

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

Mélissa Mansour, José Marques, Elyass Sayd

10 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, les conditions limites et la simulation du système à l'aide de FreeFEM++.

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>1 Géométrie, maillage et modélisation</b>	<b>3</b>
1.1 Tuyau droit . . . . .	3
1.2 Sinus superposés . . . . .	4
1.3 Section constante . . . . .	5
<b>2 Équations de Navier-Stokes et écoulement</b>	<b>7</b>
2.1 Équation de Stokes instationnaire . . . . .	7
2.1.1 Formulation variationnelle . . . . .	7
2.1.2 Conditions limites aux bords . . . . .	9
2.2 Équation de concentration . . . . .	9
2.2.1 Formulation variationnelle . . . . .	9
2.2.2 Conditions limites aux bords . . . . .	9
<b>3 Simulations sur différentes géométries</b>	<b>10</b>
3.1 Tuyau droit . . . . .	10
3.1.1 Écoulement de Poiseuille . . . . .	10
3.1.2 Équation de Stokes instationnaires . . . . .	10
3.2 Géométrie du projet . . . . .	11
3.2.1 Écoulement de Poiseuille . . . . .	11
3.2.2 Pressions d'entrée et de sortie . . . . .	11
<b>Conclusion</b>	<b>12</b>

# 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 bi-dimensionnel et pour lequel nous effectuerons des calculs d'écoulements également bi-dimensionnels. Le circuit comprend une entrée pour le produit A, une entrée pour le produit B, des sections droites à température minimale et des section 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.

## 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 :

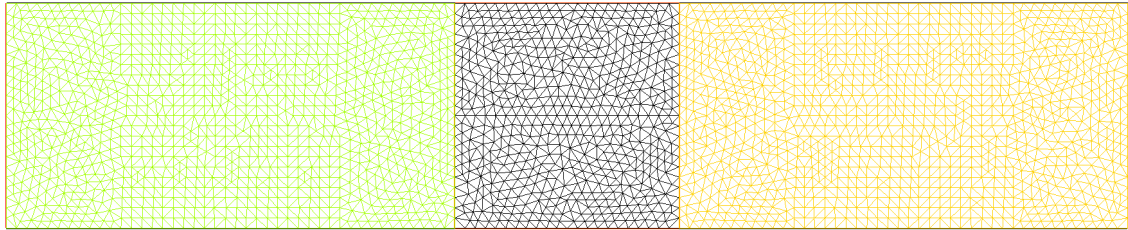


FIGURE 1 – Tube section droite, chauffe définie géométriquement

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.

Pour un plus grand maillage, 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 :

