}^2 (\tilde{\omega}_i)_1 + O(\tilde{k}^4) \quad (C.34a)$$

$$\varphi(\tilde{\xi}) = \varphi_o(\tilde{\xi}) + \tilde{k}^2 \varphi_1(\tilde{\xi}) + O(\tilde{k}^4) \quad (C.34b)$$

que nous allons injecter dans l'équation (C.32b), puis résoudre par analyse dimensionnelle. Nous utiliserons également les conditions aux limites :

$$\lim_{\tilde{\xi} \rightarrow -\infty} \varphi(\tilde{\xi}) = 0, \quad \lim_{\tilde{\xi} \rightarrow -\infty} \frac{\partial \varphi}{\partial \tilde{\xi}} = 0 \quad (C.35)$$

pour retrouver un écoulement de Nusselt non-perturbé loin du point triple, et les conditions

$$\lim_{\tilde{\xi} \rightarrow 0} \varphi(\tilde{\xi}) = 0, \quad \lim_{\tilde{\xi} \rightarrow 0} \frac{\partial \varphi}{\partial \tilde{\xi}} = 0 \quad (C.36)$$

pour que l'amplitude de la perturbation reste petite lorsque l'épaisseur du film tend vers 0 au point triple.

**C.5.1 Détermination de  $(\tilde{\omega}_i)_o$  et  $\varphi_o(\tilde{\xi})$** 

En utilisant le développement limité (C.34a), l'équation (C.32b) s'écrit à l'ordre 0 en  $\tilde{k}$  :

$$(\tilde{\omega}_i)_o \varphi_o(\tilde{\xi}) = \frac{1}{1+\tilde{b}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left[ \begin{array}{l} -\tilde{h}_o^2 [\tilde{h}_o + \tilde{b}] \left( \frac{\partial^3 \varphi_o}{\partial \tilde{\xi}^3} \right) \\ + \tilde{h}_o^2 [\tilde{h}_o + \tilde{b}] \left( D_g(\beta) + D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o) \right) \left( \frac{\partial \varphi_o}{\partial \tilde{\xi}} \right) \\ + \left( \tilde{h}_o^2 [\tilde{h}_o + \tilde{b}] D_{disj}(\beta) \left( \frac{\partial f_d}{\partial \tilde{h}} \right)_{(\tilde{h}_o)} \left( \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} \right) \right) \varphi_o(\tilde{\xi}) \\ - [1 + \tilde{b}] \left( \frac{2 \tilde{h}_o + \tilde{b}}{\tilde{h}_o + \tilde{b}} \right) \end{array} \right] \quad (C.37)$$

En posant  $\varphi_o(\tilde{\xi}) = \left( \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} \right)$ , on remarque que l'équation (C.37) s'écrit

$$(\tilde{\omega}_i)_o \left( \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} \right) = L_{\tilde{h}_o, \tilde{l}}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) \quad (C.38)$$

avec  $L_{\tilde{h}_o, \tilde{l}}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi}))$  l'opérateur (C.28) qui vérifie

$$L_{\tilde{h}_o, \tilde{l}}(\tilde{h}_o(\tilde{\xi})) = 0 \quad (C.39)$$

Nous avons donc trouver une solution particulière de (C.37) qui est :

$$(\tilde{\omega}_i)_o = 0 \quad (C.40a)$$

$$\varphi_o(\tilde{\xi}) = \left( \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} \right) \quad (C.40b)$$

**C.5.2 Détermination de  $(\tilde{\omega}_i)_1$** 

En utilisant le résultat (C.40), l'équation (C.32b) s'écrit à l'ordre 2 en  $\tilde{k}$  :

$$(\tilde{\omega}_i)_1 \left( \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} \right) = \frac{1}{1+\tilde{b}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}} \left[ \begin{array}{l} \tilde{h}_o^2 [\tilde{h}_o + \tilde{b}] \left( D_g(\beta) + D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o) \right) \left( \frac{\partial \varphi_1}{\partial \tilde{\xi}} \right) \\ - \tilde{h}_o^2 [\tilde{h}_o + \tilde{b}] \left( \frac{\partial^3 \varphi_1}{\partial \tilde{\xi}^3} \right) \\ + \tilde{h}_o^2 [\tilde{h}_o + \tilde{b}] D_{disj}(\beta) \left( \frac{\partial f_d}{\partial \tilde{h}} \right)_{(\tilde{h}_o)} \left( \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} \right) \varphi_1(\tilde{\xi}) \\ - [1 + \tilde{b}] \left( \frac{2 \tilde{h}_o + \tilde{b}}{\tilde{h}_o + \tilde{b}} \right) \varphi_1(\tilde{\xi}) \\ + \tilde{h}_o^2 [\tilde{h}_o + \tilde{b}] \left[ \left( \frac{\partial^3 \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}^3} \right) - \left( D_g(\beta) + D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o) \right) \left( \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} \right) \right] \end{array} \right] \quad (C.41)$$

