



---

# Projet Collaboratif : Microfluidiques

---

Yakine RACHEDI, Wassim TAHER

Master Ingénierie mathématiques

25 Mars 2025

## Résumé

Ce projet porte sur l'étude des écoulements de fluides dans un système microfluidique de type serpentin, à travers l'analyse des équations de Navier-Stokes. L'objectif est d'identifier un régime dans lequel la viscosité devient un paramètre prédominant, afin de concevoir un système microfluidique permettant d'améliorer le mélange de deux fluides à une concentration donnée.

Le travail est structuré en plusieurs parties :

- **Modélisation** : formulation des équations aux dérivées partielles représentant le problème, en se basant sur les connaissances théoriques acquises antérieurement.
- **Discrétisation** : utilisation des méthodes d'approximations en analyse numérique, telles que les éléments finis et les différences finies, dans le but de trouver la solution numérique la plus pertinente et de déterminer les résultats qui peuvent être appliqués dans un cadre industriel.
- **Programmation et simulation** : implémentation sous FreeFem pour la résolution des équations aux dérivées partielles et utilisation de Python pour la construction du maillage.

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>3</b>
1.1	Contexte et problématique . . . . .	3
1.2	Géométrie . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Modèle de fluide</b>	<b>4</b>
2.1	Adimensionnement . . . . .	4
2.2	Discretisation temporelle . . . . .	5
2.3	Formulation variationnelle . . . . .	5
<b>3</b>	<b>Problème de Stokes dynamique : intégration du modèle de température</b>	<b>6</b>
3.1	Viscosité dynamique . . . . .	6
3.2	Modèle de fluide dynamique . . . . .	7
3.3	Stabilisation de la pression . . . . .	8
<b>4</b>	<b>Problème de concentration et de mélange</b>	<b>9</b>
4.1	Détermination du coefficient de diffusion dynamique $\beta(\theta)$ . . . . .	9
4.2	Discretisation temporelle . . . . .	10
4.3	Formulation variationnelle . . . . .	10
<b>5</b>	<b>Simulations numériques et résultats obtenus avec FreeFem++</b>	<b>12</b>

# 1 Introduction

## 1.1 Contexte et problématique

Dans de nombreux systèmes microfluidiques, l'efficacité du mélange de deux fluides, initialement caractérisés par des concentrations  $C_1$  et  $C_2$ , représente un défi majeur.

L'objectif de cette étude est de concevoir un système optimisant le mélange des fluides en utilisant des tuyaux chauffés à des emplacements stratégiques, afin d'atteindre rapidement une concentration finale de  $C_1 = C_2 = 1/2$ . Des points de chauffe seront placés de manière ciblée pour ajuster localement la viscosité du fluide et ainsi améliorer l'efficacité du mélange.

Les modèles retenus pour cette étude sont les suivants :

- **Modèle de fluide** : Les équations de Navier-Stokes sont utilisées avec des approximations adaptées aux volumes caractéristiques et aux paramètres propres à la microfluidique.
- **Modèle de mélange** : La concentration des espèces est modélisée par une équation de transport gouvernée par le champ de vitesse du fluide.
- **Modèle thermique** : Une distribution de température est imposée sur certaines zones, induisant une variation de la viscosité du fluide en fonction de la température.

## 1.2 Géométrie

La géométrie simplifiée du système étudié est présentée dans la figure 1. Il s'agit d'un système microfluidique relié à une entrée comportant deux canaux permettant l'injection de fluides de concentrations  $C_1$  et  $C_2$ .

Les paramètres caractéristiques du système sont les suivants :

- **Longueur caractéristique** :  $L = 30$  cm
- **Volume caractéristique** :  $\bar{V} = 10^{-12}$  m<sup>3</sup>
- **Viscosité cinématique de l'eau à 20°C** :  $\eta_{\text{bar}} = 1.005 \times 10^{-6}$  m<sup>2</sup>/s
- **Diamètre du capillaire** :  $\bar{x} = 10^{-6}$  m
- **Vitesse caractéristique** :  $\bar{u} = 10^{-3}$  m/s
- **Pression caractéristique** :  $\bar{p} = 10^4$  N/m<sup>2</sup>

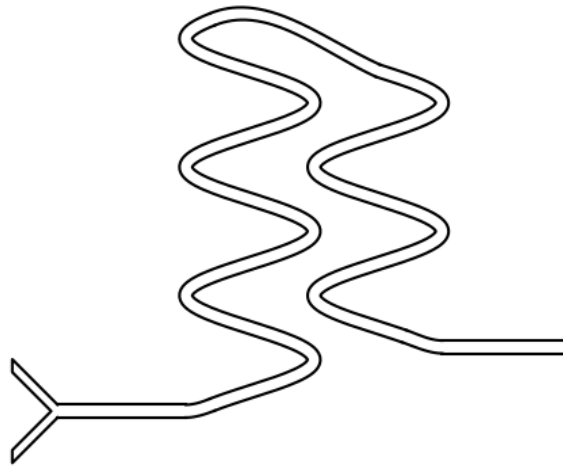


Figure 1: Représentation schématique du système microfluidique étudié

La géométrie a été fait en Python, en utilisant des fonctions de base telles que des sinus et des fonctions affines. Les points ont été connectés et la géométrie a été lissée, garantissant un diamètre constant tout au long du canal pour éviter toute discontinuité, notamment dans les zones où le tuyau effectue des courbes.

