



Modélisation et étude numérique d'écoulements de fluides complexes en micro-fluidique

Julien Dambrine

► To cite this version:

Julien Dambrine. Modélisation et étude numérique d'écoulements de fluides complexes en micro-fluidique. Mathématiques [math]. Université Sciences et Technologies - Bordeaux I, 2009. Français. NNT: . tel-00472328

HAL Id: tel-00472328

<https://theses.hal.science/tel-00472328>

Submitted on 11 Apr 2010

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



N° d'ordre : 3918

THÈSE

PRÉSENTÉE A

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX 1

ÉCOLE DOCTORALE DE MATHÉMATIQUES ET INFORMATIQUE

Par **DAMBRINE, Julien**

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : Mathématiques Appliquées et Calcul Scientifique

MODÉLISATION ET ÉTUDE NUMÉRIQUE DE QUELQUES ÉCOULEMENTS DE FLUIDES COMPLEXES EN MICRO-FLUIDIQUE

Thèse dirigée par COLIN, Thierry et COLIN, Mathieu

Soutenue le : 07/12/09

Après avis de :

M. BOYER, Franck, Université Paul Césanne (Aix Marseille III), Professeur

M. LAGOUTIÈRE, Frédéric, Université Paris-Sud 11, Professeur

Devant la commission d'examen formée de :

M. BOYER, Franck, Université Aix-Marseille III, Professeur (rapporteur)

M. COLIN, Mathieu, Université Bordeaux 1, Maître de conférences (directeur de thèse)

M. COLIN, Thierry, Université Bordeaux 1, Professeur (directeur de thèse)

M. IOLLO, Angelo, Université Bordeaux 1, Professeur (examineur)

M. LAGOUTIÈRE, Frédéric, Université Paris-Sud 11, Professeur (rapporteur)

M. MIRANVILLE, Alain, Université de Poitiers, Professeur (président du jury)

M. SALMON, Jean-Baptiste, CNRS, chargé de recherches (invité)

Remerciements

Mes remerciements s'adressent en premier lieu à Thierry Colin et Mathieu Colin grâce à qui, durant ces trois années, j'ai pu bénéficier d'un excellent encadrement. Malgré vos obligations respectives, vous avez su trouver très régulièrement du temps pour des séances de travail à l'issue desquelles, me semble-t-il, vous avez toujours trouvé matière à faire avancer le sujet. Cette thèse s'est déroulée de façon très naturelle et sans angoisse, je pense que vous y êtes pour beaucoup. Je vous en suis donc infiniment reconnaissant.

Franck Boyer et Frédéric Lagoutière m'ont fait l'honneur d'accepter de rapporter ce manuscrit, je les remercie d'avoir su prendre du temps pour le lire en détail. Je remercie également Alain Miranville, qui a accepté de présider mon jury de thèse. Je remercie aussi Angelo Iollo pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail en acceptant de faire partie du jury.

J'ai eu l'occasion de travailler régulièrement avec Jean Baptiste Salmon durant ces trois années. Je considère que cette collaboration a été une véritable chance pour moi. Je te remercie pour tout ce que j'ai pu apprendre à ton contact tant en physico-chimie que sur le plan de la démarche scientifique en général. Je remercie également Annie Colin et Chloé Masselon, avec qui nous avons travaillé sur les écoulements de micelles géantes, pour l'enthousiasme qu'elles ont montré lors de nos diverses séances de travail ainsi que leur point de vue très éclairant sur ces problèmes.

Je voudrais remercier spécialement Olivier Saut, pour l'aide qu'il m'a apportée dans l'implémentation dans le code ELYSE des diverses méthodes exploitées dans ce manuscrit, ainsi que pour sa patience infinie face à mes nombreuses sollicitations. Je remercie toute l'équipe Mc2 qui a constitué un excellent environnement scientifique pour le doctorant que je fus. J'espère pouvoir continuer de travailler avec quelques uns de ses membres aussi longtemps que possible.

Merci à toute ma famille pour son amour et son soutien et en particulier ma mère qui a toujours su trouver les mots pour me faire avancer dans les grand moments de doute, ainsi que mon père pour tous ces dimanches passés à réviser les maths en vue du contrôle du lundi !

Merci à Elisa, grâce à qui "it's getting better all the time!".

