Projet industriel | Micro-fluidique, EDP et FreeFEM++

Mélissa Mansour, José Marques, Elyass Say
d $27~\mathrm{mars}~2023$



Résumé

Le but du projet est de modéliser un système micro-fluidique mélangeur, chauffeur et à débit constant. On définit d'abord la géométrie, les équations de comportement du système et les conditions limites, puis, on procède à la simulation du système à l'aide de FreeFEM++. L'ensemble du code est disponible sur github.

Table des matières

Introduction						3
1	Géo 1.1 1.2 1.3	métrie, maillage et modélisation Tuyau droit				3 3 4 5
2	Équ	ations de Navier-Stokes et écoulement				7
	2.1	Équation de Stokes instationnaire	 			7 8 9 11 11 12
	2.2	Équation de concentration				13 13 13 14 14
3	Simulations sur différentes géométries 15					
	3.1	Tuyau droit	 			15 15 16 18
	3.2	Géométrie du projet : circuit à section constante	 			20 20 24 26
	3.3	Géométries alternatives	 			27 27 29 30
Sv	$^{ m o.4}$			•	•	35
Conclusion						35

Introduction

L'objectif de ce projet est de calculer, avec le modèle proposé, l'écoulement d'un fluide dans des micro-canaux et surtout le mélange de produits dans ces micro-canaux favorisé par des chauffages locaux. Le circuit, que l'on considérera bidimensionnel et pour lequel nous effectuerons des calculs d'écoulements également bidimensionnels. Le circuit comprend une entrée pour le produit A, une entrée pour le produit B, des sections droites à température minimale et des sections en zigzag à température maximale. Les caractéristiques des trois types de sections sont les suivantes. Le circuit complet sera constitué d'une section d'injection et d'une alternance de circuits de circulation et de chauffage.

Nous commencerons alors par construire les maillages sur lesquels nus ferrons les simulations. En particulier, nous construirons un maillage simple rectangulaire, qui nous servira a faire des tests le long de notre étude, puis deux maillages représentant le système que nous voulons effectivement étudier

Ensuite, nous étudierons les équations de Navier-Stokes et de concentration, en développant les formulations variationnelles de celles-ci, et en les discréditant. Nous donnerons aussi des conditions limites réalistes physiquement à imposer à nos équations.

Enfin, nous pourrons simuler notre système de test, puis principal, et analyserons les résultats obtenus en vue de notre but, aussi bien que les phénomènes physiques et numériques qui ont pu intervenir dans les simulations.

1 Géométrie, maillage et modélisation

1.1 Tuyau droit

Une des géométries test est celle du tube droit : une entrée, deux bords, une sortie. Elle nous sert à vérifier le système dans un cas test et obtenir un écoulement de Poiseuille pour les équations de Stokes instationnaires.

Une manière de construire le tuyau droit avec la partie de chauffe est de le spécifier avec ses bords, on obtient alors ce maillage :

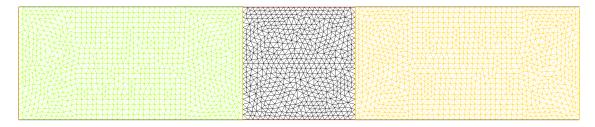


FIGURE 1 – Tube section droite, chauffe défnie géometriquement

FreeFEM++ associe directement à chaque zone un numéro de région que l'on va utiliser pour définir les propriétés des zones de chauffes. Cela demandait de définir la zone de chauffe à l'aide de border, ce qui a la conséquence de mailler les bords de cette zone à l'aide de segments. Le bord de la zone est donc défini géométriquement sur le maillage. Cela peut avoir des inconvénients en terme d'éléments finis.

Pour un maillage plus complexe, cela peut-être un inconvénient de devoir définir les bords de toutes les zones de chauffes. Ainsi, on peut également mailler directement toute la zone en ne définissant que le contour. Voici la géométrie :

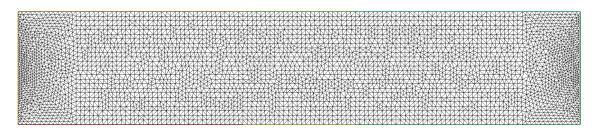


FIGURE 2 – Tuyau droit, chauffe non géométrique

1.2 Géométrie du projet - sinus superposés

On construit le circuit à l'aide d'un script FreeFEM++. On y défini la géométrie et on exporte le maillage dans un fichier .msh. Voici une première géométrie proposée :

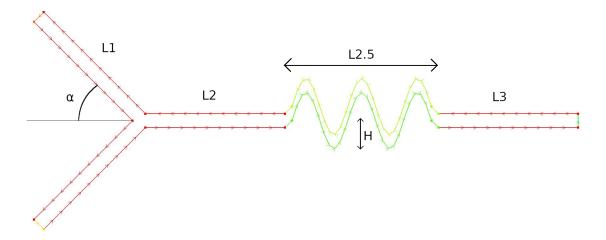


Figure 3 – Géométrie sinus superposés

Le circuit comprend 4 parties :

- 1. circuit d'injection où deux tubes viennent se joindre
- 2. circuit de circulation où les fluides progressent
- 2.5 circuit de chauffe où les fluides se mélangent
- 3. circuit de sortie

Les longueurs LX sont définies dans notre script par les variables longueurTubeX pour X entre 1 et 3. La longueur L2.5 correspond à la longueur de la partie oscillante, c'est à dire longueurOscillations.

La partie de chauffe est modélisée par deux sinus superposés, ce qui a le fâcheux inconvénient de rendre la section non constante. Cependant, la géométrie est fermée et orientée dans le sens trigonométrique. On peut la mailler et l'utiliser comme autre cas test de nos simulations. Puisset-elle être bénéfique au mélange?..

1.3 Géométrie du projet - section constante

Il nous a semblé important que le diamètre du tube soit constant. En effet, les systèmes de tuyauterie partent en général de tuyaux droits à section constante avant d'être chauffés, tordus, soudés ou assemblés. (cuivre, verre, plastique).

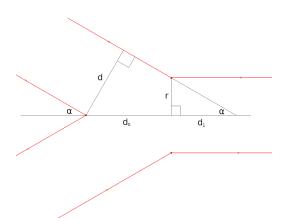


FIGURE 4 – Jonction tubes 1 et 2

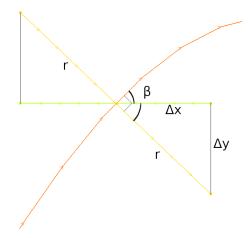


Figure 5 – Construction section constante

Afin d'obtenir un tube de section constante, nous avions déjà ajusté la jonction entre les parties 1 et 2 à l'aide de ces calculs de trigonométrie. On cherche l'abscisse $x=d_0$ (en coordonnées cartésiennes) à laquelle les tubes doivent s'arrêter.

d correspond au diamètre du tube, r au rayon.

$$\tan(\alpha) = \frac{r}{d_1}$$

$$\sin(\alpha) = \frac{d}{d_0 + d_1}$$

$$\implies d_0 = \frac{d}{\sin(\alpha)} - \frac{r}{\tan(\alpha)}$$

Pour la partie de chauffe, une manière simple de construire un "zigzag" de section constante est à l'aide d'un sinus. On regarde sa courbe paramétrée et on parcours les extrémités de la normale à la courbe d'une distance r des deux côtés.

L'angle β vérifie $\tan(\beta) = f'$ où f est la fonction sinus définie par $f(x) = H \sin(kx)$ où H est la variable hauteurOscillations. Ainsi, l'angle complémentaire de β nous donne :

$$\cos(\frac{\pi}{2} - \beta) = \sin(\beta) = \frac{\Delta x}{r}$$
$$\sin(\frac{\pi}{2} - \beta) = \cos(\beta) = \frac{\Delta y}{r}$$
$$\implies \Delta x = r \sin(\beta), \Delta y = r \cos(\beta)$$

Un autre problème déjà adressé était celui de la jonction entre le circuit de circulation et celui de chauffe. Une jonction en ligne droite avec un segment n'est pas satisfaisante,

les pentes de départ et d'arrivées ne correspondent pas. Une telle jonction polynomiale à l'aide d'une fonction f entre deux points $A(x_A,y_A)$ et $B(x_B,y_B)$ impose 4 équations. Si elles sont indépendantes (c'est le cas étant donné qu'on translate un peu la section de chauffe pour avoir de beaux raccords), ce système admet une unique solution pour un polynôme à 4 coefficients/inconnues, c'est à dire de degré 3 :

On effectue cette régression polynomiale qui sera une interpolation étant donné le rang de la matrice de régression, dite de Vandermonde, au sein de ce système $X\beta = Y$.

A défaut d'inverser plusieurs systèmes en différents points, on l'inverse pour A = (0,0), B = (1,1), $p_A = 0$, $p_B = f'(0) = H \cdot k$ quitte à devoir adapter les pentes en fonction de la transformation affine appliquée.

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \implies X^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -3 & 3 & -2 & -1 \\ 2 & -2 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Voici la géométrie et un maillage pour un pas $h = \frac{\text{diamètre}}{10} = 10^{-7} m$:

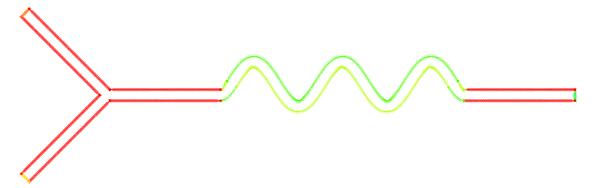


FIGURE 6 – Géométrie tube section constante

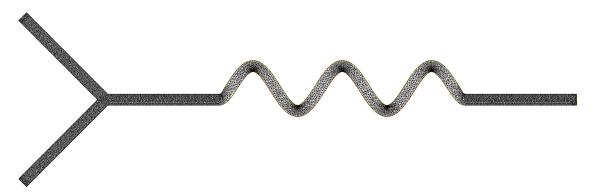


FIGURE 7 – Maillage tube section constante, $h = \frac{\bar{x}}{10} = 10^{-7} m$

Nous venons de définir la géométrie de notre système avec les dimensions appropriées pour le problème en question. Nous avons alors construit avec des raisonnements géométriques et algébriques nos maillages. À l'issue de cette partie, nous avons trois maillages différents, un rectangulaire, un de tube avec des sinus superposés et finalement un maillage de tube à section constante.

Analysons ensuite les équations de notre problème, dans le but de les discrétiser et pouvoir les implémenter numériquement aux maillages que nous venons de construire.

Équations de Navier-Stokes et écoulement

2.1Équation de Stokes instationnaire

On écrit les équations de Navier-Stokes pour un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ et T > 0 un temps final :

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \rho \mathbf{g} - \nabla p + \eta \Delta \mathbf{u}$$
$$\operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0 \tag{1}$$

Les termes correspondent de gauche à droite aux termes d'inertie, de convection, de pesanteur de pression et de viscosité. L'incompressiblité du fluide se traduit par $\operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0$. Avec comme paramètres et inconnues :

- ρ la masse volumique du fluide (eau)
- $--\eta$ sa viscosité dynamique
- g la pesanteur
- **u** le champ vectoriel de vitesse de $\Omega \times [0, T]$ dans \mathbb{R}^3
- p le champ scalaire de pression de $\Omega \times [0,T]$ dans \mathbb{R}

On effectue un adimensionnement afin de déterminer quels sont les phénomènes pertinents pour notre étude : On pose : $x = \bar{x}X$, $t = \bar{t}T$, $u = \bar{u}U$, $p = \bar{p}P$ et Re $= \frac{\rho \bar{x}\bar{u}}{n}$. L'équation devient :

$$\frac{\rho \bar{x}^2}{\eta \bar{t}} \frac{\partial U}{\partial T} + \text{Re}(U \cdot \nabla_X) U = \frac{\rho \bar{x}^2}{\eta \bar{u}} g - \frac{\bar{x} \bar{p}}{\eta \bar{u}} \nabla_X P + \Delta_X U$$

Étant donné les dimensions du système :

- $\begin{array}{lll} & -\rho = 10^3 \ kg \ m^{-3} \\ & -\bar{x} = 10^{-6} \ m \\ & -\bar{u} = 10^{-3} \ ms^{-1} \\ & -\eta = 1,003 \cdot 10^{-3} \ kg \ m^{-1} s^{-1} \end{array}$

On trouve alors $Re = \frac{10^3 10^{-6} 10^{-3}}{10^{-3}} = 10^{-3}$. On aimerait négliger la convection devant l'inertie, c'est ce terme qui donne naissance aux écoulements turbulents.