## 2 Modèle de fluide

Nous considérons les équations de Navier-Stokes régissant l'écoulement d'un fluide incompressible. Il s'agit de trouver  $\mathbf{u} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^2$  et  $p : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  tels que :

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \mu \Delta \mathbf{u} + \nabla p = \mathbf{g}, \\ \operatorname{div} \mathbf{u} = 0. \end{cases} \quad (1)$$

où  $\mathbf{g}$  est une force donnée.

En multipliant la première équation par la masse volumique  $\rho$ , on obtient :

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \rho \operatorname{div}(\eta \nabla \mathbf{u}) + \nabla p = \rho \mathbf{g},$$

où  $\eta$  représente la viscosité dynamique du fluide.

### 2.1 Adimensionnement

Dans le cadre de la microfluidique, il est essentiel d'effectuer un adimensionnement des variables. Nous introduisons les grandeurs caractéristiques suivantes :

$$X = \bar{x}x, \quad U = \bar{u}u, \quad P = \bar{p}p, \quad T = \bar{t}t, \quad \eta = \bar{\eta}\mu.$$

Avec :

- $\rho$  : masse volumique du fluide considéré ( $\text{kg m}^{-3}$ )
- $\mathbf{U}$  : vitesse eulérienne du fluide ( $\text{m s}^{-1}$ )
- $T$  : temps (s)
- $\mathbf{X}$  : position (m)
- $\eta$  : viscosité dynamique ( $\text{m}^2 \text{s}^{-1}$ )
- $P$  : pression ( $\text{Pa} = \text{kg m}^{-1} \text{s}^{-2}$ )
- $\mathbf{g}$  : gravité ( $\text{m s}^{-2}$ )

Les dérivées se transforment selon :

$$dX = \bar{x} dx, \quad f(X) = f(\bar{x}x), \quad \frac{df(X)}{dX} = \frac{1}{\bar{x}} \frac{df(\bar{x}x)}{dx}.$$

En appliquant ces changements de variables à l'équation (2), nous obtenons l'expression adimensionnée suivante :

$$\frac{\rho}{\bar{\eta}\bar{t}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\rho \bar{u}^2}{\bar{x}\bar{\eta}} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \frac{\rho \bar{u}}{\bar{x}^2} \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + \left( \frac{\bar{x}\bar{p}}{\rho \bar{u} \bar{\eta}} \right) \nabla p = \frac{\mathbf{g} \bar{x}^2}{\bar{\eta} \bar{u}}.$$

Les nouvelles grandeurs adimensionnées sont ainsi exprimées en fonction des paramètres caractéristiques du problème.

En multipliant cette équation par le facteur  $\frac{\bar{x}^2}{\rho \bar{u}}$ , on obtient :

$$\frac{\bar{x}^2}{\bar{\eta}\bar{t}\rho\bar{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\bar{x}\bar{u}}{\bar{\eta}} (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + \left( \frac{\bar{x}\bar{p}}{\bar{\eta}\rho\bar{u}} \right) \nabla p = 0.$$

Si l'on introduit le nombre de Reynolds défini par :

$$Re = \frac{\bar{x}\bar{u}}{\bar{\eta}},$$

et compte tenu du fait que, dans notre cadre d'étude, nous considérons un régime où  $Re \ll 1$ , le terme  $Re(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$  est négligeable. De plus, puisque nous supposons  $\mathbf{g} = 0$  dans le contexte de la microfluidique, le second membre de l'équation est nul.

Enfin, afin de garantir que le terme  $\frac{\bar{x}^2}{\bar{\eta}t}$  ne soit pas négligeable, nous l'imposons égal à  $Re^\alpha$ , par exemple pour  $\alpha = \frac{1}{2}$ , en posant :

$$\sqrt{Re} = \frac{\bar{x}^2}{\bar{\eta}t},$$

nous obtenons un problème de Stokes instationnaire :

$$\begin{cases} \sqrt{Re} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = - \left( \frac{\bar{x}\bar{p}}{\bar{\eta}\rho\bar{u}} \right) \nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) \\ \frac{\bar{u}}{\bar{x}} \cdot \text{div} \mathbf{u} = 0 \end{cases} \quad (2)$$

## 2.2 Discrétisation temporelle

On considère une grille temporelle  $t_1, \dots, t_n, \dots, T_f$  avec  $n = 1, \dots, N$ , où  $t_n = n\Delta t$  avec  $\Delta t = \frac{T_f}{N}$ . Ici,  $T_f$  représente le temps final et  $\Delta t$  est le pas de discrétisation.