Merci aux copains co-doctorants Roro, Arthur-Michel!, Sylvain ("sésame ouvre toi!") et Adam Laden, nos rendez-vous hebdomadaires au Yamat' me manquent cruellement (du coup merci aussi aux serveurs du Yamat' pour avoir supporté si longtemps de tels énergumènes). Merci aussi à Magnolia, sans qui je n'aurais jamais eu vent de ce sujet de thèse ! Merci aux copains pas-co-doctorants Cyril, Mickaël, Mathieu, Adrien, Laurent, Kanti, Mimil et tant d'autres pour m'aider à sortir ma tête du bocal (vaste, certes...) des maths appliquées.

Résumé

Ce document est consacré à l'étude de quelques écoulements de fluides complexes appliquée à la micro-fluidique. Deux études indépendantes sont effectuées : d'une part l'étude des mélanges de fluides Newtoniens dans des micro-canaux fins, et d'autre part l'étude d'écoulements de Micelles géantes (fluides non-Newtoniens). Dans chaque étude on traite tout d'abord des modèles en détail, puis on effectue une étude numérique des modèles en question.

Dans la première partie nous traiterons de l'hydrodynamique de mélanges de fluides de différentes viscosités en régime de Stokes. Nous dériverons alors un modèle réduit de type Reynolds à partir modèle complet de Stokes. Cette réduction de modèle est particulièrement adaptée à des écoulements dans des micro-canaux dont le rapport d'aspect largeur/hauteur est important. Les modèles obtenus au final peuvent être 2D ou bien 2.5D (2D pour la pression 3D pour le mélange) selon que l'on souhaite ou non prendre en compte les variations de viscosité dans la direction "fine". De plus, les conditions aux limites en haut et au fond du canal pour le modèle complet (canal à reliefs, motifs de matériaux glissants) apparaissent dans le modèle réduit comme de simples coefficients de résistance à l'écoulement. Un résultat d'existence de solution est donné pour le modèle 2D. Une méthode numérique est alors donnée pour approcher ces modèles. Cette méthode numérique est basée sur une discrétisation des équations sur une grille cartésienne, ce qui permet une résolution rapide des systèmes linéaires obtenus après discrétisation. Deux études numériques sont alors menées, tout d'abord une étude de l'inter-diffusion de deux fluides dont les viscosités sont différentes dans des expériences dites de "co-flow", puis une autre étude sur des écoulements mono-fluides pour des canaux à reliefs et à surfaces glissantes utilisant des modèles 2.5D adaptés.

La deuxième partie de ce document est consacrée à l'étude d'écoulements micro-fluidiques de micelles géantes en solution. Ce type particulier de fluide a tendance à former spontanément dans l'écoulement des phases dont les propriétés mécaniques peuvent être très différentes. Ces phases sont appelées communément "bandes de cisaillement", et l'origine de la formation de ces bandes de cisaillement tient dans les différentes conformations (conformation alignée, conformation enchevêtrée) possibles pour les micro-structures formant ces fluides. Un modèle particulier a été étudié pour décrire de tels écoulements : le modèle de Johnson-Segalman diffusif. Ce dernier permet de rendre compte de la transition entre phase alignée et phase enchevêtrée lorsque l'écoulement est cisailé. Toutefois, ce modèle a un comportement instable dans un écoulement possédant un composante d'élongation suffisamment forte. Il est donc nécessaire de modifier le modèle par l'ajout d'une non-linéarité (quadratique) dans la loi de comportement. Une méthode numérique a ensuite été développée afin d'étudier le modèle dans diverses situations. Deux problèmes ont été mis en lumière dans l'analyse numérique des équations : un problème de stabilité lié au couplage nécessaire entre la loi de comportement du fluide et la loi de conservation de la quantité de mouvement, et un problème d'oscillations parasites sur la contrainte. Le premier problème peut être résolu par la détermination d'une nouvelle condition de stabilité sur le système, et le deuxième par l'ajout systématique d'un terme de diffusion dans les équations. Une première étude concernant la formation de bandes de cisaillement dans un canal droit a alors été menée. Cette étude a permis en particulier de déterminer le rôle exact de la diffusion dans le modèle. Une deuxième étude concernant des écoulements 3D dans des jonctions micro-fluidiques en T a permis de mieux comprendre les phénomènes étranges observés sur la répartition des débits dans les branches de sortie de ces jonctions.