Ainsi, Re = $\frac{\rho \bar{x}\bar{u}}{\eta}$ << $\frac{\rho \bar{x}\bar{x}}{\eta \bar{t}}$ = Re_{local} \Longrightarrow \bar{u} << $\frac{\bar{x}}{\bar{t}}$ \Longrightarrow \bar{t} << $\frac{\bar{x}}{\bar{u}}$ = $\frac{10^{-6}}{10^{-3}}$ = 10^{-3} . Mais plus précisément, on peut le négliger en posant

$$\begin{split} \mathrm{Re}_{\mathrm{local}} &= \sqrt{\mathrm{Re}} = 3 \cdot 10^{-2} \\ &\implies \frac{\rho \bar{x} \bar{x}}{\eta \bar{t}} = \sqrt{\frac{\rho \bar{x} \bar{u}}{\eta}} \\ &\implies \bar{t} = \sqrt{\frac{\rho \bar{x}^3}{\eta \bar{u}}} = \sqrt{\frac{10^3 10^{-18}}{10^{-3} 10^{-3}}} = 10^{\frac{9}{2}} \approx 3 \cdot 10^{-5} \end{split}$$

En fait, ce choix n'est pas arbitraire. Le terme $\frac{\bar{x}}{\bar{t}}$ correspond à une vitesse locale. C'est la vitesse à laquelle la couche limite se déplace comparément au fluide qui se déplace à vitesse \bar{u} . Ainsi, en assurant $\bar{u}<<\frac{\bar{x}}{\bar{\tau}},$ on a négligé le terme de convection devant celui d'inertie.

Le terme de pesanteur est de l'ordre de $\frac{\rho \bar{x}^2}{\eta \bar{u}} = \frac{10^3 10^{-12}}{10^{-3} 10^{-3}} = 10^{-3} = \text{Re. On peut le négliger.}$

Pour évaluer le terme de pression $\frac{\bar{x}\bar{p}}{\rho\eta\bar{u}}$, on suppose un écoulement de Poiseuille plan pour évaluer \bar{p} , la démonstration est faite en (2.1.2). On peut montrer que ce terme est plus grand que $\sqrt{\text{Re si}}$:

$$\bar{u} = \frac{\bar{x}^2 \bar{p}}{2\eta L} \implies \bar{p} = \frac{2\bar{u}\eta L}{\bar{x}^2} \approx \frac{2 \cdot 10^{-3} \cdot 10^{-3} \cdot L}{10^{-12}} = 2 \cdot 10^6 L$$

$$\implies \frac{\bar{x}\bar{p}}{\rho\eta\bar{u}} = \frac{10^{-6} \cdot 2 \cdot 10^6 L}{10^3 \cdot 10^{-3} \cdot 10^{-3}} = 2 \cdot 10^3 L$$

$$\frac{\bar{x}\bar{p}}{\rho\eta\bar{u}} > \sqrt{\text{Re}} \implies 2 \cdot 10^3 L > 3 \cdot 10^{-2} \implies L > 1, 5 \cdot 10^{-5} m = 15 \mu m = 15 \bar{x}$$

Ce ne sera pas vérifié pour nos simulations car un tuyau 15 fois plus long que large n'est pas très photogénique. Comme seul le terme de pression dépend de la longueur caractéristique, la changer ne change pas les autres termes. On prendra $L=5\bar{x}$ afin de mieux voir le fluide. Un facteur $\frac{1}{3}$ ne fait pas changer l'ordre de grandeur du terme de pression.

On obtient l'équation de Stokes instationnaire adimensionnée :

$$\sqrt{\text{Re}} \frac{\partial U}{\partial T} = -\frac{\bar{x}\bar{p}}{\rho\eta\bar{u}} \nabla_X P + \Delta_X U$$

Et l'équation de Stokes instationnaire

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla p + \eta \mathbf{\Delta u}$$

2.1.1 Formulation variationnelle générale

Lors de l'implémentation en 2D dans FreeFEM++, on se contentera de manipuler l'équation de départ ainsi que les constantes :

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{u} \tag{2}$$

Comme \mathbf{u} est un champ vectoriel, $\Delta \mathbf{u}$ est un laplacien vectoriel. On note ici tous les vecteurs ou matrices en gras. On rappelle le théorème de Stokes et une formule d'analyse vectorielle :

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{v}) = \int_{\partial \Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \qquad \operatorname{div}(p\mathbf{v}) = \nabla p \cdot \mathbf{v} + p \operatorname{div}(\mathbf{v})$$

Les conditions limites aux bords sont mixtes. On prend $H^1(\Omega, \mathbb{R}^2)$ comme espace variationnel pour la vitesse et $L^2(\Omega, \mathbb{R})$ pour la pression en premier lieu. Soit $\mathbf{v} \in H^1(\Omega, \mathbb{R}^2)$, (2) devient :

$$\rho \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{v} = -\int_{\Omega} \nabla p \cdot \mathbf{v} + \eta \int_{\Omega} \Delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$$

$$= -\int_{\Omega} \left[\operatorname{div}(p\mathbf{v}) - p \operatorname{div}(\mathbf{v}) \right] + \eta \int_{\Omega} \Delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$$

$$= \int_{\Omega} p \operatorname{div}(\mathbf{v}) - \int_{\partial \Omega} p \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} + \eta \int_{\Omega} \Delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$$

Le Laplacien vectoriel ne permet pas immédiatement d'avoir la formulation variationnelle, on le développe :

$$\int_{\Omega} \Delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \int_{\Omega} \Delta u_x \cdot v_x + \Delta u_y \cdot v_y$$

On applique ensuite la formule de Stokes qui est le théorème de Stokes avec la fonction $p\mathbf{v}$ et la formule d'analyse vectorielle pour la divergence, en prenant $\mathbf{v} = \nabla u$ et en remarquant que $\operatorname{div}(\nabla u) = \Delta u$. On obtient la formule de Stokes en remplaçant p par v, fonction scalaire :

$$-\int_{\Omega} \Delta u \cdot v = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v - \int_{\partial \Omega} v \nabla u \cdot \mathbf{n}$$

On termine le calcul où on voit apparaître la trace de Neumann $\partial_{\mathbf{n}} u_x = \mathbf{n} \cdot \nabla u_x$ avec $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} = \begin{bmatrix} \partial_{\mathbf{n}} u_x \\ \partial_{\mathbf{n}} u_y \end{bmatrix}$

$$-\int_{\Omega} \Delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \int_{\Omega} \nabla u_x \cdot \nabla v_x + \nabla u_y \cdot \nabla v_y - \int_{\partial \Omega} v_x \mathbf{n} \cdot \nabla u_x + v_y \mathbf{n} \cdot \nabla u_y$$
$$= \int_{\Omega} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} - \int_{\partial \Omega} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} \cdot \mathbf{v}$$

Il reste le terme d'incompressibilité de **u**. Soit $q \in L^2(\Omega, \mathbb{R})$, on a $\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{u}) q = 0$. L'équation (2) devient :

$$\rho \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{v} = \int_{\Omega} \left[p \operatorname{div}(\mathbf{v}) - \eta \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} \right] + \int_{\partial \Omega} \left[\eta \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} - p \mathbf{n} \right] \cdot \mathbf{v}$$

Si le champ de vitesse **u** est stationnaire/permanent, il ne dépend pas du temps et on obtient la formulation variationnelle de l'équation de Stokes stationnaire :

$$\int_{\Omega} \left[p \operatorname{div}(\mathbf{v}) - \eta \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} \right] + \int_{\partial \Omega} \left[\eta \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} - p \mathbf{n} \right] \cdot \mathbf{v} = 0$$

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{u}) q = 0$$
(3)

Sinon, il reste à discrétiser la dérivée temporelle à l'aide d'un schéma numérique. Soit $\tau > 0$ un pas de discrétisation temporelle. On pose $\mathbf{u}^m(\mathbf{x}) = \mathbf{u}(\mathbf{x}, m\tau), m \in \mathbb{N}$.

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}(\mathbf{x}, m\tau) = \lim_{h \to 0} \frac{\mathbf{u}(\mathbf{x}, m\tau + h) - \mathbf{u}(\mathbf{x}, m\tau)}{h}$$
$$\approx_{h \sim \tau} \frac{\mathbf{u}^{m+1}(\mathbf{x}) - \mathbf{u}^{m}(\mathbf{x})}{\tau}$$

On calcule donc les valeurs de

 $\mathbf{u}(\mathbf{x},t)$ pour les instants $t \in \{\tau, 2\tau, \dots, N\tau\}, \ N = \lfloor \frac{T}{\tau} \rfloor$, à l'aide de

 $\mathbf{u}^m(\mathbf{x})$ pour les entiers $m \in \{1, 2, \dots, N\}$

Reste à décider si on utilise $\mathbf{u}^{m+1}(\mathbf{x})$ ou $\mathbf{u}^m(\mathbf{x})$ pour le membre stationnaire de l'équation. On va choisir à l'aide d'une variable, soit $s \in [0,1]$, (2) devient :

$$\frac{\rho}{\tau} \int_{\Omega} \left[\mathbf{u}^{m+1} - \mathbf{u}^{m} \right] \cdot \mathbf{v} = \int_{\Omega} \left[p \operatorname{div}(\mathbf{v}) - \eta \nabla \mathbf{u}^{m+s} : \nabla \mathbf{v} \right] + \int_{\partial \Omega} \left[\eta \frac{\partial \mathbf{u}^{m+s}}{\partial \mathbf{n}} - p \mathbf{n} \right] \cdot \mathbf{v}$$
$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{u}^{m+s}) q = 0$$

On distingue les cas suivants :

s=0: schéma d'Euler explicite

s=1: schéma d'Euler implicite

Il reste à ajouter l'influence de la température θ sur la viscosité, c'est un coefficient qu'on insère devant le terme de viscosité en $\Delta \mathbf{u} \mapsto \alpha(\theta, \mathbf{x}) \Delta \mathbf{u}$, $\alpha(\theta, \mathbf{x}) : \mathbb{R} \times \Omega \mapsto [0, 1]$

On obtient alors la formulation variationnelle de l'équation de Stokes instationnaire :

$$\forall (v,q) \in H^{1}(\Omega, \mathbb{R}^{2}) \times L^{2}(\Omega, \mathbb{R})$$

$$\begin{cases} \frac{\rho}{\tau} \int_{\Omega} \left[\mathbf{u}^{m+1} - \mathbf{u}^{m} \right] \cdot \mathbf{v} = \int_{\Omega} \left[p \operatorname{div}(\mathbf{v}) - \alpha(\theta, \mathbf{x}) \eta \left[\nabla \mathbf{u}^{m+s} : \nabla \mathbf{v} \right] \right] \\ + \int_{\partial \Omega} \left[\alpha(\theta, \mathbf{x}) \eta \frac{\partial \mathbf{u}^{m+s}}{\partial \mathbf{n}} - p \mathbf{n} \right] \cdot \mathbf{v} \\ \int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{u}^{m+s}) q = 0 \end{cases}$$

$$(4)$$

2.1.2 Conditions limites aux bords

Maintenant qu'on a notre formulation variationnelle générale, il reste à savoir quelles conditions au bords on veut lui appliquer. On se demande si on veut une condition limite en pression ou en vitesse en entrée :

Soit $p_{\text{entrée}}$ en entrée, p_{sortie} en sortie, et $\mathbf{u} = 0$ au temps initial $(u^0 = 0)$.

Soit $\mathbf{u} = \mathbf{u}_{\text{ini}}$ en entrée avec un profil de Poiseuille, et $\mathbf{u} = 0$ au temps initial ($u^0 = 0$).