En intégrant cette dernière équation dans la direction  $\tilde{\xi}$  et en utilisant les conditions aux limites :

$$\lim_{\tilde{\xi} \rightarrow -\infty} \varphi_1(\tilde{\xi}) = 0, \quad \lim_{\tilde{\xi} \rightarrow -\infty} \frac{\partial \varphi_1}{\partial \tilde{\xi}} = 0, \quad \lim_{\tilde{\xi} \rightarrow 0} \varphi_1(\tilde{\xi}) = 0, \quad \lim_{\tilde{\xi} \rightarrow 0} \frac{\partial \varphi_1}{\partial \tilde{\xi}} = 0 \quad (C.42)$$

On obtient :

$$(\tilde{\omega}_i)_1 \int_{-\infty}^0 \left( \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} \right) d\tilde{\xi} = \int_{-\infty}^0 \left( \tilde{h}_o^2 [\tilde{h}_o + \tilde{b}] \left[ \begin{array}{c} \left( \frac{\partial^3 \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}^3} \right) - D_g(\beta) \left( \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} \right) \\ - D_{disj}(\beta) f_d(\tilde{h}_o) \left( \frac{\partial \tilde{h}_o}{\partial \tilde{\xi}} \right) \end{array} \right] \right) d\tilde{\xi} \quad (\text{C.43})$$

qui se ré-écrit en utilisant (C.20)

$$(\tilde{\omega}_i)_1 = \int_{-\infty}^0 \left( \tilde{h}_o [\tilde{h}_o - 1] [1 + \tilde{h}_o + \tilde{b}] \right) d\tilde{\xi} \quad (\text{C.44})$$

## Annexe D

# Décomposition de Hodge

On présente dans cette annexe la méthode de projection, reposant sur le théorème de Hodge-HelmHoltz [119], que nous souhaitons appliquer à la variable conservative  $\mathbf{p}$  calculée par l'équation de transport (6.92b).

### D.1 Décomposition d'un champ de vecteur bidimensionnel

Les résultats de simulations numérique ont permis de conclure que bien que cette variable soit initialisée dans chaque cellule  $\Omega_i$  du domaine par  $\mathbf{p}_i^n = (\nabla h)_i^n$  et vérifie donc

$$[\mathit{curl}(\mathbf{p})]_i^n = 0 \quad (\text{D.1})$$

avec  $[\mathit{curl}(\mathbf{p})]_i$  le rotationnel discret défini à la section 6.3.2, la variable  $\mathbf{p}_i^{n+1}$  obtenue à l'instant suivant via le système d'équation discrétisé n'est plus un gradient car

$$[\mathit{curl}(\mathbf{p})]_i^{n+1} \neq 0 \quad (\text{D.2})$$

ce qui pose un problème car la formulation conservative (6.31) des forces capillaires dans le bilan intégral de quantité de mouvement n'est valable que si la variable  $\mathbf{p}_i^{n+1}$  est un gradient afin d'être consistante avec sa formulation non-conservative. Par conséquent, si elle ne vérifie plus cette propriété au niveau discret, les termes capillaires qui en dépendent sont mal modélisés. La méthode envisagée afin de corriger ce problème consiste à utiliser le théorème de Hodge-HelmHoltz énonçant que tout champ de vecteur bidimensionnel peut se décomposer de manière unique en un champ irrotationnel et un champ à divergence nulle. En appliquant cette décomposition à la variable  $\mathbf{p}_i^{n+1}$ , on a

$$\mathbf{p}_i^{n+1} = (\mathbf{p}^r)_i + (\mathbf{p}^d)_i \quad (\text{D.3})$$

tel que les champs  $(\mathbf{p}^r)_i$  et  $(\mathbf{p}^d)_i$  vérifient

$$[\mathit{curl}(\mathbf{p}^r)]_i = 0 \quad (\text{D.4a})$$

$$\left[ \nabla \cdot (\mathbf{p}^d) \right]_i = 0 \quad (\text{D.4b})$$

et peuvent donc également s'écrire sous la forme

$$(\mathbf{p}^r)_i = (\nabla \varphi^r)_i = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial \varphi^r}{\partial x}\right)_i \\ \left(\frac{\partial \varphi^r}{\partial y}\right)_i \end{pmatrix} \quad (\text{D.5a})$$

$$(\mathbf{p}^d)_i = (\nabla^\perp \varphi^d)_i = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial \varphi^d}{\partial y}\right)_i \\ -\left(\frac{\partial \varphi^d}{\partial x}\right)_i \end{pmatrix} \quad (\text{D.5b})$$

avec  $\varphi^r$  et  $\varphi^d$  des champs scalaires continus et dérivables. Dans le cas où la variable  $\mathbf{p}_i^{n+1}$  obtenue par résolution de l'équation de transport est un gradient, on a  $(\mathbf{p}^d)_i = \mathbf{0}$ .