Table des matières

Introduction	11
1) La micro-fluidique	11
La micro-fluidique	11
2) Les problèmes de mélange dans l'approximation de lubrification	14
Les problèmes d'inter-diffusion	14
3) Les écoulements de solutions de micelles géantes	18
Les écoulements de solutions de micelles géantes	18
 I Mélanges Newtoniens dans des domaines fins, modèle de Reynolds	 25
1 Hydrodynamique d'un mélange	29
1.1 Le suivi d'un mélange	29
1.2 Modèle de Stokes pour un mélange	32
1.2.1 Construction sur la vitesse "volumique"	32
1.2.2 Construction sur la vitesse "massique"	33
1.2.3 Discussion	34
 2 Approximation de Hele-Shaw	 35
2.1 Modèle initial et conditions aux limites	35
2.2 Adimensionnements	36
2.3 Réduction du modèle	38
2.3.1 Approximation de Hele-Shaw	39
2.3.1.1 Conditions d'adhérence sur un canal à reliefs	40
2.3.1.2 Conditions de glissement sur un canal canal plat	41
2.3.2 Mise en forme des équations sur V et P	42
2.3.3 Equation sur ϕ , modèles 2D et 2.5D	43
2.4 Modèles complets et conditions aux limites	44
2.4.1 Modèles 2.5D	44
2.4.2 Modèles 2D	46
2.5 Un résultat d'existence sur le modèle 2D	47
 3 Méthodes numériques	 51
3.1 Discrétisation en temps	51
3.2 Discrétisation en espace	52
3.2.1 Traitement des problèmes elliptiques	53
3.2.1.1 Discrétisation de l'équation	54
3.2.1.2 Conditions aux limites	55

3.2.1.3	Validation du code	56
3.2.2	Calcul des vitesses	59
3.2.2.1	Discrétisation de la loi de Darcy : calcul de u et v	59
3.2.2.2	Intégration numérique : calcul des coefficients K_1 et K_2	59
3.2.2.3	Calcul des vitesses w	60
3.2.3	Traitement du transport	60
3.2.3.1	Le schéma WENO 5	60
3.2.3.2	Validation du code	62
4	Application : expériences de co-flow	65
4.1	Description du problème et notations	66
4.2	Un cas de validation : le déplacement visqueux	67
4.3	Exploitation des simulations numériques	69
4.3.1	Données expérimentales connues	69
4.3.2	Positionnement de l'interface, conditions d'entrée	71
4.3.3	Estimation du coefficient de diffusion	71
4.3.4	Un déplacement de la zone de mélange à l'échelle longue	71
4.4	Conclusion et perspectives	75
5	Autres applications, limitations du modèle	77
5.1	Ajouts de reliefs	77
5.2	Surfaces de glissement	78
II	Hydrodynamique des systèmes de micelles géantes, effets de surface	83
6	Un modèle pour les écoulements de micelles géantes	87
6.1	Micelles géantes	87
6.2	La loi de comportement	89
6.2.1	Le modèle de Johnson-Segalman	90
6.2.2	Comportement en cisaillement	90
6.2.3	Comportement en élongation	92
6.2.4	L'ajout d'une non-linéarité	92
6.2.5	L'ajout d'un terme de diffusion	93
6.3	Le modèle complet	94
6.3.1	Version adimensionnée du modèle	95
6.4	Conditions aux limites	96
6.5	Modèles réduits	97
6.5.1	Modèle "Poiseuille" 2D	97
6.5.2	Modèle "Poiseuille" 1D	98
7	Méthodes numériques	101
7.1	Discrétisation en temps	101
7.2	Discrétisation en espace	103
7.2.1	Traitement de l'incompressibilité	103
7.2.2	Discrétisation du problème de Stokes	104
7.2.2.1	Discrétisation des équations	104
7.2.2.2	Conditions aux limites	106
7.2.2.3	Validation du code	106