Les simulations pour les conditions initiales en entrées sont faites plus tard. Étant donné ces résultats, on choisit d'imposer une pression en entrée, on la calcule à l'aide du profil de l'écoulement de Poiseuille afin d'avoir une vitesse \bar{u} d'écoulement. On a déjà utilisé ce résultat en (2.1). Redémontrons-le:

Dans le cas d'un écoulement stationnaire, on modélise le tube par un tube infini avec les équations de Stokes stationnaires. Le problème est symétrique par translation selon x, la vitesse

 $\mathbf{u} = \begin{bmatrix} ux \\ uy \end{bmatrix}$ ne dépend pas de $x : \frac{\partial u_x}{\partial x} = \frac{\partial u_y}{\partial x} = 0$.

L'hypothèse d'incompressibilité devient $\operatorname{div}(\mathbf{u}) = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} = \frac{\partial u_y}{\partial y} = 0$ donc u_y ne dépend ni de x ni de y. L'hypothèse d'adhérence aux parois / vitesse nulle au bords neutres donne alors $u_{\nu}(\mathbf{x}) = 0$ pour tout $\mathbf{x} \in \Omega$.

On écrit les équations de Stokes

$$\eta \Delta \mathbf{u} - \nabla p = 0 \implies \begin{bmatrix} \eta \frac{\partial^2 u_x}{\partial^2 x} + \eta \frac{\partial^2 u_x}{\partial^2 y} - \frac{\partial p}{\partial x} \\ \eta \frac{\partial^2 u_y}{\partial^2 x} + \eta \frac{\partial^2 u_y}{\partial^2 y} - \frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix} = 0 \implies \begin{bmatrix} \eta \frac{\partial^2 u_x}{\partial^2 y} - \frac{\partial p}{\partial x} \\ -\frac{\partial p}{\partial y} \end{bmatrix} = 0 \\
\implies u_x = \frac{\partial p}{2\eta \partial x} (R^2 - r^2) \implies u_x = \frac{\Delta p}{2\eta L} (R^2 - r^2)$$

En particulier, $\frac{\partial p}{\partial x}$ est égal à une expression qui ne dépend pas de x, c'est donc une constante. On peut donc l'approximer par $\frac{p_{\text{sortie}} - p_{\text{entrée}}}{\Delta x} = \frac{\Delta p}{L}$. Pour nos tuyaux, au milieu de l'écoulement, on

Finalement,
$$\Delta p = \bar{p} = \frac{8\bar{u}\eta L}{\bar{x}^2} = 8\frac{10^{-3}10^{-3}L}{10^{-12}} = 8\cdot 10^6L$$
. Pour nos simulations, on remplace L par la longueur caractéristique des tuyaux.

On fait l'hypothèse d'adhérence de la couche limite : $\mathbf{u} = 0$ sur les bords latéraux / neutres. On note $\Gamma_{\text{latéraux}}$ les bords latéraux de Ω (les paroies du tube). Ainsi, la fonction test va annuler l'intégrale de bord sur $\Gamma_{\rm latéraux}$

Pour les conditions en entrée et en sortie, le terme de bord est de la forme $[\eta \partial_{\bf n} {\bf u} - p {\bf n}] \cdot {\bf v}$ modulo le terme en alpha sans unité. Si on a pas de condition sur la vitesse en entrée, il reste le terme $\eta \partial_{\mathbf{n}} \mathbf{u} - p\mathbf{n}$ qui est homogène à une pression : η en $Pa \cdot s$, $\partial_{\mathbf{n}} \mathbf{u}$ en s^{-1} et p en Pa. Ainsi, ce terme représente les contraintes au niveau de la paroi. Comme la normale est vers l'extérieur, on impose une pression extérieure en posant

$$\eta \partial_{\mathbf{n}} \mathbf{u} - p \mathbf{n} = -p_{\text{ext}} \mathbf{n} \implies \eta \partial_{\mathbf{n}} \mathbf{u} = (p - p_{\text{ext}}) \mathbf{n}$$

Si la pression extérieure est supérieure à la pression au niveau de la paroi, $p-p_{\rm ext}<0$, le flux de ${\bf u}$ selon la normale est négatif, le fluide ralenti dans la direction de la normale.

En sortie, le fluide sort du tube dans la direction de la normale, il est ralenti par p_{ext} . En entrée, le fluide rentre dans le tube opposé à la normale, il est accéléré par $p_{\rm ext}$.

On résume ces conditions aux limites (en pression) ci-dessous :

$$\begin{cases} u = 0 \text{ sur } \Gamma_{\text{latéraux}} \\ \alpha(\theta, \mathbf{x}) \eta \partial_{\mathbf{n}} \mathbf{u} - p \mathbf{n} = -p_{\text{entrée}} \mathbf{n} \text{ sur } \Gamma_{\text{entrée}} \\ \alpha(\theta, \mathbf{x}) \eta \partial_{\mathbf{n}} \mathbf{u} - p \mathbf{n} = -p_{\text{sortie}} \mathbf{n} \text{ sur } \Gamma_{\text{sortie}} \end{cases}$$
(5)

En fait, on peut montrer que le flux de \mathbf{u} à travers la normale $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} = \partial_{\mathbf{n}} \mathbf{u}$ est quasi-nul dans tous les cas sur les bords. Les tubes ont des sections constantes donc on s'attend à des profils de type Poiseuille que ce soit en régime stationnaire ou permanent.

Si on impose les pressions, le fluide se mets immédiatement en mouvement (voir les simulations) et le long des lignes de courant, la vitesse ne change pas. Ainsi, les gradients de vitesses ∇u_x et ∇u_y sont orthogonaux aux lignes de courants. Or les lignes de courant sont parallèles aux normales sur les bords d'entrée et de sortie. Donc $\mathbf{n} \cdot \nabla u_x = \mathbf{n} \cdot \nabla u_y = 0 \implies \partial_{\mathbf{n}} \mathbf{u} = 0$.

Si on impose les vitesses (Dirichlet inhomogène), c'est à l'aide d'un profil de Poiseuille, qui est un profil à flux nul : la vitesse est selon la normale et varie orthogonalement à la normale, donc

En fait, on va prendre $H_0^1(\Omega,\mathbb{R}^2)$ qui annule tous les termes de bord et faire un relèvement.

2.1.3 Méthode de Galerkin et espaces éléments finis

On va donc à présent considérer l'espace variationnel $H^1_{0,\Gamma_{\text{latéraux}}}(\Omega,\mathbb{R}^2)$ pour la vitesse et $L^2(\Omega,\mathbb{R})$ pour la pression.

En injectant les conditions limites à la formulation variationnelle générale (4), le problème variationnel continu devient :

$$\forall (v, q) \in H_{0, \Gamma_{\text{lat\'eraux}}}^{1}(\Omega, \mathbb{R}^{2}) \times L^{2}(\Omega, \mathbb{R})$$

$$\begin{cases} \frac{\rho}{\tau} \int_{\Omega} \left[\mathbf{u}^{m+1} - \mathbf{u}^{m} \right] \cdot \mathbf{v} = \int_{\Omega} \left[p \operatorname{div}(\mathbf{v}) - \alpha(\theta, \mathbf{x}) \eta \left[\nabla \mathbf{u}^{m+s} : \nabla \mathbf{v} \right] \right] \\ + \int_{\Gamma_{\text{entr\'ee}}} -p_{\text{entr\'ee}} \, \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} + \int_{\Gamma_{\text{sortie}}} -p_{\text{sortie}} \, \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} \\ \int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{u}) \, q = 0 \end{cases}$$

$$(6)$$

Finalement, en discrétisant la vitesse et la pression sur un maillage en espace avec une méthode éléments finis de Galerkin (on considère des sous-espaces vectoriels de dimensions finies $X_h \subset H^1_{0,\Gamma_{\mathrm{latéraux}}}(\Omega)$ et $M_h \subset L^2(\Omega,\mathbb{R})$ tels que $X_h \xrightarrow[h \to 0]{} H^1_{0,\Gamma_{\mathrm{latéraux}}}(\Omega)$ et $M_h \xrightarrow[h \to 0]{} L^2(\Omega)$), on obtient la formulation variationnelle discrétisée en temps et en espace :

À chaque pas de temps, on cherche $(\mathbf{u}_{\mathbf{h}}^{\mathbf{m}+1}, p_h^{m+1}) \in X_h \times M_h$ tels que :

que pas de temps, on cherche
$$(\mathbf{u_h}^{-}, p_h^{-}) \in X_h \times M_h$$
 tels que :
$$\forall (\mathbf{v_h}, q_h) \in X_h \times M_h$$

$$\left\{ \frac{\rho}{\tau} \int_{\Omega} \left[\mathbf{u}_h^{m+1} - \mathbf{u}_h^m \right] \cdot \mathbf{v}_h = \int_{\Omega} \left[p_h^{m+1} \operatorname{div}(\mathbf{v}_h) - \alpha_h(\theta, \mathbf{x}) \eta \left[\nabla \mathbf{u}_h^{m+s} : \nabla \mathbf{v}_h \right] \right] + \int_{\Gamma_{\text{entrée}}} -p_{\text{entrée}} \, \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_h + \int_{\Gamma_{\text{sortie}}} -p_{\text{sortie}} \, \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_h$$

$$\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{u}_h^{m+s}) \, q_h = 0$$

$$(7)$$

En pratique, afin d'avoir une méthode convergente, on prend pour la vitesse des éléments \mathbb{P}_2 -Lagrange et pour la pression des éléments \mathbb{P}_1 -Lagrange.

2.1.4 Existence et unicité de la solution

Pour démontrer l'existence et l'unicité de la solution à chaque pas de temps, on utilise le théorème de Nécas :

Théorème: Soient X et M des espaces de Hilbert, $f \in X'$ et des formes bilinéaires $a \in L(X \times X, \mathbb{R})$ et $b \in L(M \times X, \mathbb{R})$. Alors, si :

- (i) a est coercive
- (ii) la condition inf-sup est satisfaite

Le problème mixte :

$$\begin{cases} (u, p) \in X \times M \text{ tq :} \\ a(u, v) + b(p, v) = \langle f, v \rangle & \forall v \in X \\ b(q, u) = 0 & \forall q \in M \end{cases}$$

admet une unique solution $(u, p) \in X \times M$.

Dans notre contexte, en posant $X = H^1(\Omega, \mathbb{R}^2)$ et $M = L^2(\Omega, \mathbb{R})$ qui sont des espaces de Hilbert :

$$\begin{split} a(u,v) &= \frac{\rho}{\tau} \int_{\Omega} uv + \int_{\Omega} \alpha(\theta,x) \eta \nabla u : \nabla v \\ b(q,v) &= -\int_{\Omega} \operatorname{div}(v) \, q \\ \langle f,v \rangle &= \frac{\rho}{\tau} \int_{\Omega} u^m v - \int_{\partial \Omega} p \, n \cdot v \text{ (en supposant } u^m \text{ connue)} \end{split}$$

On retombe bien sur le problème (6) (formulation variationnelle discrétisée en temps). Il s'agit à présent de démontrer que ce théorème s'applique bien à notre problème.

(i) Vérifions si a est coercive :

Soit $v \in X$ tel que $\forall q \in M, b(q, v) = 0$.

$$\begin{split} a(v,v) &= \frac{\rho}{\tau} ||v||_{L^2(\Omega)}^2 + \int_{\Omega} \alpha(\theta) \eta |\nabla v|^2 \\ &\geq \frac{\rho}{\tau} ||v||_{L^2(\Omega)}^2 + \eta \min_{\bar{\Omega}} \alpha(\theta) \, ||\nabla v||_{L^2(\Omega)}^2, \, \text{car } \alpha \text{ est continue sur } \bar{\Omega} \\ &\geq \min(\frac{\rho}{\tau}, \eta \min_{\bar{\Omega}} \alpha(\theta)) \, ||v||_{H^1(\Omega)}^2 \\ &\geq C \, \, ||v||_{H^1(\Omega)}^2, \, \text{où on pose } C = \min\left(\frac{\rho}{\tau}, \eta \min_{\bar{\Omega}} \alpha(\theta, \mathbf{x})\right) > 0 \end{split}$$

Finalement, a est coercive.

(ii) Un résultat connu donne que l'opérateur divergence est surjectif de $H^1(\Omega)_{0,\Gamma_{\text{latéraux}}}$ dans $L^2(\Omega)$ et on démontre alors que la condition inf-sup est bien satisfaite.