## D.2 Projection sur un champ à rotationnel nul

Puisque nous avons constaté que  $\mathbf{p}_i^{n+1}$  n'est pas un gradient, i.e. puisque  $(\mathbf{p}^d)_i \neq \mathbf{0}$ , la méthode de projection consiste à déterminer puis soustraire  $(\mathbf{p}^d)_i$  pour ne garder que la partie irrotationnelle  $(\mathbf{p}^r)_i$ . En utilisant la décomposition (D.3) et les expressions (D.5), le rotationnel de  $\mathbf{p}_i^{n+1}$  vaut :

$$\begin{aligned} \underbrace{[\text{curl}(\mathbf{p}^r)]_i}_{=0} + [\text{curl}(\mathbf{p}^d)]_i &= [\text{curl}(\mathbf{p})]_i^{n+1} \\ \implies [\text{curl}(\nabla^\perp \varphi^d)]_i &= [\text{curl}(\mathbf{p})]_i^{n+1} \\ \implies [\nabla \cdot (\nabla \varphi^d)]_i &= -[\text{curl}(\mathbf{p})]_i^{n+1} \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

avec  $[\nabla \cdot (\nabla *)]$  l'opérateur laplacien. Il est donc possible de déterminer pour chaque cellule  $\Omega_i$  du domaine, le scalaire  $(\varphi^d)_i$ , et donc la composante rotationnelle  $(\mathbf{p}^d)_i = (\nabla^\perp \varphi^d)_i$ , en résolvant une équation de Poisson dont la littérature sur le sujet est très dense [120, 121, 122, 123]. L'unicité de la solution est définie par les conditions aux limites aux bords du domaines sur  $\varphi^d$ .

## D.3 Conditions aux limites

La condition aux limites que doit vérifier  $\varphi^d$  s'obtient en généralisant la relation (D.6) à l'ensemble du domaine physique  $\Omega$ , soit :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} [\nabla \cdot (\nabla \varphi^d)] \, d\Omega &= - \int_{\Omega} \underbrace{[\text{curl}(\mathbf{p})]}_{=\nabla \cdot (\mathbf{p}^\perp)} \, d\Omega \\ \implies \int_{\partial\Omega} \{ \nabla \varphi^d \mid \mathbf{n} \} \, d\Gamma &= - \int_{\partial\Omega} \{ \mathbf{p}^\perp \mid \mathbf{n} \} \, d\Gamma \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

aussi appelée "relation de compatibilité".

## Annexe E

# Influence du rayon d'action $h_*$ et de la résolution $\Delta_\Omega$ du maillage sur le pincement d'un film tombant

On s'intéresse à l'influence du rayon d'action  $h_*$  et de la résolution du maillage  $\Delta_\Omega$  sur la simulation numérique du pincement stationnaire d'un film tombant étudiée à la section 7.1.2. Les conditions expérimentales d'injection du liquide ainsi que ses propriétés sont rappelées dans les tableaux suivants

TABLE E.1 – Conditions d'injection

$Q$ ( $m^3.s^{-1}$ )	$l^{fente}$ (m)	$q = \frac{Q}{l^{fente}}$ ( $m^2.s^{-1}$ )	$h^{fente}$ (m)	$\bar{u}^{fente} = \frac{q}{h^{fente}}$ ( $m.s^{-1}$ )
$8 \times 10^{-6}$	$4 \times 10^{-2}$	$2 \times 10^{-4}$	$3 \times 10^{-4}$	$6,67 \times 10^{-1}$

TABLE E.2 – Propriétés à température ambiante du liquide étudié.

Liquide	$\rho$ ( $kg.m^{-3}$ )	$\mu$ ( $Pa.s$ )	$\gamma_{lg}$ ( $N.m$ )	$\theta_s$
Eau	998	$10^{-3}$	$7,3 \times 10^{-2}$	$68 \pm 7^\circ$

### E.1 Influence de $h_*$ sur les instabilités spinodales

On cherche à déterminer à partir de quelle valeur de  $h_*$  des instabilités spinodales peuvent apparaître. Ces instabilités, qui ne sont censées exister qu'à des épaisseurs de films proches du nanomètre, peuvent à tort exister à des épaisseurs macroscopiques à cause du rayon d'action  $h_*$  que nous prenons bien plus grand que sa vraie valeur (normalement de l'ordre des échelles moléculaires). Les résultats de simulations numériques (figure E.1 et tableau E.3) permettent de conclure qu'aucune instabilité spinodale (non-physique à ces épaisseurs de film) ne vient perturber la solution calculée tant que le rayon d'action  $h_*$  reste inférieur ou égal à  $h^{Nu}/4$ .