7.2.3	Calcul de $\nabla \cdot \sigma_p$	107
7.2.4	Traitement de la loi de comportement	108
7.2.4.1	Calcul de ∇V	109
7.3	Domaines à géométrie complexe, méthode de pénalisation	109
7.3.1	Principe	110
7.3.2	Validation du code	111
7.3.2.1	Problème elliptique scalaire : condition de Dirichlet	111
7.3.2.2	Problème elliptique scalaire : condition de Neumann	112
7.4	Problèmes de stabilité	113
7.4.1	Condition de stabilité en temps	113
7.4.2	Bruit numérique pour $\beta = 0$	116
8	Bandes de cisaillement dans un canal droit	121
8.1	Description du problème	121
8.2	Formation de bandes de cisaillement	124
8.3	Nécessité du terme de diffusion	124
8.4	Influence des effets non-locaux sur l'écoulement	129
8.5	Conclusion et perspectives	129
9	Écoulements dans des jonctions micro-fluidiques	133
9.1	Description du problème	134
9.2	Première approche : algorithme de recherche des débits	135
9.2.1	Principe	135
9.2.2	Relation débit/pression pour un fluide non-Newtonien	136
9.2.3	Résultats, phénomène de bouchage	137
9.2.4	Les insuffisances de cette approche	137
9.3	Deuxième approche : simulations directes	139
9.3.1	Nécessité de la non-linéarité quadratique dans le modèle	139
9.3.2	Jonctions asymétriques : $\frac{L_2}{L_1} = 2$	141
9.3.3	Jonctions faiblement asymétriques : $\frac{L_2}{L_1} \sim 1$	141
9.3.4	Jonction symétriques	143
9.4	Conclusion et perspectives	145
	Conclusion	151
	Annexes	157
	Annexe A : Equivalence des modèles "massique" et "volumique" dans l'approximation de Hele-Shaw	157
	Annexe B : Calculs des comportements en cisaillement et en élongation pour le modèle de Johnson-Segalman	161
	Annexe C : Ecriture de la loi de comportement de Johnson-Segalman dans la notation de Voigt	165
	Annexe D : Discrétisation des sous-modèles Poiseuille 1D et 2D	167

Introduction

Ce document est consacré à l'étude de quelques écoulements de fluides complexes en micro-fluidique. Deux cas sont étudiés en particulier : le cas du mélange de fluides miscibles et le cas des écoulements de micelles géantes en solution. Ces deux exemples qui semblent très différents sont réunis par le contexte de l'écoulement dans lequel ils sont étudiés : la micro-fluidique. Les écoulements en micro-fluidique, laissent apparaître, du fait des petites échelles mises en jeu, des propriétés complexes sur les fluides telles que des viscosités de mélange, de la visco-élasticité, une tension de surface, des problèmes de ligne triple, etc...

Cette thèse a été co-financée par l'INRIA et la Région Aquitaine. Les résultats numériques exposés dans la première partie ont été obtenus grâce à un code Fortran 90 écrit par l'auteur. Les résultats numériques montrés dans la deuxième partie ont été obtenus dans le cadre du développement de la plate forme de calcul en micro-fluidique ELYSE, écrite en C++, projet initié en 2006 par Olivier Saut.

Dans cette introduction, nous présentons tout d'abord le cadre général de la thèse : les écoulements micro-fluidiques (section 1)). Par la suite, nous introduisons les deux problèmes traités dans ce document : La modélisation des mélanges dans l'approximation de lubrification (section 2)) et les écoulements de solutions de micelles géantes (section 2)).

1) La micro-fluidique

Par définition, la micro-fluidique recouvre l'étude des écoulements de liquides ou de gaz dans des micro-canaux. Ces canaux, fabriqués ou naturels (voir Fig 0.1), ont une section transverse dont la taille varie de la centaine de microns au millimètre. Par comparaison, la section transverse d'un cheveu a une taille caractéristique de $100\text{ }\mu\text{m}$. Dans ce document, nous nous concentrons en particulier sur les écoulements dans des micro-canaux artificiels.

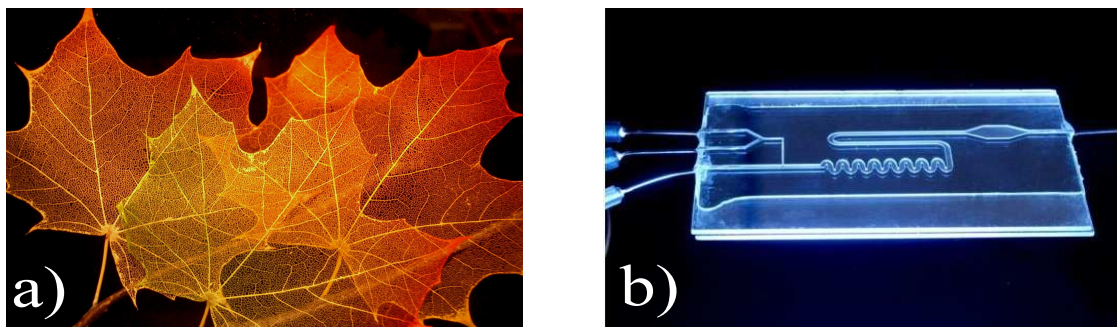


FIGURE 0.1 – Différents exemples de micro-fluidique. a) veines dans une feuille d'érable, b) puce micro-fluidique fabriquée au L.O.F. Images tirées de <http://fr.wikipedia.org/>, et <http://www.lof.cnrs.fr/>.