Ainsi, le problème variationnel continu (6) admet une unique solution $(u, p) \in H^1(\Omega)_{0,\Gamma_{\text{latéraux}}} \times L^2(\Omega)$, et il en est de même pour la méthode de Galerkin (7) puisque X_h et M_h sont de dimensions finies et inclus dans $H^1(\Omega)_{0,\Gamma_{\text{latéraux}}}$ et $L^2(\Omega)$. \square

2.1.5 Paramètres de simulation

Le temps caractéristique d'évolution de la vitesse pour voir la variation de la variation de la vitesse dépend naturellement de l'accélération. En régime stationnaire, on s'attend à ce que $u=\bar{u}$. Ainsi, u passe de 0 à \bar{u} en un temps T. L'accélération maximale est de l'ordre de $\frac{\bar{u}}{T}$.

L'ordre de grandeur de l'accélération \bar{a} est donné par le coefficient devant le terme inertiel dans l'équation de Stokes adimensionnée (avant la division) Ce terme est $\bar{a} = \frac{\rho \bar{u}}{\bar{t}}$. On pose alors :

$$\bar{a} = \frac{\bar{u}}{T} \implies \frac{\rho \bar{u}}{\bar{t}} = \frac{\bar{u}}{T} \implies T = \frac{\bar{t}}{\rho} = 3 \cdot 10^{-8} s$$

En supposant une évolution exponentielle de la vitesse, la vitesse finale est atteinte au bout de 5 temps caractéristiques. On prend donc $T = \frac{5\bar{t}}{\rho} = 1, 5 \cdot 10^{-7} s$

2.2 Équation de concentration

On veut étudier le mélange de substances, soit $c \in \Omega \times [0, T]$. L'équation d'advection-diffusion / convection-diffusion / transport-diffusion sous-jacente est :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = \operatorname{div}(\gamma \beta(\mathbf{x}, \theta) \nabla c) \tag{8}$$

Le champ de vecteur **u** est un champ vitesse obtenu par la simulation des équations de Stokes stationnaires ou instationnaires (qui donne un profil de Poiseuille).

La fonction $\beta(\mathbf{x}, \theta)$ est une fonction croissante de la température. D'après la loi de Stokes-Einstein, le coefficient de diffusion $\gamma\beta(\mathbf{x}, \theta)$ est proportionnel à la température et inversement proportionnel à la viscosité. Il s'écrit

$$\gamma \beta(\mathbf{x}, \theta) = \frac{k\theta}{6\pi \eta r} \implies \gamma = \frac{k}{6\pi \eta r}, \quad \beta(\mathbf{x}, \theta) = \theta(\mathbf{x})$$

où k est la constante de Boltzmann et r le rayon d'une particule de fluide. $\beta(\mathbf{x}, \theta) = \theta(\mathbf{x})$ qui est une fonction qui donne la température en Kelvin en fonction de la position \mathbf{x} . Donc (8) devient :

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

2.2.1 Conditions limites aux bords

Les conditions au bords sont :

$$\frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}} = \partial_{\mathbf{n}} c = 0$$
 sur les bords latéraux / neutres $c(\mathbf{x}, t) = \bar{c} = 200 \, kgm^{-3}, \forall t \in [0, T]$ en entrée

La condition de Neumann va venir naturellement annuler l'intégrale de bord pour les termes latéraux. Et la condition de Dirichlet non homogène demande de faire un relèvement, donc la fonction test va annuler l'intégrale sur le bord d'entrée.

2.2.2 Formulation variationnelle

Les conditions au bords sont mixtes et on impose une concentration sur $\Gamma_{\text{entrée}}$: on prend comme espace variationnel $H^1_{0,\Gamma_{\text{entrée}}}(\Omega)$.

Soit v un élément de cet espace :

$$\begin{split} \int_{\Omega} \frac{\partial c}{\partial t} \cdot v &= \gamma \int_{\Omega} \operatorname{div} \left[\theta(\mathbf{x}) \nabla c \right] \cdot v - \int_{\Omega} \left[\mathbf{u} \cdot \nabla c \right] v \\ &= \gamma \left[\int_{\partial \Omega} \theta(\mathbf{x}) \nabla c \cdot \mathbf{n} v - \int_{\Omega} \theta(\mathbf{x}) \nabla c \cdot \nabla v \right] - \int_{\Omega} \left[\mathbf{u} \cdot \nabla c \right] v \\ &= \gamma \int_{\partial \Omega} \theta(\mathbf{x}) \nabla c \cdot \mathbf{n} v - \int_{\Omega} \left[\gamma \theta(\mathbf{x}) \nabla c \cdot \nabla v + \nabla c \cdot \mathbf{u} v \right] \end{split}$$

On discrétise la dérivée temporelle comme précédemment avec $s \in [0,1], m \in \mathbb{N}$, (8) devient (9)

$$\forall v \in H_{0,\Gamma_{\text{entrée}}}^{1}(\Omega)$$

$$\boxed{\frac{1}{\tau} \int_{\Omega} \left[c^{m+1} - c^{m} \right] \cdot v = -\int_{\Omega} \left[\gamma \theta(\mathbf{x}) \nabla c^{m+s} \cdot \nabla v + \nabla c^{m+s} \cdot \mathbf{u} v \right] + \gamma \int_{\partial \Omega} \theta(\mathbf{x}) \nabla c^{m+s} \cdot \mathbf{n} v}$$

$$(9)$$

On peut construire la fonction $\theta(\mathbf{x})$ en interpolant à l'aide d'éléments \mathbb{P}_1 une fonction de température constante sur les différents circuits.

Enfin, en injectant les conditions limites à la formulation variationnelle générale (7), le problème variationnel continu devient :

$$\forall v \in H_{0,\Gamma_{\text{entrée}}}^{1}(\Omega)$$

$$\frac{1}{\tau} \int_{\Omega} \left[c^{m+1} - c^{m} \right] \cdot v = -\int_{\Omega} \left[\gamma \theta(\mathbf{x}) \nabla c^{m+s} \cdot \nabla v + \nabla c^{m+s} \cdot \mathbf{u} v \right] + \gamma \int_{\Gamma_{\text{sortie}}} \theta(\mathbf{x}) \partial_{\mathbf{n}} c^{m+s} v$$
(10)

2.2.3 Méthode de Galerkin et espaces éléments finis

Finalement, en discrétisant (sur un maillage) en espace avec une méthode éléments finis (on considère un sous-espace vectoriel de dimension finie $P_h \subset H^1_{0,\Gamma_{\text{entrée}}}(\Omega)$), on obtient la formulation variationnelle discrétisée en temps et en espace :

variationnelle discrétisée en temps et en espace : À chaque pas de temps, on cherche $c_h^{m+1} \in P_h$ tel que :

$$\forall v_h \in P_h$$

$$\left[\frac{1}{\tau} \int_{\Omega} \left[c_h^{m+1} - c_h^m \right] \cdot v_h = - \int_{\Omega} \left[\gamma \theta(\mathbf{x_h}) \nabla c_h^{m+s} \cdot \nabla v_h + \nabla c_h^{m+s} \cdot \mathbf{u_h} v_h \right] + \gamma \int_{\Gamma_{\text{sortie}}} \theta(\mathbf{x_h}) \partial_{\mathbf{n}} c_h^{m+s} v \right]$$

$$(11)$$

En pratique, afin d'avoir des fonctions lisses, on prend pour la concentration des éléments \mathbb{P}_2 -Lagrange (comme pour la vitesse).

2.2.4 Paramètres de simulation

Ici on veut déterminer le temps caractéristique de déplacement de la concentration. En fait, le terme de convection va dominer et l'ordre de temps T va être de :

$$\bar{u} = \frac{L}{T} \implies T = \frac{L}{\bar{u}}$$

Pour déterminer la valeur de γ , on regarde le rayon des molécules du solvant. Si c'est l'eau, ce rayon vaut 0.17 nanomètres $=0.17\cdot 10^{-9}m=1.7\cdot 10^{-10}$.

Pour que la loi de Stokes-Einstein soit vérifiée, il faut que les molécules du soluté aient un rayon beaucoup plus élevé que celles d'eau afin de voir apparaître des forces de viscosité.

Disons
$$r = 10^{-8} m$$
. Donc $\frac{\gamma}{r} \approx 7.32 \cdot 10^{-14}$

$$\gamma\beta(\mathbf{x},\theta) = \gamma\theta(\mathbf{x}) = \frac{k\theta}{6\pi\eta r} \approx \frac{1,38\cdot 10^{-23}\theta}{6\pi 10^{-3}r} \approx 7,32\cdot 10^{-22} \times \frac{1}{r} \times \theta(\mathbf{x})$$

Ainsi, nous avons discuté des conditions limites à imposer aux équations de Navier-Stokes et de concentration de notre problème. Nous avons ensuite discrétisé en temps et espace ces équations, dans les espaces variationnels appropriés. De plus, en anticipation de la partie qui suit, nous avons déterminé les paramètres de notre simulation.

Nous sommes alors finalement en mesure de pouvoir simuler nos équations sur notre maillage. Nous analyserons alors dans la suite les résultats de nos simulations.

3 Simulations sur différentes géométries

3.1 Tuyau droit

3.1.1 Écoulement de Poiseuille sur tuyau droit

Comme expliqué en (2.1), on peut soit imposer des pression d'entrée et de sortie afin de retrouver le profil de Poiseuille, ou imposer le profil parabolique de Poiseuille directement.

Le tuyau qu'on considère fait une longueur $L = 5 \cdot \bar{x} = 5 \cdot 10^{-6} m$.

La zone de chauffe fait une longueur $Lc=\bar{x}$. La pression à imposer en entrée pour avoir une vitesse \bar{u} vaut donc

 $p_{\text{entr\'ee}} = \bar{p} = 8 \cdot 10^6 \cdot 5 \cdot 10^{-6} = 40 Pa \text{ et } p_{\text{sortie}} = 0.$

La fonction $\alpha(\theta, \mathbf{x})$ qui adapte la viscosité dynamique en fonction de la température est affichée ci-contre. Elle est construite à l'aide de la courbe fournie dans le support de ce projet.

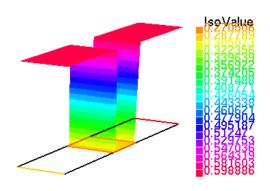


Figure 8 – Fonction alpha viscosité adaptative

Voici les résultats de simulation :

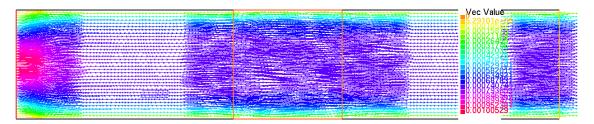


FIGURE 9 – Tuyau droit, écoulement de Poiseuille imposé, instant initial

Au temps initial de simulation $t \approx 10^{-9} s$, on observe le fluide ayant une vitesse presque nulle hormis en entrée où le profil de Poiseuille est imposé. Le maillage en triangle comporte des éléments dont les bords forment des lignes droites. On observe alors des zones où la densité en flèches est plus faible, mais c'est la couleur qui nous importe ici.

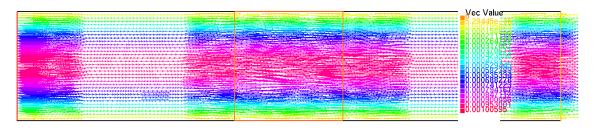


FIGURE 10 - Tuyau droit, écoulement de Poiseuille imposé, instant final

À l'instant final, la vitesse est bien stationnaire et de l'ordre de $\bar{x} = 10^{-3} m/s$.

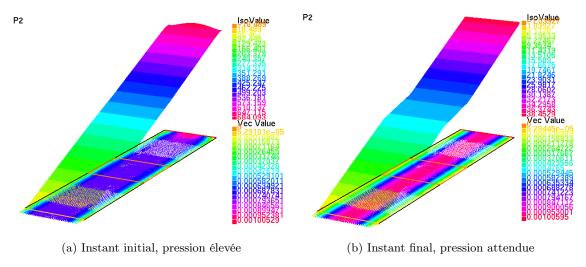


FIGURE 11 – Tuyau droit, écoulement de Poiseuille imposé

Pour la pression, on voit bien qu'elle mets le fluide en mouvement, étant donné la surpression en entrée au moment initial puis la chute de pression régulière jusqu'à l'instant final. Le profil de vitesse en entrée (Poiseuille théorique) donne bien une pression effective simulée de \bar{p} , ce qui est rassurant. Le long du tuyau, la chute de pression est bien affine par morceaux, étant donné la variation de la viscosité dynamique sur la zone de chauffe.

