

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

Mélissa Mansour, José Marques, Elyass Sayd

21 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++.

Table des matières

Introduction	3
1 Géométrie, maillage et modélisation	3
1.1 Tuyau droit	3
1.2 Sinus superposés	4
1.3 Section constante	5
2 Équations de Navier-Stokes et écoulement	7
2.1 Équation de Stokes instationnaire	7
2.1.1 Formulation variationnelle générale	8
2.1.2 Conditions limites aux bords	9
2.1.3 Schéma variationnel totalement discret final	10
2.1.4 Paramètres de simulation	11
2.2 Équation de concentration	12
2.2.1 Formulation variationnelle	12
2.2.2 Conditions limites aux bords	12
2.2.3 Paramètres de simulation	13
3 Simulations sur différentes géométries	14
3.1 Tuyau droit	14
3.1.1 Écoulement de Poiseuille	14
3.1.2 Pressions d'entrée et de sortie	15
3.1.3 Équation de concentration	17
3.2 Géométrie du projet	19
3.2.1 Équation de concentration	19
3.2.2 Écoulement couplé	19
3.2.3 Écoulement diphasique couplé	19
Conclusion	20

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 :

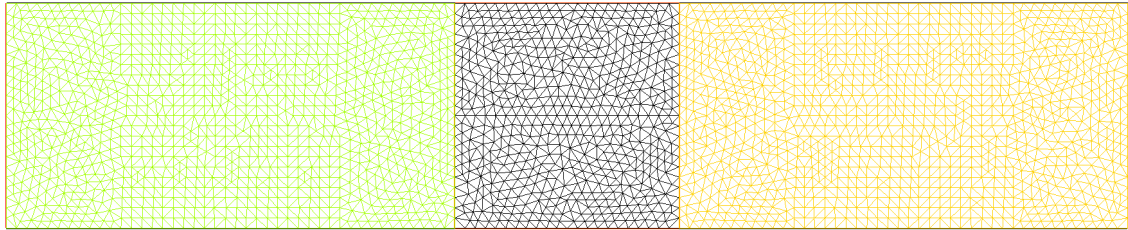


FIGURE 1 – Tube section droite, chauffe définie géométriquement

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. 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 :

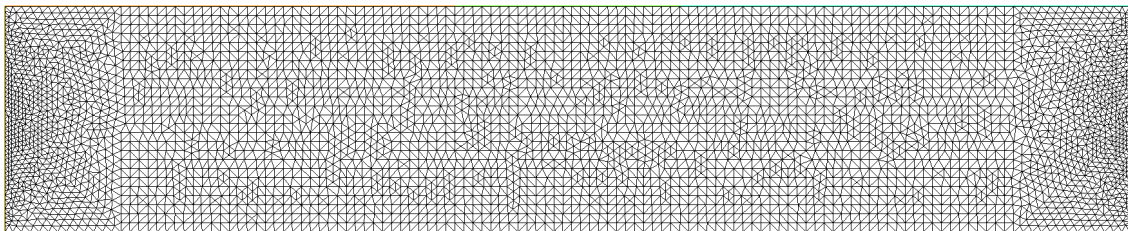


FIGURE 2 – Tuyau droit, chauffe non géométrique

1.2 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 :

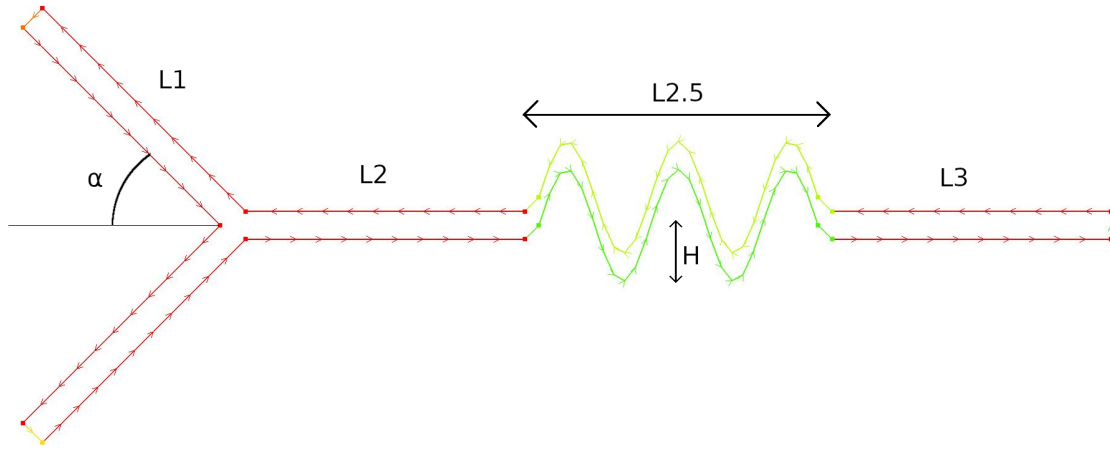


FIGURE 3 – Géométrie sinus superposés

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).