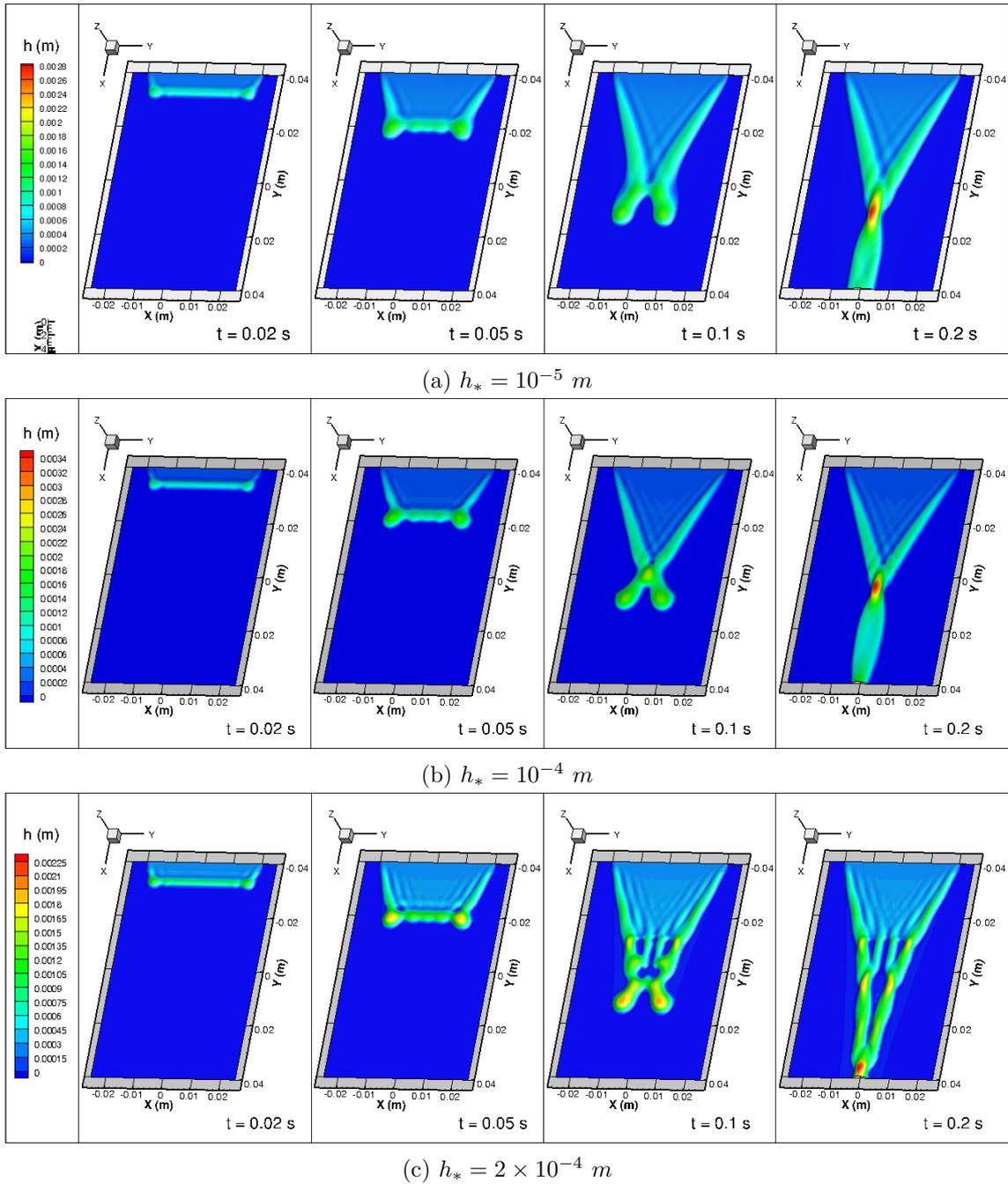


FIGURE E.1 – Evolution temporelle d'un film liquide injecté sur un substrat vertical en fonction du rayon d'action  $h_*$ . Les données du calcul sont résumées dans le tableau E.3.

TABLE E.3 – Etude de la stabilité du film en fonction du rayon d'action  $h_*$ . L'angle de contact statique  $\theta_s$  est fixé à  $68^\circ$  et la résolution du maillage  $\Delta_\Omega$  à  $3 \times 10^{-4} m$ .

$h_*$ (m)	$h_*/h^{bulk}$	$h_*/h^{Nu}$	Instabilités spinodales	CFL	$\Delta t$ (s)
$2 \times 10^{-4}$	$\simeq 1/5$	$\simeq 1/2$	Oui		
$10^{-4}$	$\simeq 1/10$	$\simeq 1/4$	Non	0,1	$4 \times 10^{-6}$
$10^{-5}$	$\simeq 1/100$	$\simeq 1/40$	Non		

## E.2 Convergence en maillage

On cherche à présent à déterminer à partir de quelle résolution  $\Delta_\Omega$  l'étalement du film ne varie plus. Les cas les plus raffinés en maillage que nous allons présenter nécessiteraient plusieurs semaines de temps de calcul pour les simuler sur un domaine suffisamment grand pour observer leur pincement. Par conséquent, la dimension du domaine dans la direction longitudinale a été réduite par rapport à la configuration expérimentale (0,02 m au lieu de 0,08 m) et nous comparerons l'étalement  $d^{num}$  du film à une distance (dans la direction  $x$ ) de 0,015 m de l'injecteur. Un exemple de simulation est représenté sur la figure E.2 où l'abscisse  $x$  d'évaluation de l'étalement est indiqué en pointillé.