3.1.2 Pressions d'entrée et de sortie sur tuyau droit

Si on décide d'imposer les pressions en entrée et en sortie, c'est le terme de bord de la formulation variationnelle de l'équation de Stokes qui l'impose sur les bords. On impose également un écoulement unidimensionnel. On obtient alors :

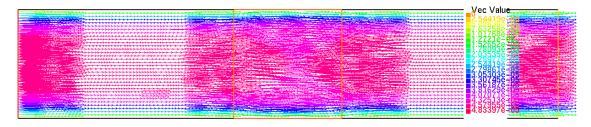


FIGURE 12 – Tuyau droit, pressions imposées, instant initial

Ici, les pressions sont imposées dès le début, l'hypothèse d'incompressibilité du fluide le mets alors immédiatement en mouvement. La vitesse est d'abord faible puis augmente avec les instants. L'instant final donne le profil et la vitesse attendue, en imposant uniquement les pressions!

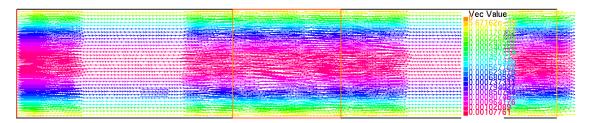


Figure 13 – Tuyau droit, pressions imposées, instant final

Ici la chute de pression est constante dans le temps, car imposée. Le long du tuyau, la chute de pression est toujours affine par morceaux.

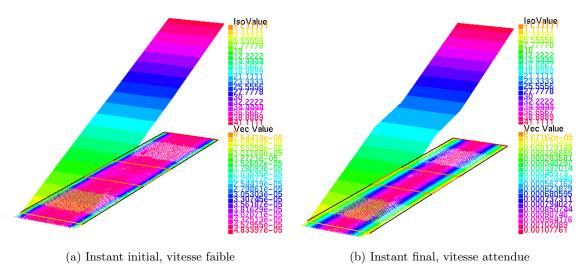


FIGURE 14 – Tuyau droit, pressions imposées

Finalement, on peut aussi vérifier l'influence du maillage sur les résultats. Mais les éléments P2 pour la vitesse et P1 pour la pression donnent déjà un résultat très satisfaisant sur ce maillage à 1400 éléments.

3.1.3 Équation de concentration sur tuyau droit

Pour l'équation de concentration, voici cicontre la fonction $\beta(x, \mathbf{x}) = \theta(\mathbf{x})$ qui donne la température en Kelvins en fonction de la position. La zone de transition entre les deux températures est affine, de largeur réglable avec la variable hChauffe sur le maillage avec la zone de chauffe non géométrique.

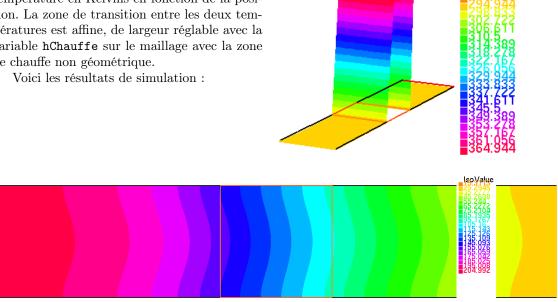


FIGURE 16 – Tuyau droit, concentration imposée, chauffe géométrique

On remarque que la zone de Chauffe a un effet négligable avec comme température froide $\theta=20$ degrés Celsius, et température chaude $\theta=80$ degrés Celsius. On peut mieux voir l'effet en diminuant drastiquement la diffusion dans la zone froide. On la diminue d'un facteur 10^{-2} et on obtient:

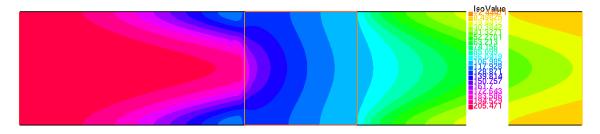


FIGURE 17 – Tuyau droit, concentration imposée, effet diffusif exagéré

On observe une limitation due à la géométrie, la zone de chauffe géométrique crée une barrière virtuelle. Et la température change soudainement lors de la transition entre les régions. Essayons avec l'autre maillage:

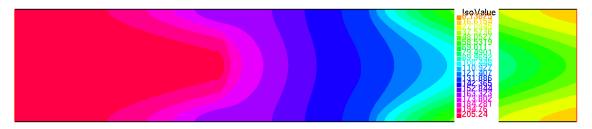


FIGURE 18 – Tuyau droit, concentration imposée, effet diffusif exagéré, chauffe non géométrique

On voit clairement que la barrière a disparue, l'effet est uniquement du à la variation brupte de température. Essayons de lisser la température avec h $Chauffe = 5 \cdot h$ où h est la taille caractéristique d'un élément :

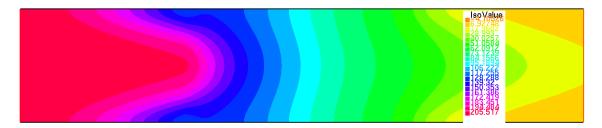


FIGURE 19 – Effet diffusif exagéré, chauffe non géométrique, température lissée

La zone de chauffe est naturellement plus large, mais elle permet de rendre compte de l'importance de la valeur des dérivées des fonctions (qu'on ne voit pas tout le temps!).

Ci-contre la fonction de température lissée : On aurait également pu voir la barrière disparaître en faisant diminuer le pas h du maillage pour obtenir des maillages de plus en plus fins.

Pour les maillages avec une chauffe non géométrique, le champ de vitesse ${\bf u}$ est recalculé sur la géométrie à l'aide des conditions limites en pression. Choisir les conditions limites en vitesse ne changera pas grand chose étant donné que le temps caractéristique de diffusion de la

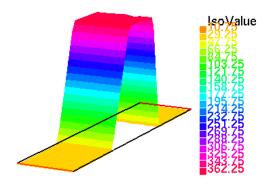


Figure 20 – Fonction thêta température lissée

concentration $(T = 5 \cdot 10^{-3} s)$ est bien plus grand que celui d'établissement du régime stationnaire de Poiseuille $(T = 1, 5 \cdot 10^{-7} s)$.

Finalement, regardons la concentration sans exagérer l'effet de diffusion.

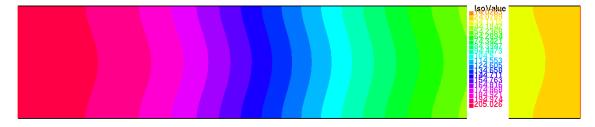


FIGURE 21 – Effet diffusif réel, chauffe non géométrique, température lissée

L'effet réel de la température sur la diffusion n'est pas très remarquable sur ce petit tuyau droit. Voyons ce qu'il en est sur la géométrie du projet.

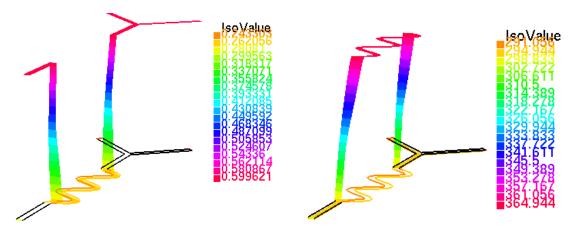
3.2 Géométrie du projet : circuit à section constante

3.2.1 Équation de Stokes instationnaires

La largeur du circuit vaut toujours $\bar{x} = 10^{-6} m$. Les longueurs des tubes valent tous $10\bar{x}$ et la zone de chauffe a une longueur de $20\bar{x}$. L'angle d'incidence vaut $\frac{\pi}{4}$. Le maillage comporte 12 mille éléments.

On impose les conditions limites en pression : $p_{\text{entrée}}$ aux deux entrées 1 et 2 et p_{sortie} en sortie. On les calcules à l'aide de la formule donnée en (2.1.2) même si le circuit n'est pas rectiligne. On substitue pour longueur la longueur totale du circuit (même si on ne sait pas calculer explicitement la longueur d'une courbe sinusoidale ..).

Premièrement, on adapte nos fonctions $\alpha(\mathbf{x})$ d'adaptation de la viscosité dynamique et $\theta(\mathbf{x})$ de température.



- (a) Fonction alpha d'adaptation de la viscosité
- (b) Fonction théta de température en Kelvins

FIGURE 22 – Fonctions adaptées sur la géométrie du projet

On simule alors le champ de vitesse à l'aide de l'équation de Stokes :

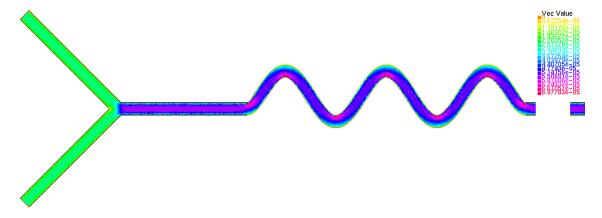


FIGURE 23 - Champ de vitesse P2, pressions imposées, temps initial

Au temps $t = 7.90569 \cdot 10^{-9} s$, le régime permanent n'est pas encore établi et on peut voir plusieurs choses :

- 1. la vitesse double lors de la jonction entre les deux tubes d'injection, cela parait-étrange mais c'est en fait un effet venturi que nous verrons après et un effet de linéarité des équations de Stokes, autrement dit un principe de superposition.
- 2. sur le circuit de chauffe, la condition d'adhérence aux bords ${\bf u}=0$ déplace le maximum de vitesse vers l'intérieur de la courbure. C'est un effet de la viscosité que l'on voit.

Ces observations nous permettent de voir que la simulation est conforme aux équations que nous avons implémentées, sur une géométrie différente et surtout plus complexe que le tube droit. Regardons le temps final :

On atteint bien une vitesse de l'ordre de \bar{u} . La vitesse dans les tuyaux d'injection bleue claire soit à peu près 0.6mm/s, et dans les tuyaux de circulation 1,2mm/s.

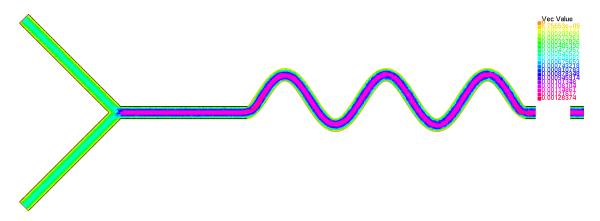


FIGURE 24 – Champ de vitesse P2, pressions imposées, temps initial

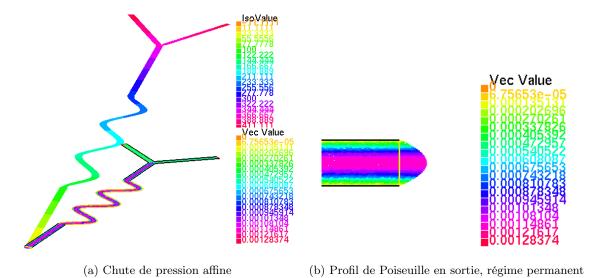


FIGURE 25 – Fonctions adaptées sur la géométrie du projet

En sortie, on observe également un beau profil parabolique de Poiseuille. La perte de charge / chute de pression est bien linéaire ce qui confirme la section constante du circuit.

Pour expliquer le doublage de la vitesse, on peut utiliser nos équations de Stokes pour vérifier ce qu'il se passe sur un tube à section rétrécissante :

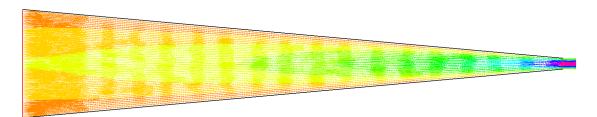


FIGURE 26 – Tube rétressissant, pressions imposées, régime permanent

On observe bien que la vitesse augmente à mesure que la section diminue linéairement.