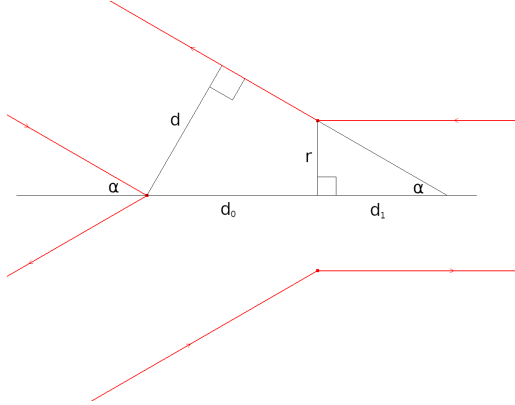


FIGURE 4 – Jonction tubes 1 et 2

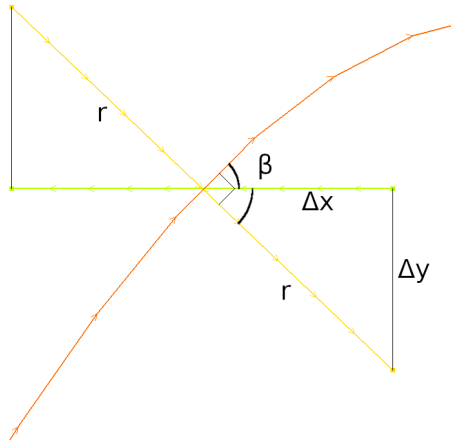


FIGURE 5 – Construction section constante

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.

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

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 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 :

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

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,

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 :

$$\begin{aligned}\begin{aligned}f(x_A) &= y_A \\ f(x_B) &= y_B \\ f'(x_A) &= p_A \\ f'(x_B) &= p_B\end{aligned} &\implies \begin{aligned}a_0 + a_1 x_A + a_2 x_A^2 + a_3 x_A^3 &= y_A \\ a_0 + a_1 x_B + a_2 x_B^2 + a_3 x_B^3 &= y_B \\ a_1 + 2a_2 x_A + 3a_3 x_A^2 &= p_A \\ a_1 + 2a_2 x_B + 3a_3 x_B^2 &= p_B\end{aligned}\end{aligned}$$

$$\implies \begin{bmatrix} 1 & x_A & x_A^2 & x_A^3 \\ 1 & x_B & x_B^2 & x_B^3 \\ 0 & 1 & 2x_A & 3x_A^2 \\ 0 & 1 & 2x_B & 3x_B^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_A \\ y_B \\ p_A \\ p_B \end{bmatrix} \implies X\beta = Y$$

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.