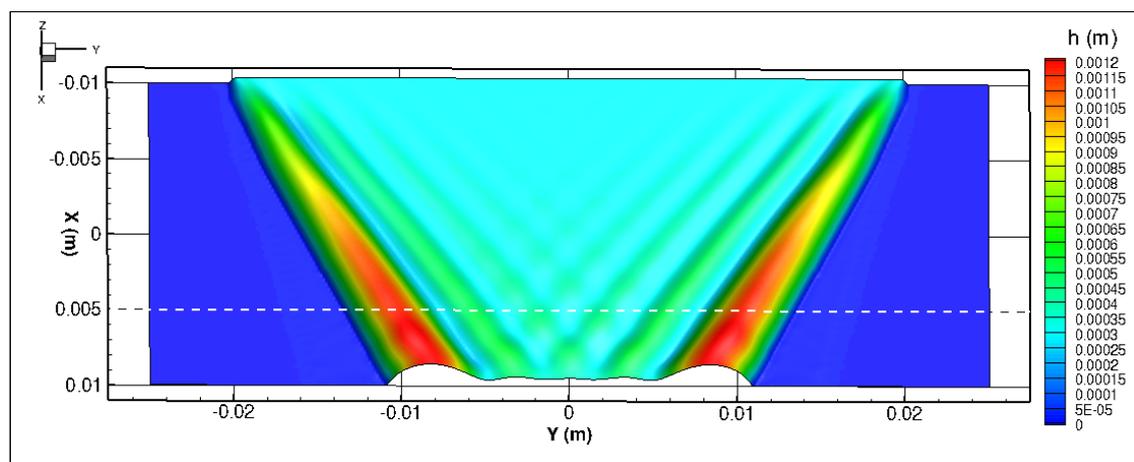
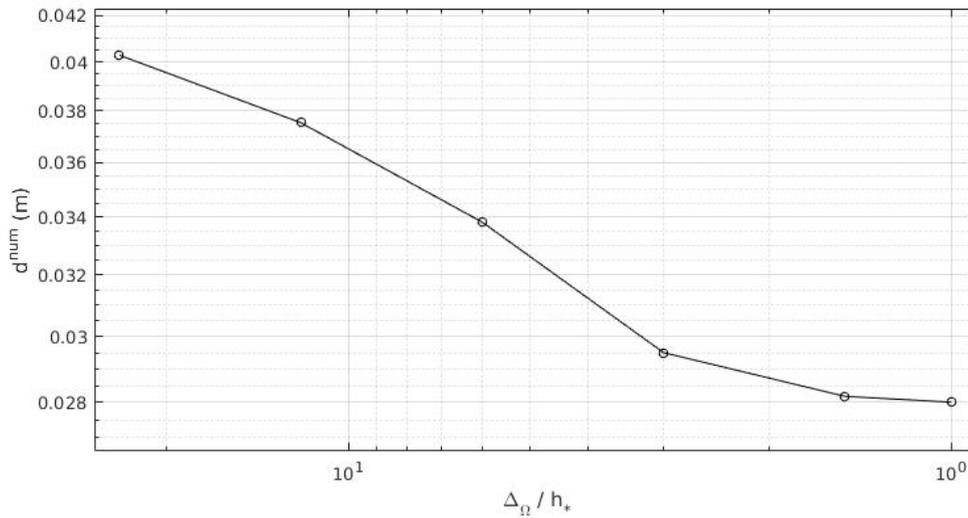
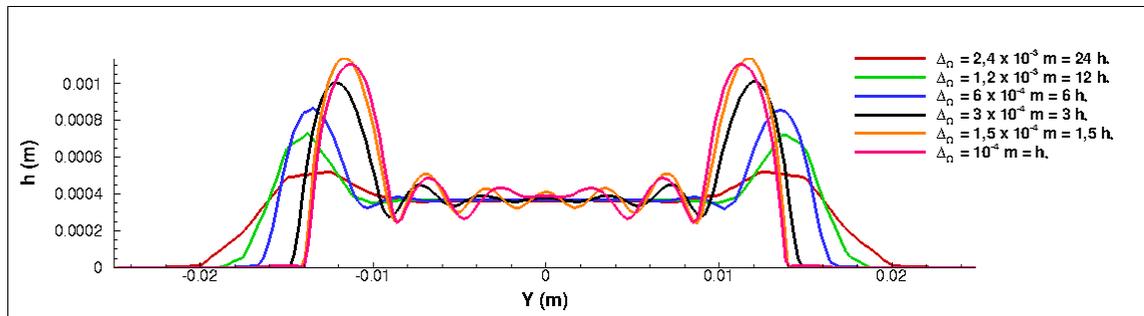


FIGURE E.2 – Epaisseur du film à  $t = 0,1 s$  du cas  $h_* = 10^{-4} m$  et  $\Delta_\Omega = 1,5 \times 10^{-4} m$ . La ligne en pointillée représente l'abscisse  $x$  à laquelle l'étalement  $d^{num}$  du film est évalué. Les données du calcul sont résumées dans le tableau E.4.

Les résultats de simulations numériques (figure E.4 et tableau E.4) permettent de conclure qu'à partir d'une résolution  $\Delta_\Omega$  égale à  $3 h_*$ , l'étalement transversal a suffisamment convergé en maillage car il ne varie plus de plus de 5%.

TABLE E.4 – Evolution de l'étalement  $d^{num}$  obtenu par simulation numérique à une distance  $x = 0,015 \text{ m}$  de l'injecteur et à  $t = 0,1 \text{ s}$  en fonction de la résolution du maillage  $\Delta_\Omega$ . Le rayon d'action  $h_*$  est fixé à  $10^{-4} \text{ m}$ .