D'après la formule de Bernoulli, pour un fluide non visqueux en écoulement stationnaire homogène incompressible et soumis aux seules forces de pression, on peut écrire entre deux points A et B à même hauteur le long d'une ligne de courant $P_B = P_A + \frac{1}{2}\rho v_A^2 \left(1 - \frac{S_A^2}{S_B^2}\right)$ où S_A et S_B sont les sections en A et B. Par conservation du débit volumique, on peut écrire que $v_A S_A = v_B S_B$, puis en supposant que $S_B = \left(1 - \frac{x}{10}\right) S_A$ décroît linéairement. On obtient alors : $P_B = P_A + \frac{1}{2}\rho v_A^2 \frac{(x-10)^2 - 1}{(x-10)^2}$. Cette fonction

Simulons notre fluide avec une sortie qui fait un dixième de la largeur :

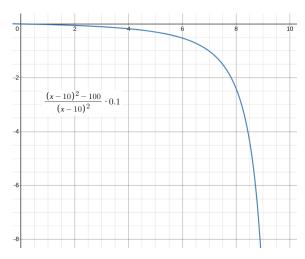


FIGURE 27 – Chute de pression théorique due à l'effet venturi

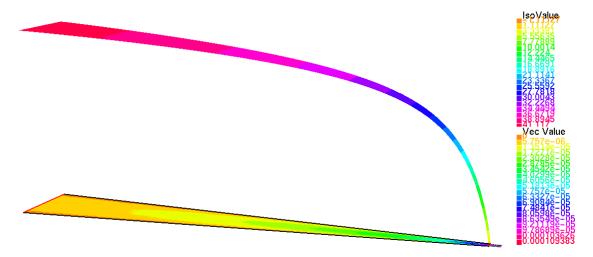


FIGURE 28 – Tube rétressissant, pressions imposées, régime permanent

Et on retrouve bien le profil de Pression auquel on s'attend. En fait, la formule de Bernoulli n'est valable que pour des écoulements non visqueux. Avec cette ouverture, on ne voit pas les effets de viscosité. Changeons la à un centième de la largeur d'entrée, et simulons avec et sans viscosité :

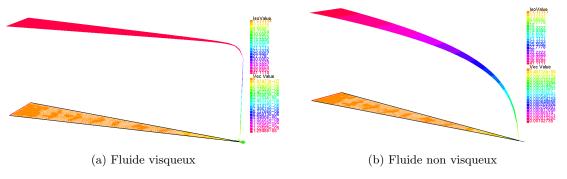
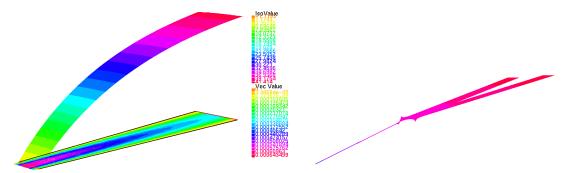


FIGURE 29 - Simulations de l'effet venturi

Ce n'est peut-être pas visible sur les images, mais avec le fluide visqueux, la vitesse finale est faible de l'ordre de 10^{-5} alors que celle du fluide visqueux vaut $\bar{u} = 10^{-3} m/s$ peu importe la taille de sortie. On retrouve également le profil de pression attendu.

Nous sommes donc capable de simuler de l'effet venturi qui pourrait expliquer le doublement de la vitesse. Qu'en est-il réellement?



- (a) Tube droit, section divisée par deux
- (b) Profil de vitesse sur jonction injection

Figure 30 – Simulations de l'effet venturi

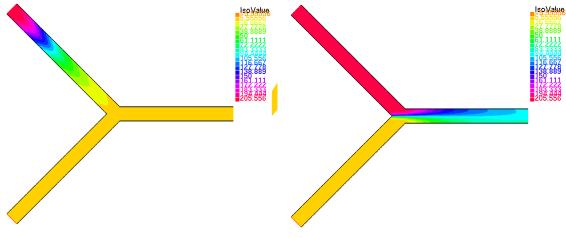
Pour le tube droit divisé par deux, on observe bien un doublement de la vitesse avec une chute de pression sur-linéaire. Pour la géométrie du projet, on observe le même profil. On peut donc expliquer le doublement de la pression par un effet venturi.

En fait, en calculant la valeur que prend $P_B = P_A + \frac{1}{2}\rho v_A^2 \left(1 - \frac{S_A^2}{S_B^2}\right)$ pour $S_B = \frac{S_A}{2}$, on trouve

 $P_B=P_A-rac{3}{2}\rho v_A^2\approx 5\cdot 10^{-2} Pa$ en supposant que $V_A\approx \bar{u}$, ce qui est exagéré. La chute de pression est donc très faible pour un doublement de la vitesse.

3.2.2 Équation de concentration sur circuit à section constante

Simulons maintenant le mélange. On a supposé que les molécules avaient un rayon $r = 10^{-8} m$. Observons la diffusion de particules :



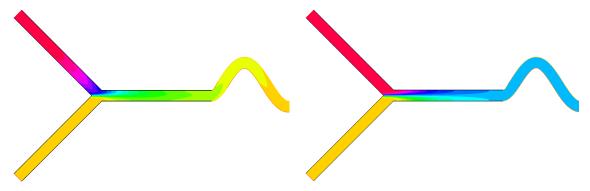
 ${\rm (a)\ Concentration,\ instant\ initial}$

(b) Concentration, instant final, régime permanent

FIGURE 31 – Fonctions adaptées sur la géométrie du projet

Comme sur le tube droit, on voit bien l'effet de convection et de diffusion du fluide : le fluide suit des profils paraboliques déformés par l'effet de diffusion.

En régime permanent, il rencontre l'autre fluide et du à la faible diffusion du produit, celui-ci suit majoritairement les lignes de courant de fluide et se mélange progressivement le long du circuit de circulation. Voyons le reste du circuit :



 (\mbox{a}) Concentration zone de chauffe, instant intermédiaire

(b) Concentration zone de chauffe, régime permanent

FIGURE 32 – Fonctions adaptées sur la géométrie du projet

En fait, le produit s'est déjà beaucoup trop mélangé pour qu'on voit un effet de la zone de chauffe. Nous pouvons augmenter le rayon des molécules du soluté afin de réduire l'effet de diffusion. En effet, il est plus difficile de mélanger de grosses particules. Prenons $r=10^{-7}m$:

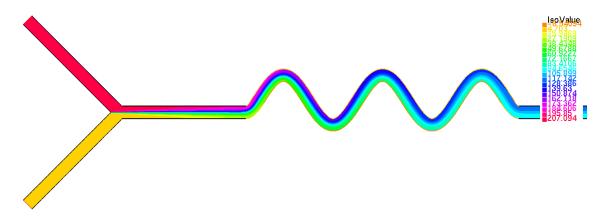


FIGURE 33 – Concentration, grandes molécules, pas de chauffe

On observe en effet que le produit ne se mélange pas bien. Chauffons le serpentin à 90 degrés celsius :

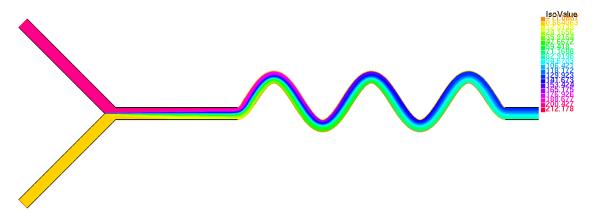


Figure 34 – Concentration, grandes molécules, chauffe à 90 degrés Celsius

On ne voit pas de changement significatif,. Pour la taille du circuit, il est difficile de voir un impact d'un chauffage aussi local. Par ailleurs, il n'est pas réaliste de supposer que la température redescends aussi rapidement à 20 degrés en sortie. Mais à défaut de changer de circuit pour un circuit plus grand, nous cherchons un impact de la température sur le mélange alors imposons une température de 500 degrés Celsius :

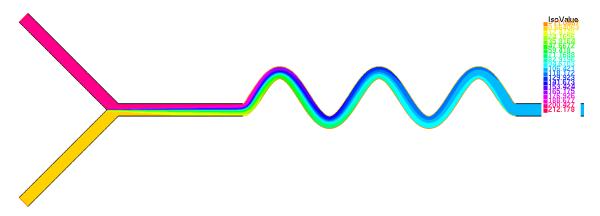


Figure 35 – Concentration, grandes molécules, chauffe à 500 degrés Celsius

Et là l'effet de la température sur le mélange est indéniable. Le produit est très bien mélangé en sortie.

3.2.3 Écoulement couplé sur tuyau droit

En fait, on peut s'intéresser à l'effet de la chauffe sur une partie d'un tuyau droit. On reprend notre tuyau droit qu'on scinde en deux à l'entrée afin d'imposer une concentration que sur la moitié et on retrouve une configuration similaire à celle du grand circuit en entrée de la zone de chauffe. On regarde d'abord l'effet avec des molécules de rayon $r=10^{-7}m$ sans chauffe :

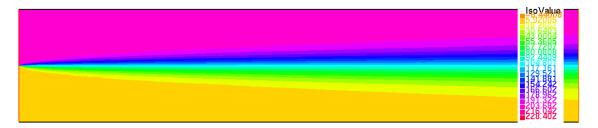


FIGURE 36 - Concentration tuyau droit sans chauffe

On observe l'effet de la diffusion pour une eau à 20 degrés ${\bf C}.$ Montons la température à 500 degrés ${\bf C}:$

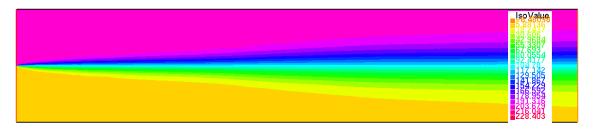


Figure 37 – Concentration tuyau droit et chauffe

On voit que la concentration se diffuse davantage. Évidemment, sur cette longueur de tube, il n'est pas possible de voir un grand effet, à moins d'exagérer les choses :



FIGURE 38 – Concentration tuyau droit et chauffe exagérée

Encore une fois, on observe bien que le produit est bien mélangé par la zone de chauffe.

3.3 Géométries alternatives

3.3.1 Section non constante

Essayons le maillage alternatif proposé au début de ce rapport, celui en sinus superposés. Simulons le champ de vitesse et de pression :

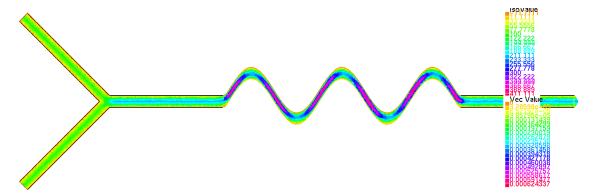


FIGURE 39 - Champ de vitesses P2 sur géométrie alternative

On observe que le rétrécissement de la section entraı̂ne des effets venturi successifs. La vitesse n'est pas du tout régulière et on n'observe pas de profil de Poiseuille sur le circuit de chauffe. Regardons les pressions correspondantes à ces effets venturi :

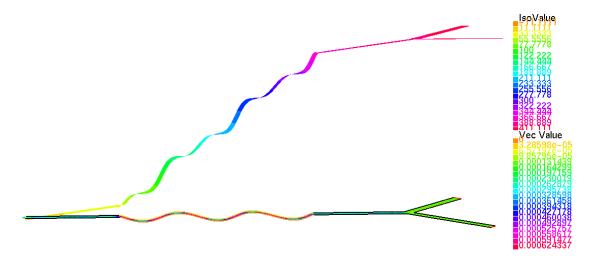


FIGURE 40 - Champ de pression P1 sur géométrie alternative, effet venturi

La section non régulière impose une chute de pression non affine. L'effet venturi est encore vérifié, les zones de haute vitesse engendrent des chutes de pressions importantes.

Pour la diffusion de la concentration, prenons le cas test avec des molécules de rayon $r=10^{-7}m$ et sans chauffe :

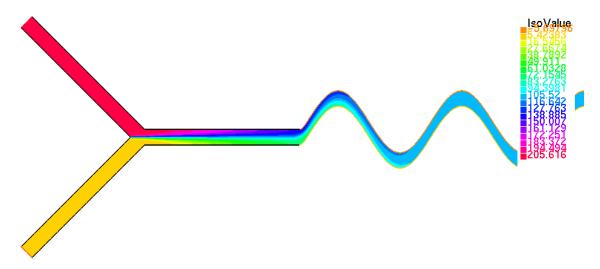


FIGURE 41 – Concentration sur géométrie alternative, grandes molécules, pas de chauffe

A notre plus grand étonnement, là où la géométrie à section constante a eu besoin d'une chauffe de l'ordre de 500 degrés, cette géométrie parvient à mélanger les grosses molécules sans chauffe ... Il semblerait que le mélange physique est plus efficace que le mélange diffusif.