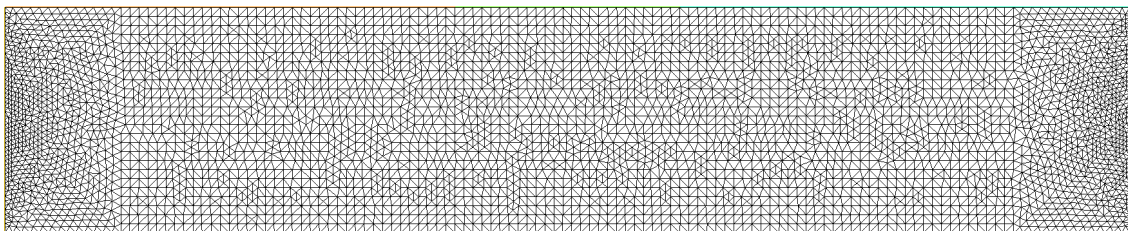


FIGURE 2 – Tuyau droit, chauffe non géométrique

## 1.2 Sinus superposés

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

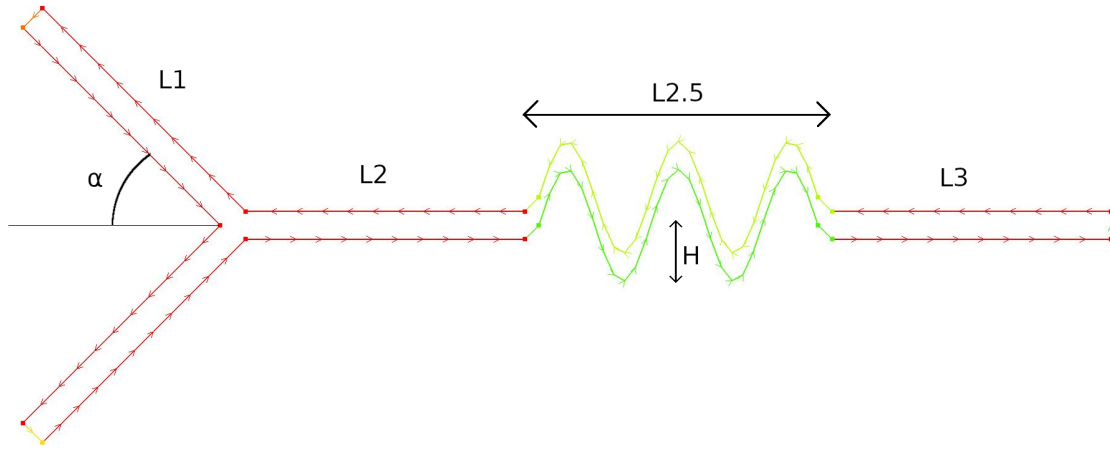


FIGURE 3 – Géométrie sinus superposés

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. Puisse-t-elle être bénéfique au mélange ?..

### 1.3 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).

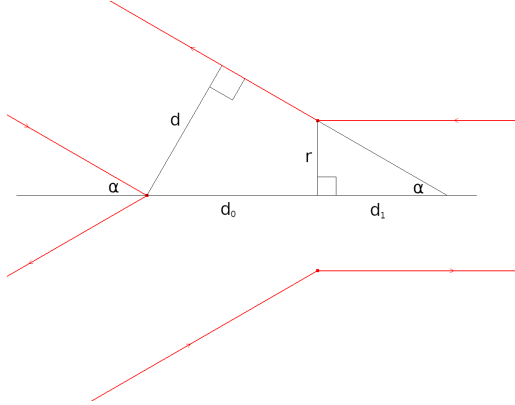


FIGURE 4 – Jonction tubes 1 et 2

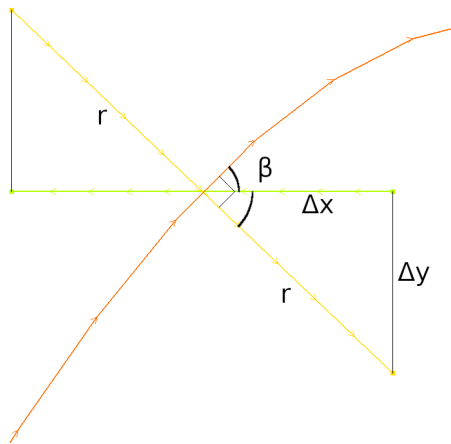


FIGURE 5 – Construction section constante

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 :

$$\begin{aligned}
 \begin{aligned}
 f(x_A) &= y_A \\
 f(x_B) &= y_B \\
 f'(x_A) &= p_A \\
 f'(x_B) &= p_B
 \end{aligned}
 &\Rightarrow
 \begin{aligned}
 a_0 + a_1 x_A^1 + a_2 x_A^2 + a_3 x_A^3 &= y_A \\
 a_0 + a_1 x_B^1 + a_2 x_B^2 + a_3 x_B^3 &= y_B \\
 a_1 + 2a_2 x_A + 3a_3 x_A^2 &= p_A \\
 a_1 + 2a_2 x_B + 3a_3 x_B^2 &= p_B
 \end{aligned} \\
 &\Rightarrow
 \begin{bmatrix} 1 & x_A & x_A^2 & x_A^3 \\ 1 & x_B & x_B^2 & x_B^3 \\ 0 & 1 & 2x_A & 3x_A^2 \\ 0 & 1 & 2x_B & 3x_B^2 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix} y_A \\ y_B \\ p_A \\ p_B \end{bmatrix}
 \Rightarrow X\beta = Y
 \end{aligned}$$