$h_*$ (m)	$\Delta_\Omega$	$\Delta_\Omega/h_*$	$\theta_s$	$d^{num} \times 10^{-2} \text{ m}$	$\Delta t$ (s)
$10^{-4}$	$2,4 \times 10^{-3}$	24	$68^\circ$	4,028	$1,1 \times 10^{-4}$
	$1,2 \times 10^{-3}$	12		3,753	$5 \times 10^{-5}$
	$6 \times 10^{-4}$	6		3,382	$1,4 \times 10^{-5}$
	$3 \times 10^{-4}$	3		2,95	$4 \times 10^{-6}$
	$1,5 \times 10^{-4}$	3/2		2,818	$1,6 \times 10^{-6}$
	$10^{-4}$	1		2,801	$5 \times 10^{-7}$

FIGURE E.3 – Tracé de l'évolution de l'étalement  $d^{num}$  en fonction de la résolution du maillage  $\Delta_\Omega$ . Une échelle logarithmique est utilisée.FIGURE E.4 – Evolution du profil 2D d'épaisseur du film  $h(x)$  obtenu par simulation numérique à une distance  $x = 0,015 \text{ m}$  de l'injecteur et à  $t = 0,1 \text{ s}$  en fonction de la résolution du maillage  $\Delta_\Omega$ .

## Annexe F

# Simulation numérique de la transition en ruisselets d'un film tombant - Comparaison avec l'analyse de stabilité linéaire

### F.1 Présentation de l'étude

Nous souhaitons montrer que le modèle proposé est capable de simuler des instabilités transversales en "ruisselets" et que l'expression analytique (6.63) du facteur d'amplification (obtenu par analyse de stabilité linéaire d'un film tombant à la section 6.2) est un bon indicateur de stabilité du film.

### F.2 Données numériques et expérimentales

On considère un film liquide injecté sur un substrat incliné de  $0,6\text{ m}$  de long ( $x \in [-0,3 ; 0,3]\text{ m}$ ) et de  $0,15\text{ m}$  de large ( $y \in [-0,075 ; 0,075]\text{ m}$ ). L'injection se fait avec un débit volumique constant  $Q = 1,155 \times 10^{-6}\text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$  à travers une fente d'épaisseur  $h^{fente}$  et sur toute la largeur du substrat ( $l^{fente} = 0,15\text{ m}$ ). Le calcul est alors initialisé avec les conditions aux limites suivantes :

$$\forall t, \forall y \in \left[ -\frac{l^{fente}}{2}, \frac{l^{fente}}{2} \right], \begin{cases} h(x = -0,3\text{ m}, y, t) = h^{fente} \\ \mathbf{q}(x = -0,3\text{ m}, y, t) = \mathbf{t} \left( \frac{Q}{l^{fente}}, 0 \right) \end{cases} \quad (\text{F.1})$$

Les propriétés du liquide listées dans le tableau F.2 sont celles d'un mélange eau/glycérine supposé totalement mouillant.

TABLE F.1 – Propriétés à température ambiante du liquide étudié

Liquide	$\rho$ ( $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ )	$\mu$ ( $\text{Pa} \cdot \text{s}$ )	$\theta_s$	$b$ ( $\text{m}$ )
Eau	1000	$10^{-2}$	$0^\circ$	$10^{-8}\text{m}$

Le substrat est incliné d'un angle  $\beta^y = 30^\circ$  par rotation autour de l'axe  $y$ . L'épaisseur théorique  $h^{Nu}$  de l'écoulement de Nusselt stationnaire que va adopter le liquide rapidement après l'injection vaut

$$h^{Nu} = \left[ \frac{3 \nu Q}{g \sin(\beta^y) l^{fente}} \right]^{1/3} = 3,61 \times 10^{-4} \text{ m} \quad (\text{F.2})$$

En prenant une épaisseur de fente d'injection  $h^{fente}$  égale à  $h^{Nu}$ , les conditions aux limites d'injection du liquide sont données dans le tableau ci-dessous par

TABLE F.2 – Conditions d'injection

$Q \text{ (m}^3 \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$	$l^{fente} \text{ (m)}$	$q^x = \frac{Q}{l^{fente}} \text{ (m}^2 \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$	$h^{fente} \text{ (m)}$	$\bar{u}^{fente} = \frac{q}{h^{fente}} \text{ (m} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$
$1,155 \times 10^{-6}$	$1,5 \times 10^{-1}$	$7,7 \times 10^{-6}$	$3,61 \times 10^{-4}$	$2,133 \times 10^{-2}$

Toutes les propriétés physiques du liquide ont été fixées à l'exception de la tension de surface  $\gamma_{lg}$  que nous allons faire varier afin de modifier la stabilité du film. En effet, on voit d'après l'expression (F.2) que la tension de surface n'a aucun impact sur l'écoulement de Nusselt loin de la ligne triple. Par contre, elle a un impact non-négligeable sur le profil du bourrelet au voisinage de la ligne triple, puisque l'on peut montrer que la taille du bourrelet augmente d'autant plus que la tension de surface est grande. Pour illustrer cet effet, nous avons choisi deux valeurs de tension de surface bien distinctes (respectivement  $\gamma_{lg} = 0,68 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$  et  $\gamma_{lg} = 10^{-3} \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ ) et avons réalisé pour chacune une simulation numérique 2D représentée sur la figure F.1. Le pas de maillage pour chaque simulation (respectivement  $\Delta x = 2 \times 10^{-3} \text{ m}$  et  $\Delta x = 5 \times 10^{-4} \text{ m}$ ) est choisi de telle manière à ce que le bourrelet soit correctement représenté à l'échelle du maillage.