Généralités

D'un point de vue historique, l'étude des écoulements micro-fluidiques est un parfait exemple de recherche conduite par les applications. En effet, c'est tout d'abord la nécessité de disposer d'outils d'analyse chimique, allant de pair avec les progrès importants en optique qui ont favorisé l'émergence de la recherche en micro-fluidique. Les applications visées à l'époque étaient d'une part la détection de matériel chimique ou biologique pouvant servir dans des attentats, et d'autre part le séquençage de l'ADN. C'est cette dernière application qui a amené le plus de progrès sur le plan du perfectionnement des techniques de fabrication de puces micro-fluidiques. Dès lors, un ensemble d'éléments de contrôle (micro-pompes, senseurs, actuateurs, etc...) ont été conçus afin de pouvoir répondre à ce besoin croissant d'analyse chimique à haut débit.

Aujourd'hui, les applications de la micro-fluidique recouvrent également l'analyse de propriétés mécaniques sur les fluides (Rhéologie). Grâce à cet outil, il est aujourd'hui possible de mesurer des viscosités, des propriétés élastiques, des tensions de surface, le tout en parallèle, et presque aussi efficacement qu'avec les instruments classiques de rhéologie (viscosimètre couette, viscosimètre élongationnel). Plus récemment encore, la micro-fluidique a été envisagée comme un milieu poreux modèle. Pour certains types de fluides, dits non-Newtoniens, les écoulements dans des milieux poreux ne peuvent être décrits grâce à des modèles simples du type loi de Darcy. En construisant des réseaux de micro-canaux, on peut reconstituer les conditions d'un écoulement dans un milieu poreux. Des observations directes dans ces réseaux de micro-canaux transparents permettent alors de mieux comprendre les mécanismes mis en jeu dans les écoulements de ces fluides complexes en milieu poreux. La principale application visée ici est la récupération assistée du pétrole.

Modélisation des écoulements micro-fluidiques

On considère d'ores et déjà que le fluide que l'on étudie est incompressible. Pour décrire le mouvement des fluides, on introduit les équations de Navier-Stokes :

$$\begin{cases} \mathcal{R}e (\partial_t V + V \cdot \nabla V) + \nabla \cdot \sigma = \nabla P, \\ \nabla \cdot V = 0, \end{cases}$$

où $V = (u, v, w)$ représente la vitesse du fluide, P la pression et σ le tenseur des contraintes internes du fluide. Le nombre $\mathcal{R}e$, sans dimension, appelé nombre de Reynolds, représente le rapport entre les forces inertielles et les forces visqueuses du fluide, il est défini par :

$$\mathcal{R}e = \frac{V_0 L}{\nu},$$

où V_0 représente une vitesse caractéristique de l'écoulement, L une taille caractéristique (par exemple la section transversale du canal), ν la viscosité cinématique du fluide. Dans le cas des écoulements de liquides dans des micro-canaux, la valeur de ce nombre de Reynolds est généralement très inférieure à 1. Il est donc communément admis de négliger les effets inertiels dans ces écoulements de petite dimension. Les équations de Navier-Stokes deviennent alors :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \sigma = \nabla P, & (0.1) \\ \nabla \cdot V = 0. & (0.2) \end{cases}$$

Le problème de Stokes ainsi formulé n'est toutefois pas fermé car on ne sait toujours rien sur σ . La science qui permet de relier σ à V s'appelle la Rhéologie. L'exemple le plus simple de Rhéologie, celle des fluides Newtoniens prescrit une relation linéaire entre la contrainte σ et le tenseur des taux de déformation $D[V]$:

$$\sigma = 2\eta D[V] = 2\eta \frac{\nabla V + \nabla V^t}{2}, \quad (0.3)$$

où η représente la viscosité du fluide. Dans cette thèse on s'intéresse à deux cas particuliers d'écoulements micro-fluidiques : d'une part les écoulements de mélanges de fluides Newtoniens, et d'autre part les écoulements de micelles géantes en solution. Le point crucial de la modélisation est d'exprimer le tenseur des contraintes à partir des données du problème. Par exemple, dans le cas du mélange de fluides Newtoniens, il est difficile d'exprimer des grandeurs de mélange (vitesse d'un mélange, contrainte d'un mélange.). Dans le deuxième cas étudié, concernant les écoulements de micelles géantes, la difficulté est de choisir une loi de comportement parmi les nombreuses lois existantes (on peut citer par exemple [31], [13], [2]) .