Afin d'obtenir un tube de section constante, nous avons 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.

$$\begin{aligned}
 \tan(\alpha) &= \frac{r}{d_1} \\
 \sin(\alpha) &= \frac{d}{d_0 + d_1} \\
 \Rightarrow d_0 &= \frac{d}{\sin(\alpha)} - \frac{r}{\tan(\alpha)}
 \end{aligned}$$

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 parcourt les extrémités de la normale à la courbe d'une distance  $r$  des deux côtés.

L'angle  $\beta$  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  $\beta$  nous donne :

$$\begin{aligned}
 \cos\left(\frac{\pi}{2} - \beta\right) &= \sin(\beta) = \frac{\Delta x}{r} \\
 \sin\left(\frac{\pi}{2} - \beta\right) &= \cos(\beta) = \frac{\Delta y}{r} \\
 \Rightarrow \Delta x &= r \sin(\beta), \Delta y = r \cos(\beta)
 \end{aligned}$$

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,

On effectue cette régression polynomiale qui sera une interpolation étant donné le rang de la matrice de régression, dite de Vandermonde  $X$  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.

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

Voici la géométrie et un maillage pour un pas  $h = 0.05$  :

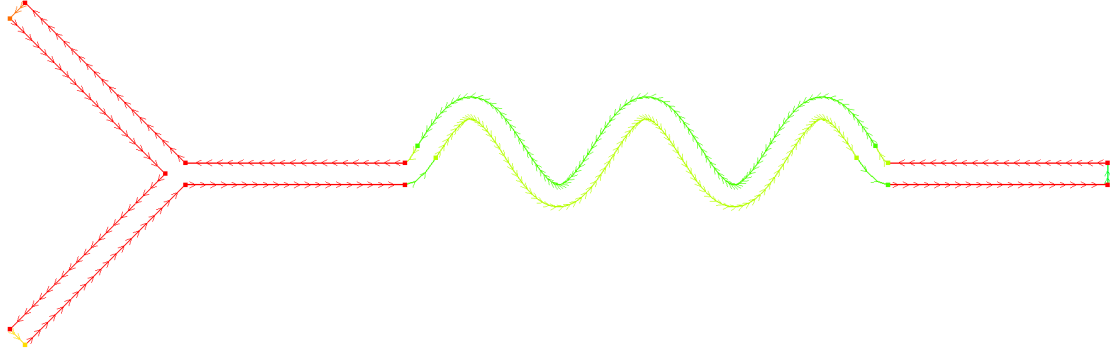


FIGURE 6 – Géométrie tube section constante

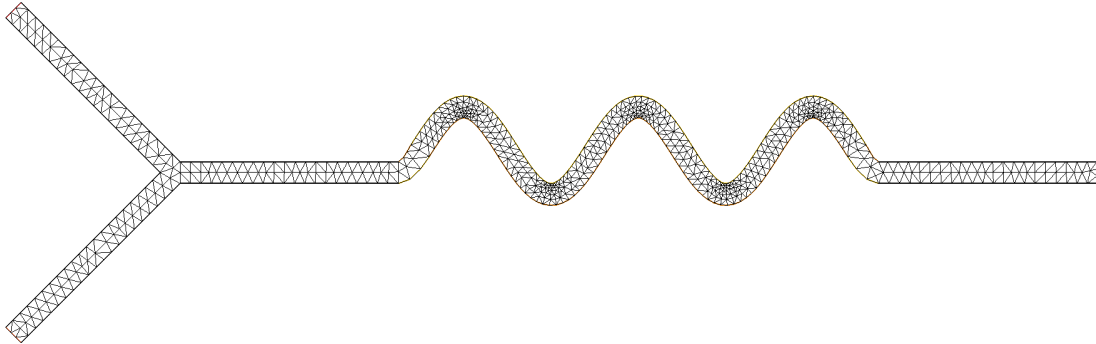


FIGURE 7 – Maillage tube section constante,  $h = 0.05$

## 2 Équations de Navier-Stokes et écoulement

### 2.1 Équation de Stokes instationnaire

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

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho(u \cdot \nabla)u &= \rho g - \nabla p + \rho \eta \Delta u \\ \operatorname{div}(u) &= 0 \end{aligned} \quad (1)$$