On introduit les fonctions :

$$u^n : \Omega \times (0, T_f) \rightarrow \mathbb{R}^2, \quad p^n : \Omega \times (0, T_f) \rightarrow \mathbb{R}$$

On utilise le schéma d'Euler implicite pour la dérivée temporelle :

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t}$$

Le schéma numérique pour le problème de Stokes instationnaire il sera :

$$\begin{cases} \sqrt{Re} \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = - \left( \frac{\bar{x}\bar{p}}{\bar{\eta}\rho\bar{u}} \right) \nabla p^{n+1} + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}^{n+1}) \\ \frac{\bar{u}}{\bar{x}} \cdot \text{div}(\mathbf{u}^{n+1}) = 0 \end{cases} \quad (3)$$

ceci est équivalent à

$$\begin{cases} \sqrt{Re} \mathbf{u}^{n+1} - \mu \Delta \mathbf{u}^{n+1} + \Delta t \left( \frac{\bar{x}\bar{p}}{\bar{\eta}\rho\bar{u}} \right) \nabla p^{n+1} = \sqrt{Re} \mathbf{u}^n, \\ \frac{\bar{u}}{\bar{x}} \cdot \text{div}(\mathbf{u}^{n+1}) = 0. \end{cases} \quad (4)$$

## 2.3 Formulation variationnelle

Soit  $v \in X$  et  $q \in M$ , où  $X$  et  $M$  sont deux espaces de fonctions test. On multiplie la première équation par  $v \in X$  et la seconde par  $q \in M$

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \sqrt{Re} \mathbf{u}^{n+1} \cdot v - \mu \Delta t \int_{\Omega} \Delta \mathbf{u}^{n+1} \cdot v + \Delta t \left( \frac{\bar{x}\bar{p}}{\bar{\eta}\rho\bar{u}} \right) \int_{\Omega} \nabla p^{n+1} \cdot v = \int_{\Omega} \sqrt{Re} \mathbf{u}^n \cdot v \\ \int_{\Omega} \frac{\bar{u}}{\bar{x}} \cdot \text{div}(\mathbf{u}^{n+1}) q = 0 \end{cases} \quad (5)$$

On intègre par parties l'équation (5) en utilisant la formule de Green généralisée :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \sqrt{Re} \mathbf{u}^{n+1} \cdot v + \mu \Delta t \int_{\Omega} \nabla \mathbf{u}^{n+1} : \nabla v - \Delta t \int_{\partial\Omega} \nabla \mathbf{u}^{n+1} \cdot \mathbf{v} - \Delta t \left( \frac{\bar{x}\bar{p}}{\bar{\eta}\rho\bar{u}} \right) \int_{\Omega} \nabla p^{n+1} \cdot v \\ = \int_{\Omega} \sqrt{Re} \mathbf{u}^n \cdot v. \end{aligned}$$

Pour le terme  $\int_{\Omega} \nabla p^{n+1} \cdot v$ , avec  $p \in L^2(\Omega)$  (au moins) et  $v \in X$  une fonction test régulière :

$$\operatorname{div}(p^{n+1}v) = \nabla p^{n+1} \cdot \nabla v + p^{n+1} \operatorname{div}(v).$$

En intégrant cette expression sur  $\Omega$  et en appliquant la formule de Stokes, on obtient :

$$\int_{\Omega} \nabla p^{n+1} \cdot v = \int_{\partial\Omega} n p^{n+1} v - \int_{\Omega} p^{n+1} \operatorname{div}(v)$$

d'où la formulation variationnel :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \sqrt{Re} \mathbf{u}^{n+1} \cdot v + \mu \Delta t \int_{\Omega} \nabla \mathbf{u}^{n+1} : \nabla v \\ & - \Delta t \int_{\partial\Omega} \nabla \mathbf{u}^{n+1} \cdot \mathbf{v} - \Delta t \left( \frac{\bar{x}\bar{p}}{\bar{\eta}\bar{\rho}\bar{u}} \right) \int_{\Omega} p^{n+1} \operatorname{div}(v) \\ & + \int_{\Omega} \frac{\bar{u}}{\bar{x}} \cdot \operatorname{div}(\mathbf{u}^{n+1}) q + \Delta t \left( \frac{\bar{x}\bar{p}}{\bar{\eta}\bar{\rho}\bar{u}} \right) \int_{\partial\Omega} n p^{n+1} v \\ & - \mu \Delta t \int_{\partial\Omega} n \nabla \mathbf{u}^{n+1} v = \int_{\Omega} \sqrt{Re} \mathbf{u}^n \cdot v \end{aligned} \tag{6}$$

### 3 Problème de Stokes dynamique : intégration du modèle de température

#### 3.1 Viscosité dynamique

Dans la section précédente, nous avons supposé que la viscosité du fluide était constante. Cependant, cette hypothèse ne s'applique pas à notre étude, où les tuyaux sont chauffés en des points stratégiques. La viscosité devient alors une fonction de la température, notée  $\alpha(\theta)$ . Elle est obtenue à partir de la résolution de l'équation de la chaleur. Toutefois, par manque de temps, elle a été directement fournie sous forme de variations expérimentales en fonction de la température.