En plus de ce problème de fermeture, le choix des conditions aux limites a ici une importance capitale. Suivant les matériaux servant à la fabrication des micro-canaux, et la nature du fluide que l'on souhaite étudier, les conditions aux limites à adjoindre aux équations (0.1-0.2) vont être différentes. En mécanique des fluides, on utilise généralement le fait qu'un fluide visqueux a tendance à adhérer sur les bords du canal et donc que la vitesse du fluide est nulle sur ce même bord. Cependant, des traitements particuliers sur la surface des canaux (traitement chimique et contrôle des rugosités) permettent de mettre en évidence l'importance des phénomènes physiques à proximité de la paroi. Selon les cas, les effets de glissement peuvent devenir non-négligeables.

Ce qui caractérise donc les écoulements en micro-fluidique et les écoulements à petite dimensions en général, c'est la variété des situations ou s'expriment des propriétés mécaniques qui ne se verraient pas à grande échelle ainsi que la diversité des modèles qui leurs sont associés, que ce soit pour la modélisation du fluide lui même ou bien son comportement à proximité du bord.

Simulation numérique en micro-fluidique

Une fois que les modèles sont validés du point de vue de leur consistance physique, nous prescrivons une discrétisation des équations qui leurs sont associés afin de pouvoir effectuer des simulations numériques. Dans tous les problèmes posés dans cette thèse, l'approche envisagée est de discrétiser les équations sur une grille cartésienne. Ce choix se justifie principalement par la rapidité de résolution qu'offre la discrétisation sur grille cartésienne, les conditionnements de tous les systèmes approchés ainsi construits étant généralement meilleurs que si l'on discrétisait les équations sur des maillages non-structurés. De plus cette approche offre une possibilité de monter en ordre simplement (les schémas les plus simples sont d'ordre 2). Outre ces avantages, ces schémas possèdent deux propriétés essentielles : la conservation des flux et le principe du maximum. La première propriété est très importante car, en mécanique des fluides, on traite essentiellement de lois de conservation. La deuxième propriété est essentielle dans le cas où l'on traite des systèmes fortement couplés, et où la diffusion joue un rôle prédominant, ce qui est le cas de tous les modèles étudiés dans ce document.

Du point de vue technique, les principales difficultés propres à la simulation d'écoulements en micro-fluidique sont liées aux conditions aux limites. Tout d'abord, il est difficile de prendre en compte des canaux à géométrie complexe avec l'approche de discrétisation sur une grille cartésienne mentionnée ci-dessus. Ce problème peut être partiellement résolu grâce à des techniques de pénalisation qui permettent, moyennant l'ajout de termes dans les équations, de prescrire des conditions aux limites "immergées" dans le domaine de calcul (voir [51] pour le détail des méthodes). Ces méthodes nécessitent d'augmenter la taille du domaine de calcul afin que ce dernier couvre totalement le domaine pénalisé, provoquant ainsi une augmentation significative de la taille mémoire nécessaire pour le calcul. De plus, si l'on souhaite prendre en compte des domaines dont la géométrie est très complexe, la pénalisation peut engendrer une perte de précision sur le schéma. Toutefois, les cas considérés dans cette thèse portent sur des canaux dont les murs sont parallèles aux lignes du maillage cartésien (section rectangulaire, canaux droits, formes de T). Dans ce contexte, la perte de précision n'est donc pas trop

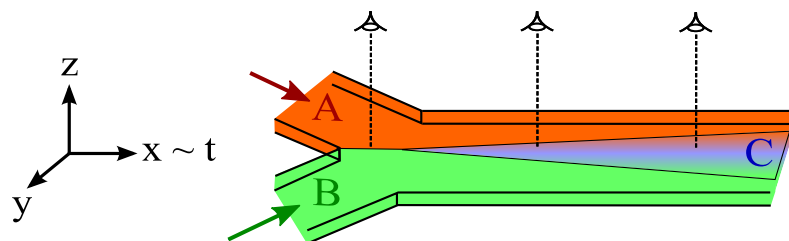


FIGURE 0.2 – Représentation schématique d’une expérience de ”co-flow” mettant en scène deux réactifs A et B suivant la réaction totale : $A + B \rightarrow C$.

importante. Des travaux récents [27] laissent tout de même entrevoir une possibilité de prendre en compte des géométries plus complexes sans perte de précision .