Les termes correspondent de gauche à droite aux termes d'inertie, de convection, de pesanteur de pression et de viscosité. Avec :

- $\rho$  la masse volumique du fluide
- $\eta$  sa viscosité
- $g$  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  $\operatorname{Re} = \frac{\bar{x}\bar{u}}{\eta}$ . L'équation devient :

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

Étant donné les dimensions du système :

- $\bar{v} = 10^{-12} \text{ m}^3$
- $\eta = 1,003 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
- $\bar{x} = 10^{-6} \text{ m}$
- $\bar{u} = 10^{-3} \text{ m s}^{-1}$
- $\bar{p} = 10^4 \text{ Pa}$

On néglige alors les termes de convection et de pesanteur en première approximation pour obtenir l'équation de Stokes instationnaire adimensionnée :

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

#### 2.1.1 Formulation variationnelle

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

$$\sqrt{\operatorname{Re}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -\lambda \nabla p + \Delta \mathbf{u} \quad \text{avec } \lambda = \frac{\bar{x}\bar{p}}{\rho \eta \bar{u}} \quad (2)$$

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

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

Les conditions limites aux bords sont mixtes. On prend  $H^1(\Omega)^2$  comme espace variationnel à priori. Soit  $\mathbf{v} \in H^1(\Omega)^2$ , (2) devient :

$$\begin{aligned} \sqrt{\operatorname{Re}} \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{v} &= -\lambda \int_{\Omega} \nabla p \cdot \mathbf{v} + \int_{\Omega} \Delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \\ &= -\lambda \int_{\Omega} [\operatorname{div}(p\mathbf{v}) - p \operatorname{div}(\mathbf{v})] + \int_{\Omega} \Delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \\ &= \int_{\Omega} \lambda p \operatorname{div}(\mathbf{v}) - \int_{\partial\Omega} \lambda p \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} + \int_{\Omega} \Delta \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \end{aligned}$$

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  $\partial_n u_x = \mathbf{n} \cdot \nabla u_x$  avec  $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} = \begin{bmatrix} \partial_n u_x \\ \partial_n u_y \end{bmatrix}$

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

Il reste le terme d'incompressibilité de  $\mathbf{u}$ . Soit  $q \in H^1(\Omega)$ , on a  $\int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{u})q = 0$ .

L'équation (2) devient :

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

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

$$\int_{\Omega} [\lambda p \operatorname{div}(\mathbf{v}) + q \operatorname{div}(\mathbf{u}) - \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v}] + \int_{\partial\Omega} \left[ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} - \lambda p \mathbf{n} \right] \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3)$$

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

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

On calcule donc les valeurs de

$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  pour les instants  $t \in \{0, \tau, 2\tau, \dots, N\tau\}$ ,  $N = \lfloor \frac{T}{\tau} \rfloor$ , à l'aide de

$\mathbf{u}^m(\mathbf{x})$  pour les entiers  $m \in \{0, 1, 2, \dots, N\}$

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 :

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

On distingue les cas suivants :

$s = 0$  : schéma d'Euler explicite

$s = 1$  : schéma d'Euler implicite

$s = \frac{1}{2}$  : schéma d'Euler symplectique (est-ce qu'on en a vraiment besoin ? on l'a pas implémenter, faudrait demander au prof)

Il reste à ajouter l'influence de la température  $\theta$  sur la viscosité, c'est un coefficient qu'on insère devant le terme de viscosité en  $\Delta \mathbf{u} \mapsto \alpha(\theta) \Delta \mathbf{u}$ .