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

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

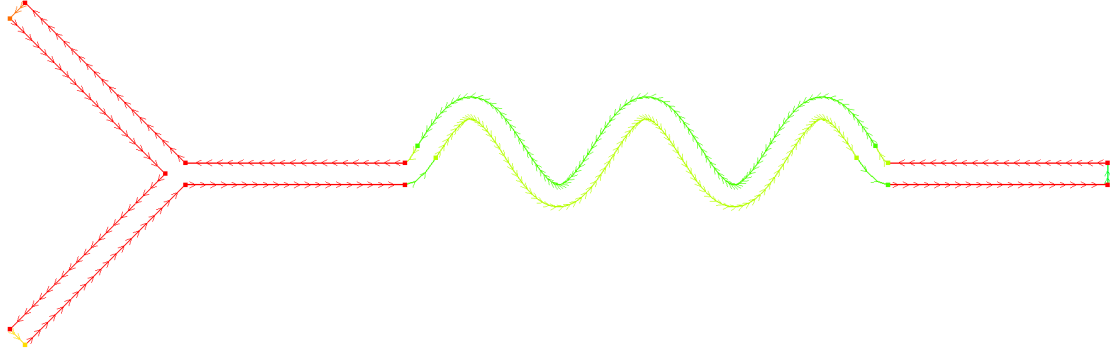


FIGURE 6 – Géométrie tube section constante

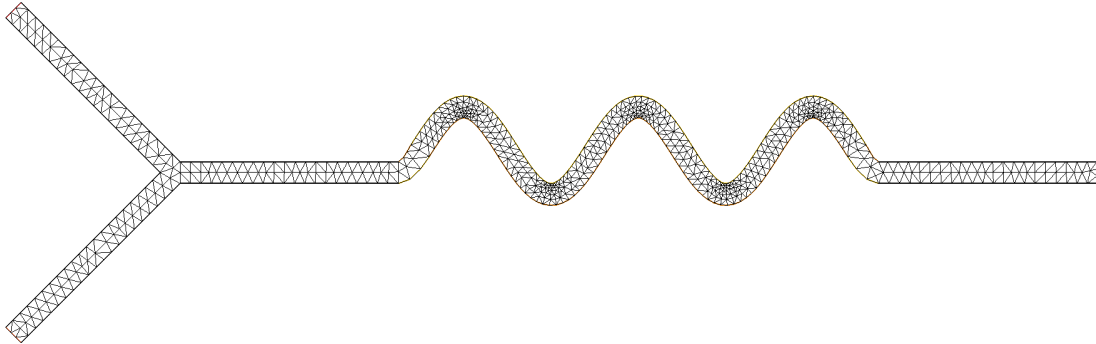


FIGURE 7 – Maillage tube section constante, $h = 0.05$

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 :

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

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

- ρ la masse volumique du fluide (eau)
- η sa viscosité dynamique
- g la pesanteur
- \mathbf{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 $\operatorname{Re} = \frac{\rho \bar{x} \bar{u}}{\eta}$. L'équation devient :

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

Étant donné les dimensions du système :

- $\rho = 10^3 \text{ kg m}^{-3}$
- $\bar{x} = 10^{-6} \text{ m}$
- $\bar{u} = 10^{-3} \text{ ms}^{-1}$
- $\eta = 1,003 \cdot 10^{-3} \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$

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

Ainsi, $\operatorname{Re} = \frac{\rho \bar{x} \bar{u}}{\eta} \ll \frac{\rho \bar{x} \bar{x}}{\eta \bar{t}} = \operatorname{Re}_{\text{local}} \implies \bar{u} \ll \frac{\bar{x}}{\bar{t}} \implies \bar{t} \ll \frac{\bar{x}}{\bar{u}} = \frac{10^{-6}}{10^{-3}} = 10^{-3}$. Mais plus précisément, on peut le négliger en posant

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

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 comparé au fluide qui se déplace à vitesse \bar{u} . Ainsi, en assurant $\bar{u} \ll \frac{\bar{x}}{\bar{t}}$, on a négligé le terme de convection devant celui d'inertie.

Le terme de pesanteur est de l'ordre de $\frac{\rho \bar{x}^2}{\eta \bar{u}} = \frac{10^3 10^{-12}}{10^{-3} 10^{-3}} = 10^{-3} = \operatorname{Re}$. 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 établir \bar{p} , la démonstration est faite en (2.1.2). On peut montrer que ce terme est plus grand que Re si :

$$\begin{aligned} \bar{u} &= \frac{\bar{x}^2 \bar{p}}{2 \eta L} \implies \bar{p} = \frac{2 \eta L}{\bar{x}^2} \approx \frac{2 \cdot 10^{-3} 10^{-3} \cdot L}{10^{-12}} = 2 \cdot 10^6 L \\ \implies \frac{\bar{x} \bar{p}}{\rho \eta \bar{u}} &= \frac{10^{-6} \cdot 2 \cdot 10^6 L}{10^3 10^{-3} 10^{-3}} = 2 \cdot 10^3 L \\ \frac{\bar{x} \bar{p}}{\rho \eta \bar{u}} &> \sqrt{\operatorname{Re}} \implies 2 \cdot 10^3 L > 3 \cdot 10^{-2} \implies L > 1,5 \cdot 10^{-5} \text{ m} = 15 \mu\text{m} = 15 \bar{x} \end{aligned}$$

Ce qui est vérifié pour les tuyaux qu'on simule. Ils sont au moins 10 fois + longs que larges. 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 :

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

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 :

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

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 est une formule d'analyse vectorielle :

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

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 :

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

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 $\text{div}(\nabla u) = \Delta u$. 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 $q \in L^2(\Omega, \mathbb{R})$, on a $\int_{\Omega} \text{div}(\mathbf{u})q = 0$.