Cette fonction est monotone, sa dérivée seconde ne change pas de signe, et elle est définie par les points expérimentaux répertoriés dans le tableau 1, où  $\eta$  représente la viscosité (en  $\text{m}^2/\text{s}$ ) et  $\theta$  la température (en  $^{\circ}\text{C}$ ).

$\theta$ ( $^{\circ}\text{C}$ )	$\alpha(\theta)$ ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
0	$1.753 \times 10^{-6}$
10	$1.005 \times 10^{-6}$
50	$0.535 \times 10^{-6}$
100	$0.277 \times 10^{-6}$

Table 1: Variation de la viscosité dynamique en fonction de la température.

Afin de modéliser la dépendance de la viscosité à la température, une interpolation a été réalisée sur l'intervalle  $[0, 100]$  en utilisant une fonction exponentielle de la forme  $ae^{b\theta} + c$ . Les constantes  $a$ ,  $b$  et  $c$  ont été déterminées de manière à obtenir une approximation de la viscosité  $\alpha : [0, 100] \rightarrow \mathbb{R}$ . La courbe interpolée est illustrée dans la figure (2).

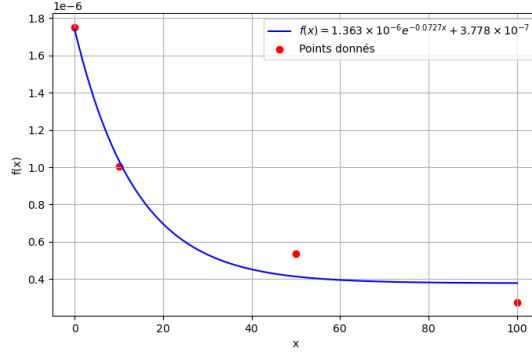


Figure 2: Interpolation de la viscosité en fonction de la température.

Par conséquent, nous considérons que la solution du problème thermique correspond à l'approximation interpolée de la viscosité dynamique, définie par :

$$\alpha(\theta) = 1.363 \times 10^{-6} \exp(-0.0727\theta) + 3.778 \times 10^{-7}$$

Cette fonction a été obtenue à l'aide de la bibliothèque **optimize** de **SciPy** sous Python, en ajustant les paramètres pour minimiser l'erreur d'interpolation.

### 3.2 Modèle de fluide dynamique

En nous basant sur le modèle de Stokes instationnaire (cf. 6) ainsi que sur l'approximation de la solution du problème thermique obtenue par interpolation, nous considérons dans le modèle de Stokes instationnaire une viscosité dynamique dépendante de la température ( $\mu = \alpha(\theta)$ ), au lieu d'une viscosité constante.

De plus, des conditions aux limites sont imposées sur la vitesse du fluide :

- Sur  $\Gamma_{\text{in}}$ , la vitesse est fixée à  $u_{\text{in}}$ , suivant un profil de type Poiseuille.
- Sur  $\Gamma_{\text{wall}}$ , correspondant aux parois du capillaire, la vitesse est nulle :  $u = 0$ .
- À la sortie, sur  $\Gamma_{\text{out}}$ , une condition de Neumann est imposée :  $\nabla u \cdot \mathbf{n} = 0$ .

Le modèle final du fluide s'écrit alors sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \sqrt{Re} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = - \left( \frac{\bar{x}\bar{p}}{\bar{\eta}\bar{\rho}\bar{u}} \right) \nabla p + \nabla \cdot (\alpha(\theta) \cdot \nabla \mathbf{u}) \\ \mathbf{div} \mathbf{u} = 0 \\ \mathbf{u} = u_{\text{in}} \quad \text{sur } \Gamma_{\text{in}} \\ \mathbf{u} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_{\text{wall}} \\ \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_{\text{out}} \end{cases} \quad (7)$$

On introduit le schéma numérique à partir du (2) :

$$\begin{cases} \sqrt{Re} \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = - \left( \frac{\bar{x}\bar{p}}{\bar{\eta}\bar{\rho}\bar{u}} \right) \nabla p^{n+1} + \nabla \cdot (\alpha(\theta) \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+1}) \\ \frac{\bar{u}}{\bar{x}} \mathbf{div}(\mathbf{u}^{n+1}) = 0 \\ \mathbf{u}^{n+1} = u_{\text{in}} \quad \text{sur } \Gamma_{\text{in}} \\ \mathbf{u} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_{\text{wall}} \\ \nabla \mathbf{u}^{n+1} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_{\text{out}} \end{cases} \quad (8)$$

La formulation variationnelle du problème de fluide dynamique repose sur le modèle de Stokes instationnaire (6) en ajoutant la dépendance de la viscosité à la température.