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

$$\boxed{\begin{aligned} \sqrt{\operatorname{Re}} \int_{\Omega} [\mathbf{u}^{m+1} - \mathbf{u}^m] \cdot \mathbf{v} &= \tau \int_{\Omega} [\lambda p \operatorname{div}(\mathbf{v}) + q \operatorname{div}(\mathbf{u}) - \alpha(\theta) [\nabla \mathbf{u}^{m+s} : \nabla \mathbf{v}]] \\ &\quad + \tau \int_{\partial\Omega} \left[ \alpha(\theta) \frac{\partial \mathbf{u}^{m+s}}{\partial \mathbf{n}} - \lambda p \mathbf{n} \right] \cdot \mathbf{v} \end{aligned}} \quad (4)$$



### 2.1.2 Conditions limites aux bords

Dépend de la géométrie, mais je pense qu'on peut montrer qu'on a jamais besoin des termes de bords

## 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 :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = \text{div}(\gamma \nabla c) \quad (5)$$

Le champ de vecteur  $\mathbf{u}$  est un champ vitesse obtenu par la simulation d'un écoulement de Poiseuille à l'aide des équations de Stokes stationnaires ou instationnaires, ou à l'aide de l'implémentation directe du profil parabolique de l'écoulement de Poiseuille. On adimensionne avec  $\bar{c} = 200 \text{ kg.m}^{-3}$

$$\frac{\bar{x}^2}{\bar{t}} \frac{\partial C}{\partial T} + \bar{u} \bar{x} \mathbf{U} \cdot \nabla_X C = \alpha(\theta) \gamma \Delta C$$

### 2.2.1 Formulation variationnelle

Pour l'implémentation, on pose  $A = \frac{\bar{x}^2}{\bar{t}}$  et  $B = \bar{x} \bar{u}$ . Les conditions au bords sont mixtes, on prend comme espace variationnel  $H^1(\Omega)$ . Soit  $v$  un élément de cet espace :

$$\begin{aligned} A \int_{\Omega} \frac{\partial c}{\partial t} \cdot v &= \alpha(\theta) \gamma \int_{\Omega} \Delta c \cdot v - B \int_{\Omega} [\mathbf{u} \cdot \nabla c] v \\ &= \alpha(\theta) \gamma \left[ \int_{\partial\Omega} \nabla c \cdot \mathbf{n} v - \int_{\Omega} \nabla c \cdot \nabla v \right] - B \int_{\Omega} [\mathbf{u} \cdot \nabla c] v \\ &= \alpha(\theta) \gamma \int_{\partial\Omega} \nabla c \cdot \mathbf{n} v - \int_{\Omega} [\alpha(\theta) \gamma \nabla c \cdot \nabla v + B \nabla c \cdot \mathbf{u} v] \end{aligned}$$

On discrétise a dérivée temporelle comme précédemment avec  $s \in [0, 1], m \in \mathbb{N}$ , (5) devient (6)

$$\boxed{A \int_{\Omega} [c^{m+1} - c^m] \cdot v = -\tau \int_{\Omega} [\alpha(\theta) \gamma \nabla c^{m+s} \cdot \nabla v + B \nabla c^{m+s} \cdot \mathbf{u} v] + \tau \alpha(\theta) \gamma \int_{\partial\Omega} \nabla c^{m+s} \cdot \mathbf{n} v} \quad (6)$$

### 2.2.2 Conditions limites aux bords

Les conditions au bords sont :

$$\frac{\partial c}{\partial y} = 0 \text{ sur les bords latéraux / neutres}$$

$$\frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \text{ en sortie}$$

$$c(\mathbf{x}, t) = c, \forall t \in [0, T] \text{ en entrée}$$

### 3 Simulations sur différentes géométries

#### 3.1 Tuyau droit

##### 3.1.1 Écoulement de Poiseuille

##### 3.1.2 Équation de Stokes instationnaires

## **3.2 Géométrie du projet**

### **3.2.1 Écoulement de Poiseuille**

### **3.2.2 Pressions d'entrée et de sortie**

## Conclusion