L'équation (2) devient :

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

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 :

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

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

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

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 :

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

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 $\Delta \mathbf{u} \mapsto \alpha(\theta, \mathbf{x}) \Delta \mathbf{u}$.

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

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\rho}{\tau} \int_{\Omega} [\mathbf{u}^{m+1} - \mathbf{u}^m] \cdot \mathbf{v} = \int_{\Omega} [p \operatorname{div}(\mathbf{v}) - \alpha(\theta, \mathbf{x}) \eta [\nabla \mathbf{u}^{m+s} : \nabla \mathbf{v}]] \\ \quad + \int_{\partial\Omega} \left[\alpha(\theta, \mathbf{x}) \eta \frac{\partial \mathbf{u}^{m+s}}{\partial \mathbf{n}} - p \mathbf{n} \right] \cdot \mathbf{v} \\ \int_{\Omega} q \operatorname{div}(\mathbf{u}^{m+s}) = 0 \end{array} \right. \quad (4)$$

2.1.2 Conditions limites aux bords

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

Soit $p = p_{\text{entrée}}$ en entrée, $p = p_{\text{sortie}}$ 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

On choisi 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 $u_y(\mathbf{x}) = 0$ pour tout $\mathbf{x} \in \Omega$.
On écrit les équations de Stokes

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

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 a $r = 0$, $R = \bar{x}/2$.

Finalement, $\Delta p = \bar{p} = \frac{8\bar{u}\eta L}{\bar{x}^2} = 8 \frac{10^{-3}10^{-3}L}{10^{-12}} = 8 \cdot 10^6 L$.

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 et on a des conditions de type Neumann mixtes qui imposent une pression à l'entrée et un flux parallèle aux parois latérales à la sortie.

On résume ces conditions aux limites ci-dessous :

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

2.1.3 Schéma variationnel totalement discret final

Finalement, en injectant les conditions limites et en discrétisant la vitesse et la pression en espace avec une méthode éléments finis de Galerkin (on considère des sous-espaces vectoriels de dimensions finies $X_h \subset H_{0,\Gamma_{\text{latéraux}}}^1(\Omega)$ et $M_h \subset L^2(\Omega, \mathbb{R})$ tels que $X_h \xrightarrow{h \rightarrow 0} H_{0,\Gamma_{\text{latéraux}}}^1(\Omega)$ et $M_h \xrightarrow{h \rightarrow 0} L^2(\Omega)$), on obtient la formulation variationnelle discrétisée en temps et en espace :

À chaque pas de temps, on cherche $\mathbf{u}_h^n \in X_h$ et $p_h^n \in M_h$ tels que :

$$\forall (\mathbf{v}_h, q_h) \in X_h \times M_h$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\rho}{\tau} \int_{\Omega} [\mathbf{u}_h^{m+1} - \mathbf{u}_h^m] \cdot \mathbf{v}_h = \int_{\Omega} [p_h \operatorname{div}(\mathbf{v}_h) - \alpha_h(\theta) \eta [\nabla \mathbf{u}_h^{m+s} : \nabla \mathbf{v}_h]] \\ - \int_{\Gamma_{\text{entrée}}} p_{\text{entrée}} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_h - \int_{\Gamma_{\text{sortie}}} (\partial_n \mathbf{u}_{h,\mathbf{x}} - p_{\text{sortie}} \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v}_h \\ \int_{\Omega} \operatorname{div}(\mathbf{u}_h^{m+s}) q_h = 0 \end{array} \right. \quad (5)$$

2.1.4 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 :

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c = \text{div}(\gamma \beta(\mathbf{x}, \theta) \nabla c) \quad (6)$$

Le champ de vecteur \mathbf{u} est un champ vitesse obtenu par la simulation des équations de Stokes stationnaires ou instationnaires (qui donne un profil de Poiseuille), ou à l'aide de l'implémentation directe du profil parabolique de l'écoulement 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 (6) devient :

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

2.2.1 Formulation variationnelle

Les conditions au bords sont mixtes, on prend comme espace variationnel $H^1(\Omega)$. Soit v un élément de cet espace :