On considère l'espace des fonctions de test  $\mathbf{v} \in H_0^1(\Gamma_{\text{wall}}) \cap H_0^1(\Gamma_{\text{in}})$  et  $q \in L_0^2(\Omega)$ . La formulation variationnelle s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \sqrt{\text{Re}} \mathbf{u}^{n+1} \cdot \mathbf{v} + \mu \Delta t \int_{\Omega} \nabla \mathbf{u}^{n+1} : \nabla \mathbf{v} \\
& - \Delta t \int_{\partial\Omega} \nabla \mathbf{u}^{n+1} \cdot \mathbf{v} - \Delta t \left( \frac{\bar{x}\bar{p}}{\bar{\eta}\rho\bar{u}} \right) \int_{\Omega} p^{n+1} \text{div}(\mathbf{v}) \\
& + \frac{\bar{u}}{\bar{x}} \int_{\Omega} \text{div}(\mathbf{u}^{n+1}) q + \Delta t \left( \frac{\bar{x}\bar{p}}{\bar{\eta}\rho\bar{u}} \right) \int_{\partial\Omega} n p^{n+1} \mathbf{v} \\
& - \alpha(\theta) \Delta t \int_{\partial\Omega} n \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+1} \cdot \mathbf{v} = \int_{\Omega} \sqrt{\text{Re}} \mathbf{u}^n \cdot \mathbf{v}
\end{aligned} \tag{9}$$

### 3.3 Stabilisation de la pression

Nous proposons d'effectuer une simulation en choisissant des espaces d'éléments finis  $X_h \subset X$  et  $M_h \subset M$ , qui sont des espaces d'approximation de dimension finie, i.e.  $\dim X_h < +\infty$  et  $\dim M_h < +\infty$ .

Nous considérons une triangulation régulière  $\mathcal{T}_h$  du domaine  $\Omega$ . Soit  $\mathbb{P}_k$  l'espace des polynômes de degré au plus  $k$ , défini par :

$$\mathbb{P}_k = \left\{ \sum_{i=0}^k a_i x^i \mid a_i \in \mathbb{R} \right\}.$$

Les espaces d'approximation utilisés sont les suivants :

$$X_h := \left\{ v_h \in [C^0(\Omega) \cap H_0^1(\Gamma_{\text{wall}}) \cap H_0^1(\Gamma_{\text{in}})]^2 \mid v_h|_K \in \mathbb{P}_1^2, \forall K \in \mathcal{T}_h \right\},$$

$$M_h := \left\{ q_h \in C^0(\Omega) \cap L_0^2(\Omega) \mid q_h|_K \in \mathbb{P}_0, \forall K \in \mathcal{T}_h \right\}.$$

Afin d'assurer la stabilité de la pression, nous ajoutons un terme de stabilisation sous la forme :

$$\varepsilon \int_{\Omega} p_h^{n+1} q_h$$

avec un paramètre de stabilisation fixé à  $\varepsilon = 10^{-3}$ . Ce terme permet d'atténuer les oscillations numériques et d'obtenir une meilleure approximation de la pression.

## 4 Problème de concentration et de mélange

Le modèle de mélange consiste à trouver  $c \in C^0(\Omega) \cap [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^+$  tel que :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \gamma \nabla \cdot (\beta(\theta) \nabla c) + \mathbf{u} \cdot \nabla c$$

Ce modèle comporte deux termes principaux :

$$\underbrace{\gamma \nabla \cdot (\beta(\theta) \nabla c)}_{\text{terme de diffusion}} \quad \text{et} \quad \underbrace{\mathbf{u} \cdot \nabla c}_{\text{terme de transport}}.$$

Le coefficient  $\gamma$  représente le coefficient de diffusion, que l'on considère très faible, typiquement de l'ordre de  $10^{-10}$  à  $10^{-9}$ .

Le terme  $\beta(\theta)$  désigne le coefficient de diffusion dynamique, qui dépend de la température  $\theta$  et sera déterminé dans la suite.

En effectuant un adimensionnement, similaire à celui utilisé pour le modèle de fluide dynamique, nous obtenons :

$$\frac{\bar{x}^2}{\bar{t}} \frac{\partial c}{\partial t} + \bar{u} \bar{x} \mathbf{u} \cdot \nabla c - \gamma \nabla \cdot (\beta(\theta) \nabla c) = 0$$

Les conditions aux limites sont les suivantes :

- Condition de Neumann homogène sur la frontière du domaine, sauf à l'entrée :

$$\frac{\partial c}{\partial n} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \setminus \Gamma_{\text{in}}.$$

- Condition de Dirichlet à l'entrée du domaine :

$$c = C_d, \quad \text{où} \quad C_d = \begin{cases} 0 & \text{sur } \Gamma_{\text{in}}^1 \\ 1 & \text{sur } \Gamma_{\text{in}}^2 \end{cases}$$

Ici,  $\Gamma_{\text{in}}^1$  correspond à la partie supérieure de  $\Gamma_{\text{in}}$ , et  $\Gamma_{\text{in}}^2$  à la partie inférieure, où le fluide est injecté.