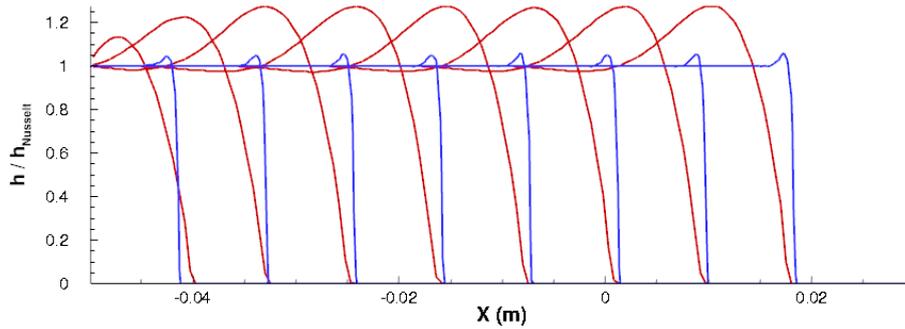


FIGURE F.1 – Evolution du profil longitudinal d'un film tombant à des intervalles de temps  $\Delta t = 0,4 \text{ s}$  en fonction de la tension de surface  $\gamma_{lg}$ . L'épaisseur du film est adimensionnée par l'épaisseur  $h^{Nu}$  de l'écoulement de Nusselt. Le tracé bleu (resp. le tracé rouge) représente le cas  $\gamma_{lg} = 10^{-3} \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$  (resp. le cas  $\gamma_{lg} = 0,68 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ ) et a été réalisé avec pas de maillage  $\Delta x$  de  $5 \times 10^{-4} \text{ m}$  (resp. de  $2 \times 10^{-3} \text{ m}$ ). La longueur de glissement est fixée à  $10^{-8} \text{ m}$ .

### F.3 Prédiction de la stabilité linéaire du film

Nous souhaitons déterminer si les deux configurations étudiées sont linéairement stables

ou instables en réponse à une perturbation au voisinage de la ligne triple. Pour cela, nous pouvons utiliser l'analyse de stabilité linéaire de la section 6.2 qui a montré que le facteur d'amplification temporel  $\omega_i$  d'une perturbation de nombre d'onde  $k$  appliquée transversalement à l'écoulement d'un film tombant s'écrit

$$\omega_i = \frac{q}{h^{Nu}} \left( \int_{-\infty}^0 \left[ \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} \right] \left[ \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} - 1 \right] \left[ 1 + \frac{h_o(\xi)}{h^{Nu}} + \frac{b}{h^{Nu}} \right] d\xi \right) k^2 \quad (\text{F.3})$$

avec  $h_o(\xi)$  le profil du film tombant dans la direction d'injection. Puisque ce profil est connu et est tracé pour les deux cas étudiés sur la figure F.1, on peut calculer leur facteur d'amplification temporel respectif qui vaut

$$\begin{aligned} \omega_i(\gamma_{lg} = 10^{-3} \text{ N.m}^{-1}) &= -5,33 \times 10^{-7} \times k^2 \text{ s}^{-1} \\ \omega_i(\gamma_{lg} = 0,68 \text{ N.m}^{-1}) &= +5,75 \times 10^{-5} \times k^2 \text{ s}^{-1} \end{aligned} \quad (\text{F.4})$$

On en déduit que dans le cas d'une petite tension de surface ( $\gamma_{lg} = 10^{-3} \text{ N.m}^{-1}$ ), la faible taille du bourrelet induit un facteur d'amplification temporel  $\omega_i$  négatif. Le film est donc linéairement stable et l'amplitude d'une perturbation va s'atténuer dans le temps. Par contre, dans le cas d'une tension de surface élevée ( $\gamma_{lg} = 0,68 \text{ N.m}^{-1}$ ) qui induit un bourrelet haut et large,  $\omega_i$  est positif et l'amplitude d'une perturbation va croître dans le temps et générer des ruisselets.

## F.4 Résultats de simulations numériques

Nous souhaitons vérifier que les simulations numériques réalisées à partir du modèle proposé sont en accord avec les prédictions de l'analyse de stabilité linéaire du paragraphe précédent. Nous allons donc vérifier que le cas avec la petite tension de surface est bien linéairement stable et que celui avec la grande tension de surface est bien linéairement instable. Les données de simulations numériques sont données dans le tableau suivant

TABLE F.3 – Récapitulatif des paramètres numériques.