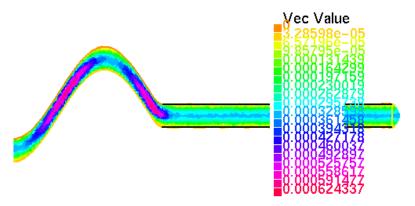


FIGURE 42 - Concentration sur géométrie alternative, grandes molécules, pas de chauffe, sortie

Le problème de cette géométrie est qu'elle ne respecte pas le critère de la vitesse de l'ordre de \bar{u} . En sortie, la vitesse et de l'ordre de $\frac{\bar{u}}{3}$. Même si la vitesse est constante et peut assurer un débit constant, il sera plus faible. La section non constante va demander d'imposer des pressions beaucoup + élevées afin d'atteindre \bar{u} , ce qui n'est peut-être pas tenable pour de tels circuits.

3.3.2 Tuyau long

Les dimensions typique d'un système micro-fluidique sont de l'ordre du cm. Prenons alors la géométrie du projet et étendons la longueur du tube de chauffe :

Champ de vitesse P2

Yec Value

1,51756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

1,01756-05

FIGURE 43 – Géométrie longue et élancée

On va simuler les grandes molécules qui sont difficiles à mélanger et sans chauffe :

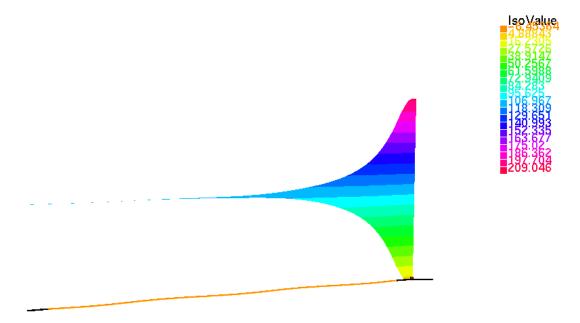


FIGURE 44 – Concentration sur géométrie longue et sans chauffe

On observe que le mélange s'effectue quand même sans chauffe. Principalement du au effets de convection. \bar{u} est peut-être trop importante? ou alors c'est la bonne vitesse à avoir afin de pouvoir mélanger. La chauffe n'est peut-être nécessaire que pour de très petits systèmes.

3.4 Écoulement diphasique couplé

Le sujet du projet suggérait que les liquides en entrée n'étaient pas les mêmes. En particulier, on peut supposer qu'ils ont des viscosités différentes. Dans la littérature [1], le cas des écoulements diphasiques admet des solutions analytiques de type profil de Poiseuille (voir ci-contre). On peut supposer deux phases de viscosités différentes.

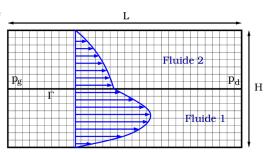


FIGURE 45 – Écoulement de Poiseuille diphasique

Étudions maintenant l'écoulement de deux fluides immiscibles à l'intérieur d'un tuyau. L'intérêt de cela est d'une part de pouvoir avoir une expression analytique pour cet écoulement que nous pourrons comparer ensuite aux simulations, puis d'autre part de manipuler les équations de Navier-Stokes et nous donner une intuition mécanique des conditions limites d'un tel problème. Nous adopterons dans la suite les conventions de notation standard de mécanique des milieux continus, qui reviennent à expliciter l'ordre des tenseurs par le nombre de traits les soulignant. Étudions analytiquement un écoulement de deux fluides diphasiques et voyons que cela correspond bien à notre solution pour le tuyau droit. L'écoulement plan sera retrouvé à partir des hypothèses sur le modèle.

L'étude sera généralement faite entre trois dimensions pour ne pas avoir à se soucier de changer la définition du tenseur des contraintes de Cauchy.

Nous nous plaçons dans le cadre de deux fluides homogènes, newtoniens, visqueux, incompressibles, non miscibles, s'écoulent dans la direction $\underline{e_z}$ entre deux parois planes fixes, parallèles d'équation $x=\pm a$. Le fluide 1, de masse volumique $\overline{\rho_1}$, de viscosité μ_1 s'écoule entre les plans x=-a et x=0 et le fluide 2 de masse volumique ρ_2 , de viscosité μ_2 entre les plans x=0 et x=a.

Cette configuration est supposée stable, l'interface entre les fluides reste le plan x=0.

L'écoulement est crée par une différence de pression imposée entre la section située en z=0 et la section située en z=L. On désigne par P_0 la pression uniforme imposée sur la section z=0 et par P_L la pression uniforme imposée sur la section z=L et on suppose ces pressions telles que $P_0 > P_L$. L'écoulement est supposé stationnaire et laminaire, les lignes de courant étant des droites parallèles à la direction $\underline{e_z}$. Les longueurs des parois L selon $\underline{e_z}$ et l selon $\underline{e_y}$ sont supposées grandes devant leur écartement $\overline{2a}$, de sorte que les effets de bords sont négligeables et le champ de vitesse pourra être supposé indépendant de la variable y.

Enfin, les forces de gravité sont supposées négligeables. En effet, ces hypothèses sont crédibles en vue de la définition de notre géométrie, dont la longueur est plus grande que l'épaisseur.

Voyons les équations générales de conservation de la masse, l'équation du mouvement, et la loi de comportement en tout point du canal. Où $i \in \{1,2\}$, 1 et 2 représentant les deux fluides.

— Équation du mouvement :

$$\rho^{i}(\underline{x},t)\underline{\gamma}^{i}(\underline{x},t) \ = \ \underline{div} \ \underline{\underline{\sigma}}^{i}(\underline{x},t) \ + \ \rho^{i}(\underline{x},t)\underline{f}^{i}(\underline{x},t)$$

avec

$$\underline{\gamma}^i(\underline{x},t) \ = \ \frac{d}{dt}\underline{v}^i(\underline{x},t) = \frac{\partial}{\partial t}\underline{v} + \underline{\underline{\nabla}}\ \underline{v}^i \cdot \underline{v}^i$$

— Équation de continuité - conservation de la masse :

$$\frac{d}{dt} \rho^i(\underline{x},t) \ + \ \rho^i(\underline{x},t) \ \underline{div} \ \underline{v}^i(\underline{x},t) \ = \ 0$$

— Loi de comportement : fluide visqueux newtonien incompressible

$$\underline{\underline{\sigma}}^i(\underline{x},t) = -p^i(\underline{x},t)\underline{\underline{I}}\underline{\underline{d}}^i \ + \ \lambda^i Tr \ (\underline{\underline{d}}^i(\underline{x},t))\underline{\underline{I}}\underline{\underline{d}}^i \ + \ 2\mu^i\underline{\underline{I}}\underline{\underline{d}}^i$$

avec

$$\underline{\underline{\underline{d}}}^i(\underline{x},t) = \frac{1}{2}(\underline{\underline{\nabla}}\ \underline{v}^i\ +\ \underline{\underline{\nabla}}\ \underline{v}^{i^\top})$$

Notons que, la condition d'incompressibilité impose que

$$div \ v(x,t) = 0$$

— Conditions aux limites :

— sur $x=-a,\ 0\leq y\leq \ell,\ 0\leq z\leq L$, contact d'un fluide visqueux avec une paroi solide

la condition est alors une condition d'adhérence de fluide visqueux avec une paroi fixe :

$$\begin{split} & \underline{v}^1(-a,y,z,t) = \underline{v}^{\mathrm{solide}}(-a,y,z,t) = \underline{0} \\ & \iff \left\{ \begin{array}{ll} v_x^1(-a,y,z,t) &= 0 \\ v_y^1(-a,y,z,t) &= 0 \quad \forall \; y, \; \forall \; z, \; \forall \; t \\ v_z^1(-a,y,z,t) &= 0 \end{array} \right. \end{split}$$

De même sur x = a.

$$\underline{v}^{2}(aa, y, z, t) = \underline{v}^{\text{solide}}(a, y, z, t) = \underline{0}$$

$$\iff \begin{cases} v_{x}^{2}(a, y, z, t) &= 0 \\ v_{y}^{2}(a, y, z, t) &= 0 \quad \forall \ y, \ \forall \ z, \ \forall \ t \\ v_{z}^{2}(a, y, z, t) &= 0 \end{cases}$$

- En $z=0,\ p^1(x,y,\ z=0,t)=P_0$ uniform
e $=p^2(x,y,z=0,t)$ En $z=L,\ p^1(x,y,\ z=L,t)=P_L$ uniform
e $=p^2(x,y,\ z=L,t)$
- En x = 0, $\forall y, \forall z, \forall t$ contact entre les deux fluides visqueux miscibles.
- Conditions de transmission :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \underline{v}^1(0,y,z,t) = \underline{v}^2(0,y,z,t) & \forall y, \forall z, \forall t \\ \underline{\underline{\sigma}}^1(0,y,z,t) \cdot \underline{n} = \underline{\underline{\sigma}}^2(0,y,z,t) \cdot \underline{n} & \forall y, \forall z, \forall t, \text{ avec ici } \underline{n} = \underline{e_x} \end{array} \right.$$

La deuxième condition revient à :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \sigma_{xx}^{1}(0,y,z,t) &= \sigma_{xx}^{2}(0,y,z,t) \\ \sigma_{yx}^{1}(0,y,z,t) &= \sigma_{yx}^{2}(0,y,z,t) \\ \sigma_{zx}^{1}(0,y,z,t) &= \sigma_{zx}^{2}(0,y,z,t) \end{array} \right.$$

- Conditions initiales :
 - À t = 0, pour un écoulement stationnaire : $\frac{\partial \underline{v}(\underline{x},t)}{\partial t} = \underline{0}$, donc $\underline{v}(\underline{x},t) = \underline{v}^0(\underline{x})$
- Hypothèses du problème :
 - \rightarrow Écoulement stationnaire :

$$\begin{cases} \frac{\underline{v}^i(\underline{x},t)}{p^i(\underline{x},t)} &= \underline{v}^i(\underline{x}) \\ p^i(\underline{x},t) &= p^i(\underline{x}) \\ \underline{\underline{\sigma}^i(\underline{x},t)} &= \underline{\underline{\sigma}^i(\underline{x})} \\ \bar{\rho^i}(\underline{x},t) &= \bar{\rho^i}(\underline{x}) \end{cases} \forall \underline{x}$$

Écoulement laminaire : lignes de courant droites, parallèles aux parois

$$\underline{v}^{i}(x, y, z, t) = v_{z}^{i}(x, u, z) \ \underline{e_{z}}$$

- Vitesse indépendante de $y.\ \underline{v}^i(x,y,t) = v_z^i(x,z)\underline{e_z}, \quad \forall x,\ \forall z$ Fluides homogènes : $\rho^i(\underline{x})) = \rho^i$ constante

Avant d'attaquer la résolution des équations, apportons quelques remarques et déductions préliminaires.