La deuxième grande difficulté technique est liée aux conditions d’injection et de sortie des micro-canaux. Un dispositif micro-fluidique est composé d’un pousse-seringue, d’une micro-puce (dans laquelle sont ”gravés” les micro-canaux) et d’une sortie à l’air libre. Idéalement, on devrait être capable de prendre en compte tous ces éléments. Cependant, techniquement, on ne peut raisonnablement simuler qu’une partie du dispositif. Il est alors nécessaire de concevoir des conditions d’injection et de sortie réalistes.

Passons à présent à la description des deux problèmes abordés dans cette thèse. Tout d’abord on traite de problèmes de mélange grâce à des modèles réduits de type Reynolds, puis on s’intéresse à des problèmes d’écoulements de micelles géantes.

2) Les problèmes de mélange dans l’approximation de lubrification

Ce premier travail concerne l’inter-diffusion de deux liquides dont les viscosités sont différentes dans un micro-canal. Il est le fruit d’une collaboration commencée en 2006 avec Jean-Baptiste Salmon du L.O.F.¹. Comme précisé dans la section précédente, l’un des domaines d’applications les plus actifs en micro-fluidique reste l’ingénierie chimique. En effet, l’observation grâce à des outils optiques sophistiqués des écoulements de fluides réactifs se mélangeant dans un micro-canal permet d’analyser des réactions chimiques de façon plus précise qu’avec les instruments classiques de laboratoire. La verrerie simple (tube à essais, etc...) permet l’observation d’équilibres chimiques, mais ne permet pas de déterminer de façon très précise tout le processus de réaction, la vitesse de mélange de deux réactifs ne pouvant être contrôlée simplement avec ce type d’instruments. Dans une expérience dite de ”co-flow”, on observe les deux fluides se mélanger lentement par auto-diffusion. Une fois la vitesse d’écoulement établie et connue, des observations effectuées en divers endroits le long du canal permettent de rendre compte de la vitesse de réaction chimique et éventuellement de l’apparition d’intermédiaires réactionnels (voir Fig.0.2).

Avant d’être capable de faire cette analyse il faut disposer d’une description précise de l’hydrodynamique dans ce type d’expérience. En effet, celle-ci peut être non-triviale du fait que les deux liquides que l’on met en contact peuvent avoir des viscosités différentes. L’évolution de la largeur, ainsi que la position de la zone d’inter-diffusion peuvent donc avoir une évolution difficile à prévoir. Ce sont des simulations numériques sur des modèles de mélange comparées à des résultats expérimentaux qui vont nous permettre de caractériser l’évolution de l’inter-diffusion entre deux fluides dans une expérience de ”co-flow”.

1. Laboratory of the future, unité mixte Rhodia / C.N.R.S. / Université Bordeaux 1

Modélisation des écoulements de mélanges de fluides Newtoniens

Dans cette étude, nous nous concentrons sur le mélange de deux fluides A et B ayant des viscosités dynamiques différentes η_A et η_B . Afin de suivre l'évolution du mélange, on se donne une variable $\phi(t, X)$ qui dépend du temps et de l'espace et qui représente la fraction volumique de l'espèce A au point X et au temps t . L'évolution de l'espèce B est donnée par : $\psi(t, X) = 1 - \phi(t, X)$. Ces fractions volumiques évoluent suivant la loi de convection-diffusion :

$$\partial_t \phi + V \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (\mathcal{D}(\phi) \nabla \phi),$$

où $V(t, X)$ représente la vitesse du fluide au point X au temps t , et $\mathcal{D}(\phi)$ représente un coefficient d'inter-diffusion qui peut dépendre de la fraction volumique de chaque fluide. A présent il est nécessaire de donner une définition de la vitesse du fluide. Deux possibilités s'offrent à nous :

- On peut définir la vitesse "massique" :

$$V_m := V_A m + V_B (1 - m),$$

où $m(t, X)$ représente la fraction massique de l'espèce A en X au temps t , et V_A (r.p. V_B) représente la vitesse du fluide A (r.p. B).