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

On discrétise la dérivée temporelle comme précédemment avec $s \in [0, 1]$, $m \in \mathbb{N}$, (6) devient (7)

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{1}{\tau} \int_{\Omega} [c^{m+1} - c^m] \cdot v &= - \int_{\Omega} [\gamma \theta(\mathbf{x}) \nabla c^{m+s} \cdot \nabla v + \nabla c^{m+s} \cdot \mathbf{u} v] \\ &\quad + \gamma \int_{\partial\Omega} \theta(\mathbf{x}) \nabla c^{m+s} \cdot \mathbf{n} v \end{aligned}} \quad (7)$$

On peut construire la fonction $\theta(\mathbf{x})$ en interpolant à l'aide d'éléments P2 une fonction de température constante sur les différents circuits.

2.2.2 Conditions limites aux bords

Les conditions au bords sont :

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

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

$$c(\mathbf{x}, t) = \bar{c} = 200 \text{ kgm}^{-3}, \forall t \in [0, T] \text{ en entrée}$$

Expliquer que ces termes vont annuler l'intégrale de bord (je crois)

2.2.3 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 aient un rayon beaucoup plus élevé que celles d'eau afin de voir apparaître des forces de viscosité. Disons $r = 10^{-8}m$. Donc $\gamma \approx 7.32 \cdot 10^{-14}$

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

3 Simulations sur différentes géométries

3.1 Tuyau droit

3.1.1 Écoulement de Poiseuille

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 $L_c = \bar{x}$.

La pression à imposer en entrée pour avoir une vitesse \bar{u} vaut donc

$p_{\text{entrée}} = \bar{p} = 8 \cdot 10^6 \cdot 5 \cdot 10^{-6} = 40 Pa$ 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.

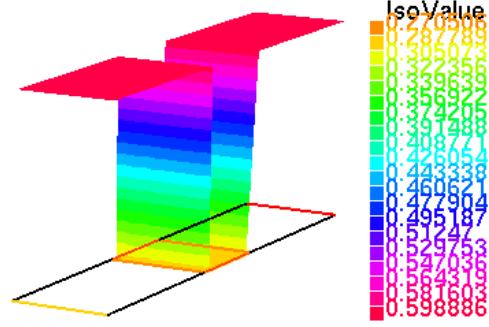


FIGURE 8 – Fonction alpha viscosité adaptative

Voici les résultats de simulation :

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.

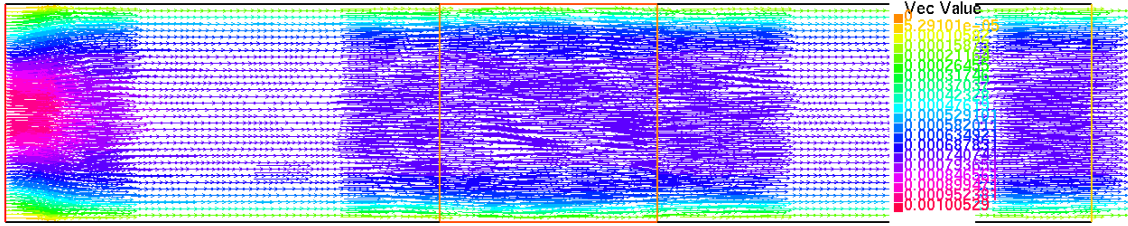


FIGURE 9 – Tuyau droit, écoulement de Poiseuille imposé, instant initial

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

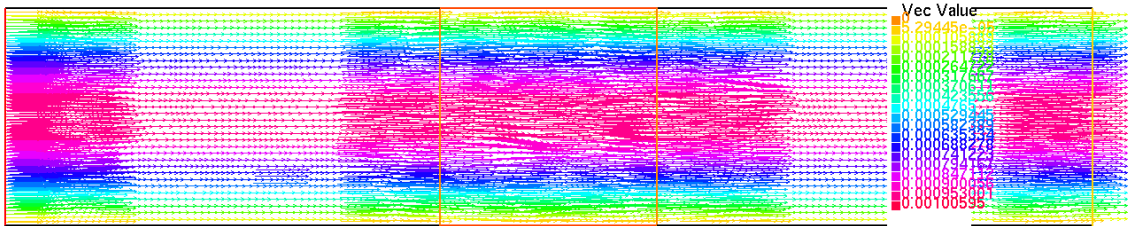


FIGURE 10 – Tuyau droit, écoulement de Poiseuille imposé, instant final

Pour la pression, on voit bien qu'elle mets le fluide en mouvement, étant donné la chute de pression en entrée entre le moment initial et final. 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.