Tout d'abord, nous pouvons constater que l'équation de continuité est automatiquement satisfaite pour des fluides incompressibles. Il en est le cas ici. De plus,

$$\begin{aligned} \operatorname{div} & v^i = 0 \text{ en tout point du domaine } & \Leftrightarrow \frac{\partial v_z^i}{\partial z} = 0 \\ & \Rightarrow v_z^i \text{ indépendant de } z \\ & \Rightarrow \underline{v}^i(x) = v_z^i(x)\underline{e_z} \end{aligned}$$

Regardons maintenant la loi de comportement :

$$\begin{split} \underline{\underline{d}}(\underline{v}^i) &= \frac{1}{2}(\underline{\underline{\nabla}}\ \underline{v}^i + \underline{\underline{\nabla}}\ \underline{v}^{i^T}) \\ \text{Or, } \underline{\underline{\nabla}}\ \underline{v}^i &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial v^i}{\partial x} & 0 & 0 \end{pmatrix}_{\underbrace{(\underline{e_x},\underline{e_y},\underline{e_z})}} \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{2}\frac{dv^i}{dx} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\frac{dv^i}{dx} & 0 & 0 \end{pmatrix}_{\underbrace{(\underline{e_x},\underline{e_y},\underline{e_z})}} \\ \underline{\underline{\underline{\sigma}}}^i(x,y,z,t) &= -p^i(x,y,z)\underline{\underline{Id}} + 2\mu^i\underline{\underline{d}}^i \\ &= \begin{pmatrix} -p^i & 0 & \mu^i\frac{dv^i}{dx} \\ 0 & -p^i & 0 \\ \mu^i\frac{dv^i}{dx} & 0 & -p^i \end{pmatrix}_{\underbrace{(\underline{e_x},\underline{e_y},\underline{e_z})}} \\ \underline{\underline{D}}^i(x,y,z,t) &= \underline{\gamma}^i(x) = \frac{\partial\underline{v}^i}{\partial t} + \underline{\underline{\nabla}}\underline{v}^i \cdot \underline{v}^i = \underline{0} \end{split}$$

Attaquons maintenant la résolution des inconnues $p^i, \underline{v}^i, \underline{\underline{\sigma}}^i, \underline{\underline{d}}^i$.

L'équation de Navier-Stokes pour un fluide visqueux newtonien est donnée par :

$$\rho(\underline{x}, t) \underline{\gamma}(\underline{x}, t) = \underline{\operatorname{div}} \left[-p \underline{I}\underline{d} + \lambda (\operatorname{Tr}(\underline{d})\underline{I}\underline{d}) \right]$$

$$\rho(\underline{x}, t) \left[\frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \underline{\underline{\nabla}} \underline{v} \cdot \underline{v} \right] = -\underline{\nabla}p + (\lambda + \mu)\underline{\nabla}(\operatorname{div}\underline{v}) + \mu\underline{\Delta} \underline{v}$$

$$\operatorname{Car}, \lambda \frac{\partial}{\partial x_j} (d_{kk}\delta_{ij}) = \lambda \frac{\partial}{\partial x_i} (\operatorname{div}v) \implies \lambda \left[\underline{\nabla} (\operatorname{div}\underline{v})\right]_i$$

Or, le fluide est incompressible : div $\underline{v} = 0$ D'où,

$$\rho(\underline{x},t) \left[\frac{\partial \underline{v}}{\partial t} + \underline{\underline{\nabla}} \ \underline{v} \cdot \underline{v} \ \right] \ = -\underline{\nabla} p + \mu \underline{\Delta} \ \underline{v}$$

Ce qui par ce qui précède revient à :

$$-\nabla p^{i}(x, y, z) + \mu^{i} \Delta v^{i}(x) = 0$$

avec $\underline{v} = v(x)e_z$

$$\begin{cases} -\frac{\partial p^{i}}{\partial x} = 0\\ -\frac{\partial p^{i}}{\partial y} = 0\\ -\frac{\partial p^{i}}{\partial z} + \mu^{i} \frac{d^{2} v^{i}}{dx^{2}} = 0 \end{cases}$$

Nous en déduisons alors que la pression est une variable de z, la variable de longueur du tuyau. Or, \underline{v} n'est une fonction que de x. Par conséquent,

$$-\frac{\partial p^i}{\partial z} = A = \mu^i \frac{d^2 v^i}{dx^2}$$

avec A une constante que l'on déterminera par la suite.

Par intégration, il en vient que p(z) = Az + B, avec B une constante aussi.

Or, puisque $p(0) = P_0$ nous déduisons que $B = P_0$, de plus $p(L) = P_L$ donc $AL + P_0 = P_L$. Ainsi,

$$p(z) = \frac{P_L - P_0}{L}z + P_0$$

Voyons maintenant, en intégrant :

$$\begin{split} \mu^i \frac{dv^i}{dx} &= Ax + C^i \text{ , avec } C^i \text{ constantes} \\ \Rightarrow v^i &= \frac{A}{\mu^i} \frac{x^2}{2} + \frac{C^i}{\mu^i} x + D^i \text{ , avec } D^i \text{ constantes} \end{split}$$

Déterminons les constantes C^i et D^i à partir de la condition initiale :

$$v^{1}(x = -a) = 0 \implies \frac{A}{\mu^{1}} \frac{a^{2}}{2} + \frac{C^{1}}{\mu^{1}} (-a) + D^{1} = 0$$
$$v^{2}(x = a) = 0 \implies \frac{A}{\mu^{2}} \frac{a^{2}}{2} + \frac{C^{2}}{\mu^{2}} a + D^{2} = 0$$

En appliquant les conditions de transmission :

$$-\frac{\underline{v}^{1}(x=0)}{\underline{c}^{1}(x=0)} = \underline{v}^{2}(x=0) \Rightarrow D^{1} = D^{2} = D$$

$$-\underline{\underline{\sigma}^{1}(x=0)}\underline{e_{x}} = \underline{\underline{\sigma}^{2}(x=0)}\underline{e_{x}}$$

$$\Leftrightarrow \sigma_{xx}^1 = \sigma_{xx}^2 \Rightarrow -p^1(x=0,y,z) = -p^2(x=0,y,z)$$
$$\sigma_{xy}^1 = \sigma_{xy}^2(=0)$$
$$\sigma_{xz}^1 = \sigma_{xz}^2 \text{en } x = 0$$

D'où, $\mu^1\frac{dv^1}{dx}(x=0)=\mu^2\frac{dv^2}{dx}(x=0)$, et donc par conséquent $C^1=C^2=C$. Les constantes (C,D) vérifient :

$$\begin{split} \frac{A}{\mu^1} \frac{a^2}{2} - \frac{C}{\mu^1} a + D &= 0 \\ \frac{A}{\mu^2} \frac{a^2}{2} + \frac{C}{\mu^2} a + D &= 0 \end{split}$$

En soustrayant les deux équations et réorganisant les termes in trouve que :

$$C = \frac{Aa}{2} \frac{\mu^2 - \mu^1}{\mu^1 + \mu^2}$$

Et ensuite,

$$D = \frac{-Aa^2}{\mu^1 + \mu^2}$$

Ainsi,

$$v^{1} = \frac{A}{\mu^{1}} \frac{x^{2}}{2} + \frac{C}{\mu^{1}} x + D - a \le x \le 0$$

$$v^{2} = \frac{A}{\mu^{2}} \frac{x^{2}}{2} + \frac{C}{\mu^{2}} x + D \quad 0 \le x \le a$$

avec
$$A = \frac{P_L - P_0}{L}$$

Interprétons alors les résultats.

Voyons d'abord que si $\mu^1 = \mu^2 = \mu$, nous re-C = 0. Alors, $\underline{v} = \frac{P_L - P_0}{L} \frac{1}{2} \frac{1}{\mu} (x^2 - a^2)$.

$$\underline{v} = \frac{P_L - P_0}{L} \frac{1}{2} \frac{1}{\mu} (x^2 - a^2).$$
Enfin pour deux fluides distinct

Enfin, pour deux fluides distincts, nous retrouvons bien les profils ci-contre

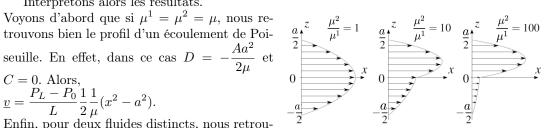
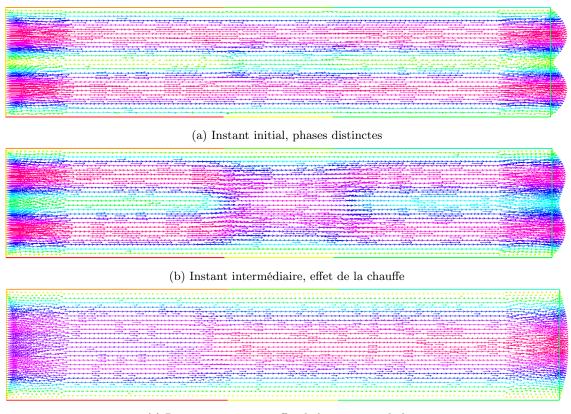


FIGURE 46 – Profil théorique

Les simulations permettent de rendre compte de l'importance de la chauffe dans le cas de cet écoulement diphasique :



(c) Régime permanent, effet de la sortie parabolique

FIGURE 47 – Écoulement diphasique

À l'instant initial, les phases sont bien distinctes et on boit bien les deux profils paraboliques en sortie.

À l'instant intermédiaire, c'est la chauffe entre les deux phases qui permet de les mélanger, même si elles ne restent pas dans cet état en sortie de la zone.

En régime permanent, la sortie parabolique et la vitesse maximale au milieu du tube fait se rejoindre petit à petit les deux phases en entrée.

Tout comptes fait, cette partie qui ne devrait que s'intéresser aux effets du mélange de la concentration dans le tuyau, aborde de nombreux autres phénomènes physiques, issus des contraintes physiques de notre problème et de la géométrie de notre système. En effet, d'un côté, nous étudions les effets de la région de chauffe sur la diffusion et la viscosité et la pression, et d'un autre côté nous étudions les effets physiques que la géométrie de notre maillage engendre, comme l'effet Venturi. Puis finalement, l'étude du mélange des deux concentrations nous amène a étudier de façon plus générale plus tard les écoulements diphasiques couplés.

Synthèse

En résumé, nous avons construit notre projet autour d'une démarche simple : pour simuler le mélange, il faut simuler l'écoulement du fluide et la diffusion de la concentration.

Pour cela faire, nous avons construit les différentes géométries du projet dans la partie [1], dont celle du tube droit permettait d'établir une solution analytique du champ des vitesses, c'est l'écoulement de Poiseuille, dans nos hypothèses d'études. Nous l'avons utilisée en cas test pour nos simulations, dans la suite de notre étude. Pour ce même tube, cet écoulement a été simulé avec deux géométries différentes. Celle avec la chauffe définie géométriquement et l'autre. De même, la géométrie du projet de décline en sinus superposés et sinus section constante. La construction des deux géométries y a alors été détaillée.

Ensuite, dans la partie [2], nous avons donné les hypothèses d'études que nous avons prises afin de réduire les équations de Navier-Stokes, afin d'établir la formulation variationnelle des équations de Stokes instationnaires. Les solutions analytiques de l'équation stationnaire étant les écoulements de Poiseuille. On y a discuté des conditions au bord, de l'existence des solutions et des paramètres de simulation. Ce même travail a été refait pour l'équation de convection-diffusion de la concentration. En particulier, nous donnons la loi précise que doit suivre le coefficient de diffusion.

Enfin, dans la partie [3], nous nous attaquons aux simulations des équations sur les différents maillages. Nous validons validons les simulations test du champ de vitesse et de pression, avec une deuxième validation de l'effet venturi sur un fluide visqueux réel. On y trouve un impact positif de la chauffe sur le mélange, qui dépend fortement de la taille des molécules à mélanger. On conclut sur les défauts de la géométrie alternative en sinus superposés, à l'intérieur de laquelle les effets Venturi prédominent. Finalement, simule des écoulements couplés sur le tuyau de section constante. Nous finissions par simuler l'écoulement diphasique couplé sur le tuyau rectangulaire et d'apporter une étude théorique pour celui-ci.

Conclusion

Ainsi, à la lumière de nos études, nous concluons que notre modèle nous permet d'étudier le phénomène souhaité. En effet, les simulations sont cohérentes à celle d'un fluide visqueux en écoulement laminaire. Il se trouve que pour des vitesses de l'ordre de \bar{u} , l'effet de mélange par convection prédomine pour des dimensions typiques d'un système micro-fluidique et que la chauffe n'est pas forcément nécessaire. Notre modèle théorique est peut-être trop simplifié. Peut-être seraitil nécessaire d'ajouter un terme de tension de surface entre les deux fluides, ou bien de faire recours aux lois de la thermodynamique pour décrire le mélange des deux fluides. . .

Références

[1] Frederic Couderc. Development of a numerical code for the simulation of non-miscible fluid flow. Application to the air-assisted disintegration of a liquid jet. *Research Gate*, 02 2007.