Ainsi, le problème de mélange est donné par :

$$\begin{cases} \frac{\bar{x}^2}{\bar{t}} \frac{\partial c}{\partial t} = -\bar{u} \bar{x} \mathbf{u} \cdot \nabla c + \gamma \nabla \cdot (\beta(\theta) \nabla c) \\ c = C_d \quad \text{sur } \Gamma_{\text{In}} \\ \frac{\partial c}{\partial n} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \setminus \Gamma_{\text{In}}. \end{cases} \quad (10)$$

### 4.1 Détermination du coefficient de diffusion dynamique $\beta(\theta)$

Comme dans le cas de la viscosité dynamique, en utilisant la bibliothèque `optimize` de `Scipy`, nous déterminons une fonction de la forme exponentielle  $a + \exp(bx)$ , illustrée par le graphe suivant :

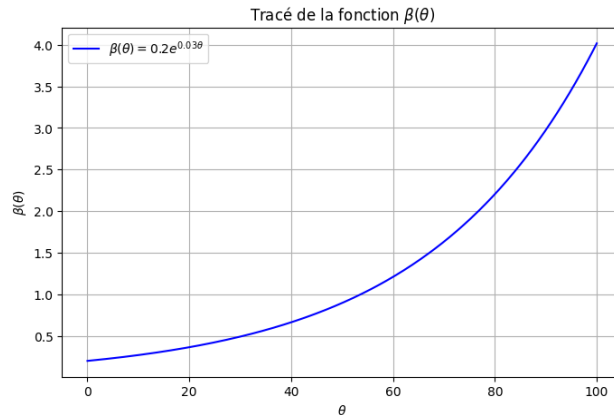


Figure 3: Coefficient de diffusion dynamique

D'où, en posant  $\beta(\theta) = 0.2 \cdot \exp(0.3 \cdot \theta)$

## 4.2 Discrétisation temporelle

De même que dans le cas du modèle de fluide dynamique, nous posons la grille temporelle  $t_1, \dots, t_n, \dots, T_f$ , avec  $n = 1, \dots, N$ , où  $t_n = n\Delta t$  et  $\Delta t = \frac{T_f}{N}$ . Ici,  $T_f$  représente le temps final et  $\Delta t$  est le pas de discrétisation.

Nous introduisons les fonctions suivantes :

$$c^n : \Omega \times (0, T_f) \rightarrow \mathbb{R}^+.$$

En discrétisant l'équation en temps selon un schéma d'Euler implicite, nous obtenons l'approximation suivante :

$$\frac{\partial c}{\partial t} \approx \frac{c^{n+1} - c^n}{\Delta t}$$

Le problème final s'écrit donc :

$$\frac{c^{n+1} - c^n}{\Delta t} + \bar{u}\bar{x}\mathbf{u} \cdot \nabla c^{n+1} + \gamma \nabla \cdot (\beta(\theta) \nabla c^{n+1}) = 0$$

Ainsi, le schéma numérique pour le problème de mélange à partir de (10) est donné par :

$$\begin{cases} \frac{c^{n+1} - c^n}{\Delta t} = -\bar{u}\bar{x}\mathbf{u} \cdot \nabla c^{n+1} + \gamma \nabla \cdot (\beta(\theta) \nabla c^{n+1}) \\ c = C_d \quad \text{sur } \Gamma_{\text{In}} \\ \frac{\partial c}{\partial n} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \setminus \Gamma_{\text{In}} \end{cases} \quad (11)$$

## 4.3 Formulation variationnelle

À partir de (11), nous faisons la formulation variationnelle. Nous multiplions par  $\bar{C}^{n+1}$  et intégrons par parties en utilisant la formule de Green généralisée :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\bar{x}}{t} C^{n+1} \bar{C}^{n+1} + \int_{\Omega} \Delta t \bar{u} \cdot \bar{x} \nabla u^{n+1} \cdot \nabla C^{n+1} \bar{C}^{n+1} \\ + \Delta t \cdot \gamma \int_{\Omega} \nabla \cdot (\beta(\theta) \nabla C^{n+1}) \bar{C}^{n+1} = \frac{\bar{x}^2}{t} \int_{\Omega} \bar{C}^{n+1} C^n. \end{aligned}$$

**Remarque 4.3.1.** Pour le terme  $\int_{\Omega} \nabla \cdot (\beta(\theta) \nabla C^{n+1}) \bar{C}^{n+1}$ , on écrit :

$$\langle \nabla \cdot (\beta(\theta) \nabla C^{n+1}), \bar{C}^{n+1} \rangle_{\langle D', D \rangle}.$$

Comme la régularité de  $\beta$  n'est pas connue (en général), on ne peut pas directement écrire :

$$- \int_{\Omega} \nabla \cdot (\beta(\theta) \nabla C^{n+1}) \bar{C}^{n+1} = \text{div}(\beta(\theta) \nabla C^{n+1}),$$

qui n'est pas égal à :

$$\nabla \beta(\theta) \cdot \nabla C^{n+1} + \beta(\theta) \Delta \bar{C}^{n+1}.$$

Si l'on suppose que  $\beta \in L^\infty(\Omega)$ , ce qui est le cas ici, on obtient :

$$\Rightarrow \int_{\Omega} \nabla \cdot (\beta(\theta) \nabla C^{n+1}) \in L^2(\Omega).$$