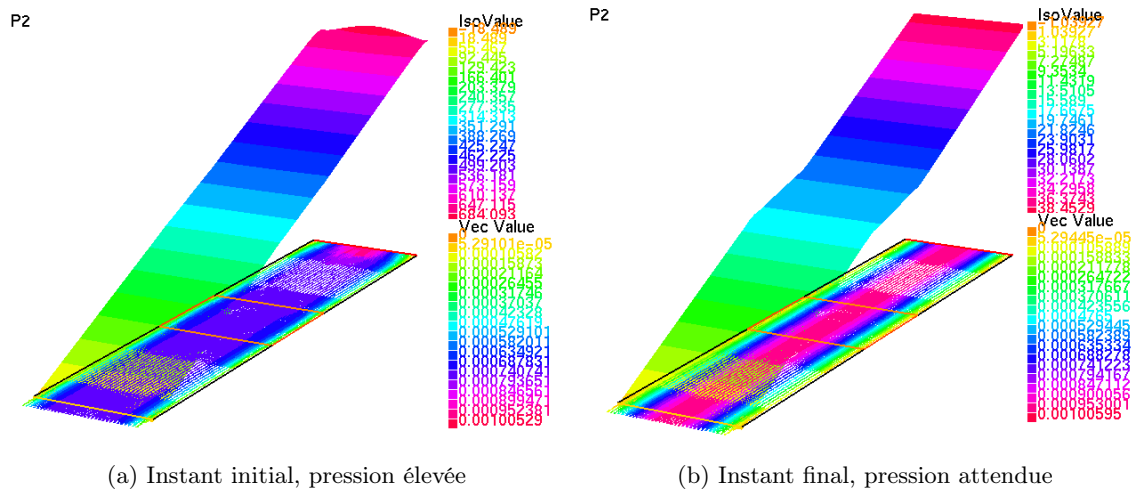


FIGURE 11 – Tuyau droit, écoulement de Poiseuille imposé

3.1.2 Pressions d'entrée et de sortie

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 :

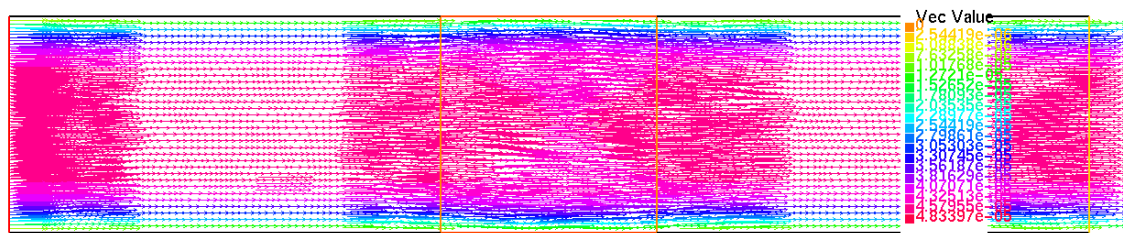


FIGURE 12 – Tuyau droit, pressions imposées, instant initial

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 !