$q^x \text{ (m}^2.\text{s}^{-1}\text{)}$	$\beta^y \text{ (}^\circ\text{)}$	$h^{fente} = h^{Nu} \text{ (m)}$	$\gamma_{lg} \text{ (N.m}^{-1}\text{)}$	$b \text{ (m)}$	$\Delta_\Omega \text{ (m)}$	CFL
$7,7 \times 10^{-6}$	30	$3,61 \times 10^{-4}$	$0,68$ $10^{-3}$	$10^{-8}$	$5 \times 10^{-4}$ $2 \times 10^{-3}$	0,1

La méthode utilisée pour appliquer une petite perturbation au voisinage de la ligne triple consiste à initialiser une goutte sur le substrat dont l'épaisseur est faible devant l'épaisseur  $h^{Nu}$  de l'écoulement injecté (voir figure F.2a). La ligne triple est donc perturbée au moment où elle rencontre cette goutte (voir figure F.2b). Les résultats de simulations numériques vérifient bien l'analyse de stabilité linéaire puisque que l'on voit sur la figure F.2 qu'avant que le film ne soit perturbé par la goutte déposée sur le substrat, il s'écoule uniformément sans développer aucune structure dans la direction transversale  $y$ . Dans le cas du film linéairement stable, la perturbation générée décroît au fil du temps. Par contre, des ruisselets régulièrement espacés se développent au voisinage de la ligne triple du film linéairement instable.

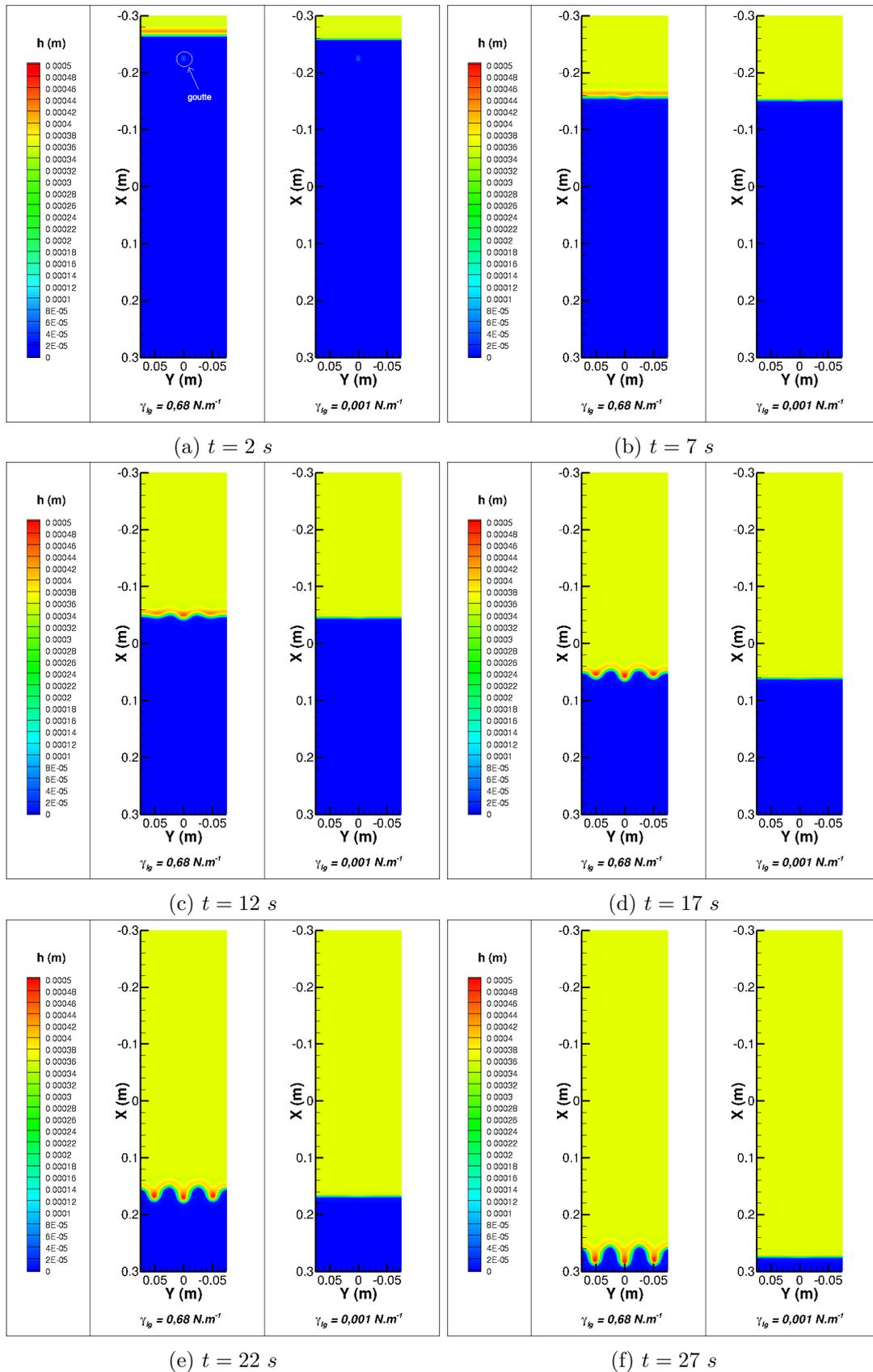


FIGURE F.2 – Stabilité d'un film tombant en réponse à une perturbation au niveau de la ligne triple en fonction de la tension de surface  $\gamma_{lg}$ . Les données du calcul sont résumées dans le tableau F.3.