Ainsi, on a :

$$\langle \nabla \cdot (\beta(\theta) \nabla C^{n+1}), \bar{C}^{n+1} \rangle_{\langle D', D \rangle} = \int_{\Omega} \beta(\theta) \nabla C^{n+1} \cdot \nabla \bar{C}^{n+1}.$$

Au sens des distributions (faible), cela devient :

$$= \int_{\Omega} \beta(\theta) \nabla C^{n+1} \cdot \nabla \bar{C}^{n+1}.$$

D'où la formulation variationnelle :

$$\begin{aligned}
\frac{\bar{x}^2}{\bar{t}} \int_{\Omega} C^{n+1} \bar{C}^{n+1} + \int_{\Omega} \Delta t \bar{u} \cdot \bar{x} \cdot \nabla u^{n+1} \cdot \nabla C^{n+1} \bar{C}^{n+1} \\
+ \Delta t \gamma \int_{\Omega} \beta(\theta) \nabla C^{n+1} \cdot \nabla \bar{C}^{n+1} = \frac{\bar{x}^2}{\bar{t}} \int_{\Omega} \bar{C}^{n+1} C^n
\end{aligned} \tag{12}$$

## 5 Simulations numériques et résultats obtenus avec FreeFem++

Le maillage des tuyaux est présenté dans la figure ci-dessous :

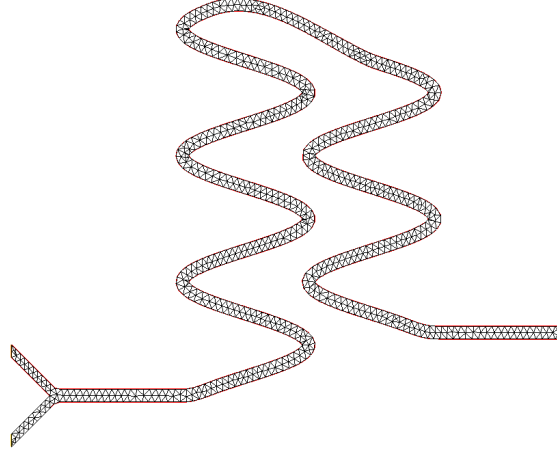
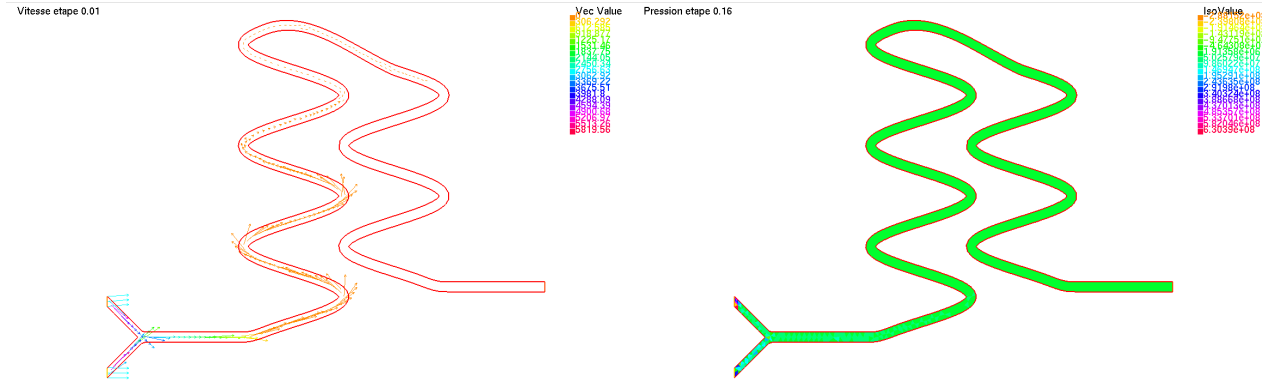


Figure 4: Maillage utilisé pour la simulation

Les itérations associées à la résolution des deux problèmes de fluide (voir 7) et du problème de mélange (voir 9), ainsi que du problème de mélange (10) approximé par (12), sont présentées ci-dessous.

Les figures suivantes illustrent les résultats de la simulation pour différentes valeurs de la concentration, de la vitesse et de la pression en fonction du temps. Chaque graphique montre l'évolution de la concentration à différents instants.