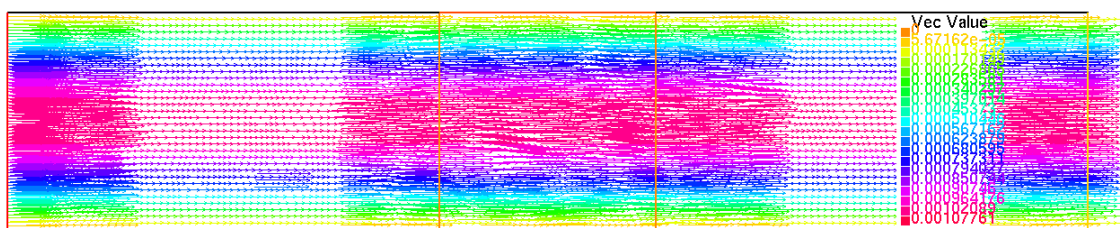
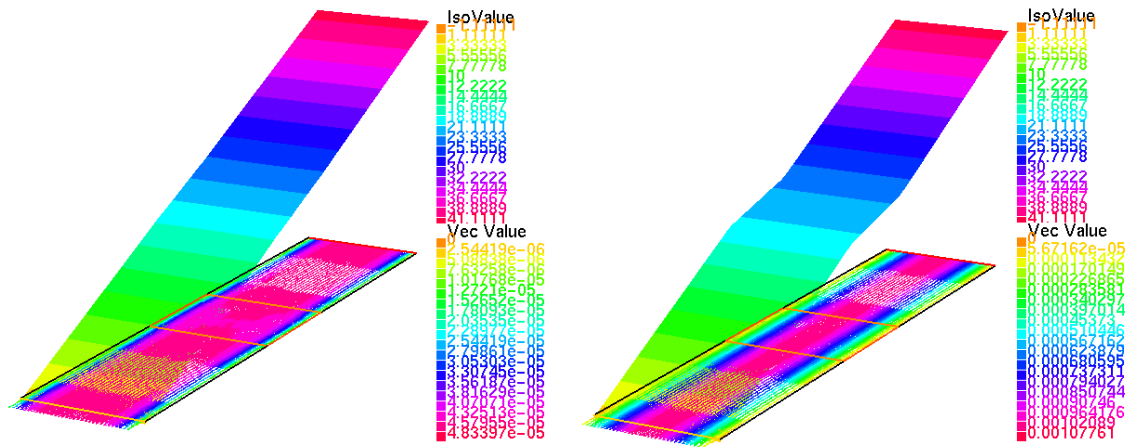


FIGURE 13 – Tuyau droit, pressions imposées, instant final

Ici la chute de pression est constante, vue qu'imposée. Le long du tuyau, la chute de pression est toujours affine par morceaux.

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.



(a) Instant initial, vitesse faible

(b) Instant final, vitesse attendue

FIGURE 14 – Tuyau droit, pressions imposées

3.1.3 Équation de concentration

Pour l'équation de concentration, voici ci-contre 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.

Voici les résultats de simulation :

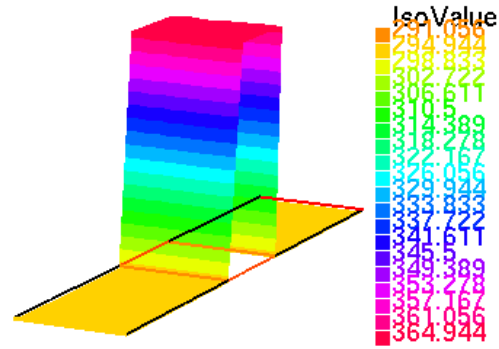


FIGURE 15 – Fonction thêta température

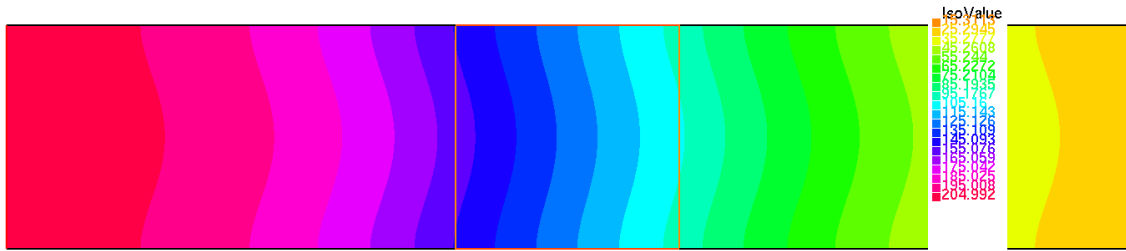


FIGURE 16 – Tuyau droit, concentration imposée, chauffe géométrique

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 :

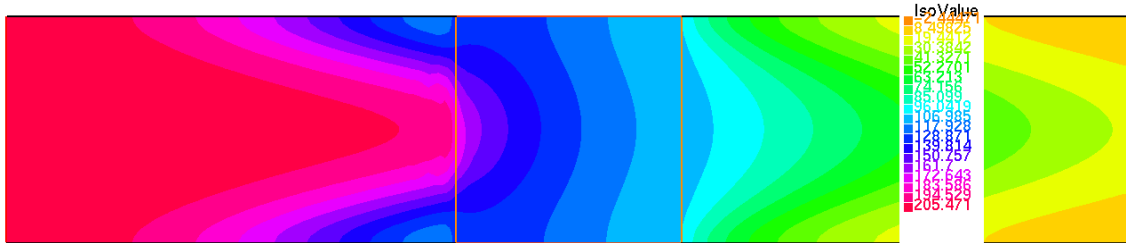


FIGURE 17 – Tuyau droit, concentration imposée, effet diffusif exagéré

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 :

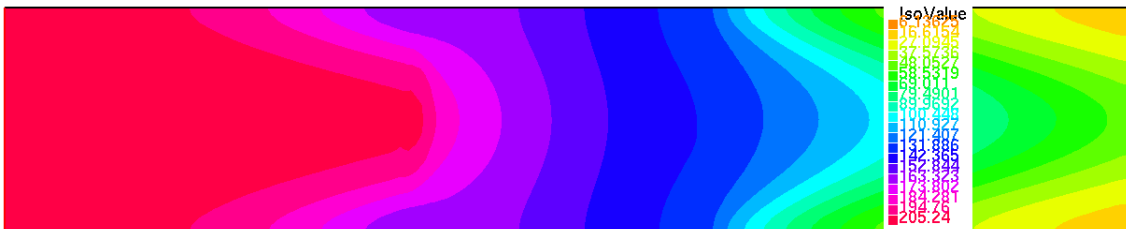


FIGURE 18 – Tuyau droit, concentration imposée, effet diffusif exagéré, chauffe non géométrique

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

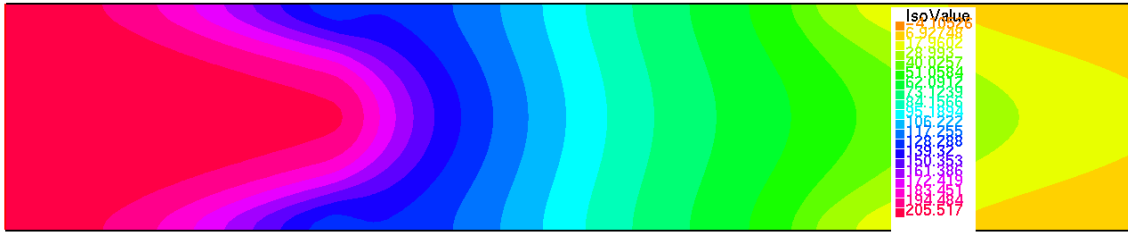


FIGURE 19 – Effet diffusif exagéré, chauffe non géométrique, température lissée

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

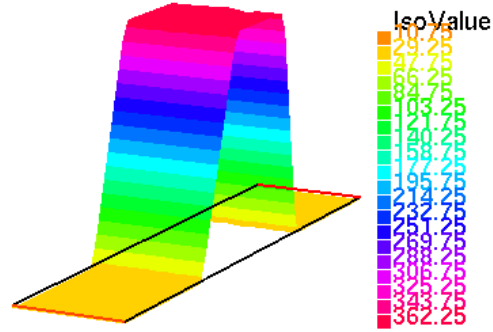


FIGURE 20 – Fonction θ température lissée

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

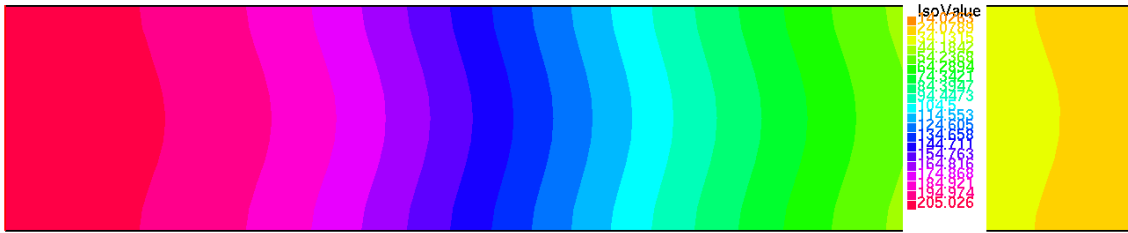


FIGURE 21 – Effet diffusif réel, chauffe non géométrique, température lissée

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

Pour le cas d'un écoulement diphasique, on peut supposer deux phases de viscosités différentes.

3.2 Géométrie du projet

subsubsectionÉquation de Stokes instationnaires

3.2.1 Équation de concentration

3.2.2 Écoulement couplé

3.2.3 Écoulement diphasique couplé

Conclusion