Variation de la vitesse à l'instant  $t$

Distribution de la pression à l'instant  $T_f$

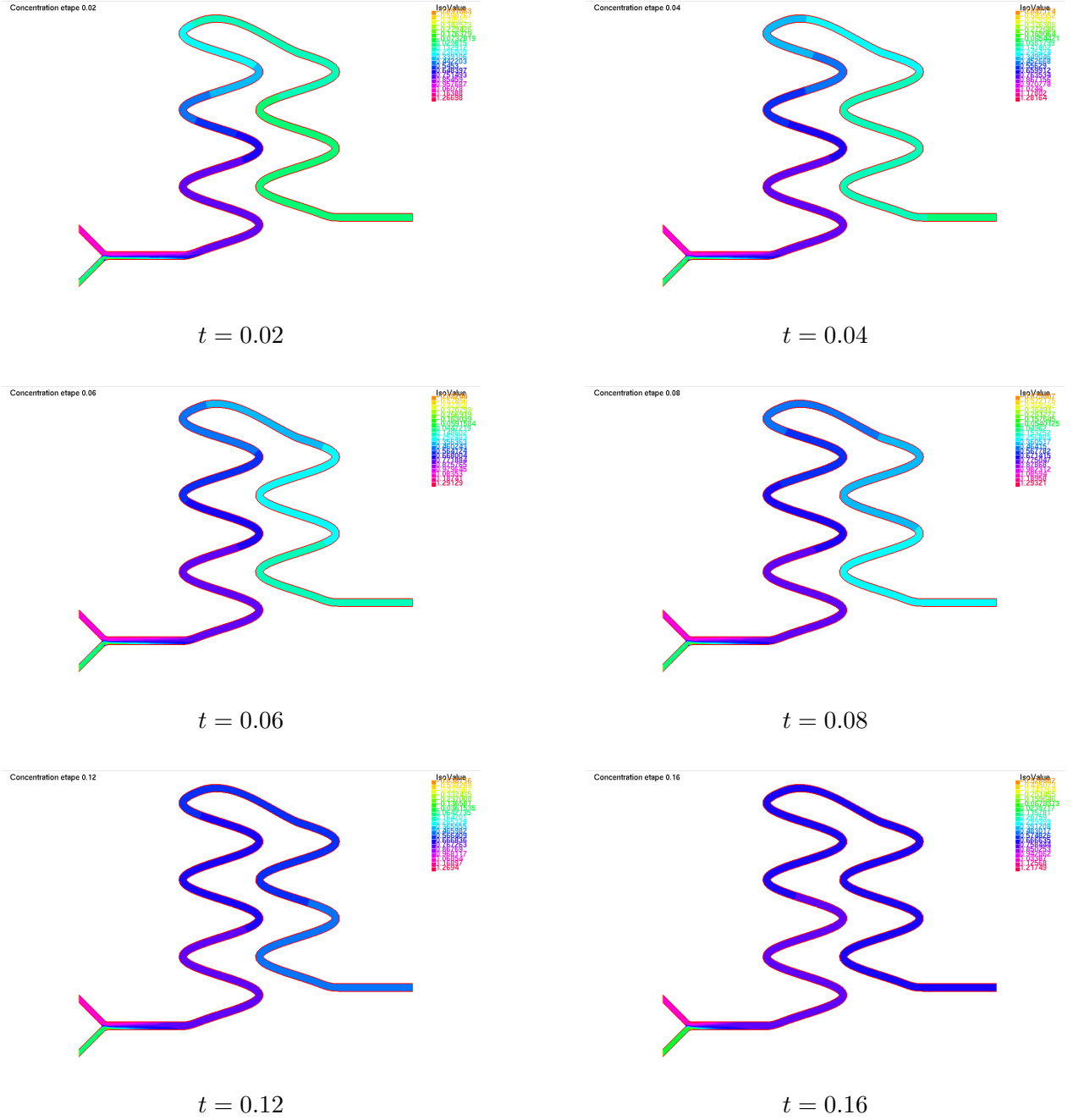


Figure 5: Évolution de la concentration au cours des itérations

L'évolution de la concentration est conforme aux attentes. En effet, une faible concentration est observée sur  $\Gamma_{\text{In}}^1$ , où la valeur est nulle, et une concentration élevée sur  $\Gamma_{\text{In}}^2$ , où la valeur atteint 1. Initialement, les fluides ne se mélangent pas instantanément. La première partie du tuyau reste dans un état où les fluides sont hétérogènes, c'est-à-dire que la concentration est égale à 1 sur la partie supérieure du tuyau, égale à 0 sur la partie inférieure, et égale à 0.85 entre les parties supérieure et inférieure. Cependant, au fil des itérations, on observe un mélange progressif des fluides, notamment au niveau des virages du tuyau, avec une concentration atteignant une valeur de  $c = \frac{1}{2}$ . Finalement, à l'instant final, l'ensemble du système microfluidique atteint une concentration homogène de  $c = \frac{1}{2}$ .

Concernant la pression, le profil est également cohérent. La pression est élevée sur  $\Gamma_{\text{in}}$  en raison de l'injection des deux fluides.

En ce qui concerne la vitesse, la forme de  $u_{\text{in}}$  ne correspond pas exactement à celle attendue dans le cas de Poiseuille, en raison de la contrainte de temps. Il n'a pas été possible de déterminer la formule exacte de la solution de Poiseuille, qui résout le problème de Stokes classique, sous l'hypothèse que la solution est constante en  $y$ . Ce dernier est généralement résolu par des équations

différentielles ordinaires (EDO) simples et des intégrations. Si le temps le permet, cette partie pourra être approfondie et ajoutée ultérieurement.