- On peut aussi définir la vitesse "volumique" :

$$V_\phi := V_A \phi + V_B (1 - \phi),$$

où ϕ représente la fraction volumique du fluide A dans le mélange ($1 - \phi$ pour B).

On verra par la suite qu'il est possible de passer indifféremment d'une définition de la vitesse de mélange à l'autre grâce à la relation :

$$V_m - \mathcal{D} \xi \nabla \phi,$$

où $\xi = \frac{\rho_B - \rho_A}{\rho_B}$, ρ_A et ρ_B désignent les densités des fluides A et B et $\mathcal{D}$ le coefficient d'inter-diffusion. Remarquons que la vitesse "volumique" est toujours à divergence nulle alors que la vitesse massique ne l'est pas. L'équation sur la vitesse est donnée par la relation de conservation de la quantité de mouvement décrite précédemment :

$$\nabla \cdot \sigma = \nabla P.$$

On considère que les deux fluides A et B sont Newtoniens. Il y a donc une relation linéaire entre le contrainte σ et la partie déviatorique du tenseur des taux de déformation $D[V] = \text{dev} \left(\frac{\nabla V + \nabla V^t}{2} \right)$

(on définit la partie déviatorique d'un tenseur A par $\text{dev}(A) = A - \frac{1}{3} \text{trace}(A) I$). Dès lors il est possible de construire le tenseur des taux de déformation soit sur la vitesse "volumique", soit sur la vitesse "massique". Chacune de ces deux options mènent à des modèles différents (les deux modèles sont écrits en vitesses "volumiques" par commodité) :

- Si on considère $\sigma = D[V_\phi]$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \left[\eta(\phi) \left(\frac{\nabla V_\phi + \nabla V_\phi^t}{2} \right) \right] = \nabla P, \end{array} \right. \quad (0.4a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot V_\phi = 0, \end{array} \right. \quad (0.4b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \phi + V_\phi \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (\mathcal{D}(\phi) \nabla \phi), \end{array} \right. \quad (0.4c)$$

- Si on considère $\sigma = D[V_m]$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \left[2\eta(\phi) \left(\frac{\nabla V_\phi + \nabla V_\phi^t}{2} \right) \right] = \xi \nabla \cdot (2\eta(\phi) \tilde{\mathcal{D}} H(\phi) + \eta(\phi) \nabla \tilde{\mathcal{D}} \times \nabla \phi + \eta(\phi) \nabla \phi \times \nabla \tilde{\mathcal{D}}) \\ \quad - \frac{4}{3} \xi \nabla \left[\eta(\phi) \nabla \cdot (\tilde{\mathcal{D}} \nabla \phi) \right] + \nabla P, \\ \nabla \cdot V_\phi = 0, \\ \partial_t \phi + V_\phi \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot (\mathcal{D} \nabla \phi) = 0, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (0.5a) \\ (0.5b) \\ (0.5c) \end{array}$$

où $H(\phi)$ représente la matrice Hessienne de ϕ .

Ces deux modèles ne sont pas équivalents tels quels, car ils sont basés sur des hypothèses de construction du tenseur des contraintes différentes.

La géométrie des canaux utilisés dans des expériences de "co-flow" est généralement très fine (voir Fig. 0.2) afin de pouvoir simplifier au maximum les mesures. Il se trouve également, que dans ce type de géométrie, l'hydrodynamique est grandement simplifiée. L'approximation de "Hele-Shaw" permet de réduire les modèles (0.4a-0.5a) et (0.5c-0.6d) ci-dessus lorsque la taille du domaine sur une composante, la composante dite "fine" est arbitrairement petite. Par ailleurs, sous cette approximation, les modèles "massiques" et "volumiques" sont les mêmes. Les modèles ainsi réduits s'écrivent sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_{xy} \cdot [K^1(x, y) \nabla_{xy} P] = 0, \\ \left(\begin{array}{c} u \\ v \end{array} \right) (x, y, z) = K^2(x, y, z) \nabla_{xy} P, \\ w(x, y, z) = \nabla_{xy} \cdot \left[\nabla_{xy} P \int_0^z K_{3D}(x, y, \sigma) d\sigma \right], \\ \partial_t \phi + V \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (\mathcal{D}(\phi) \nabla \phi), \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (0.6a) \\ (0.6b) \\ (0.6c) \\ (0.6d) \end{array}$$

où les coefficients $\overline{K_{3D}}(x, y)$, $K_{3D}(x, y, z)$ dépendent de ϕ ainsi que des conditions aux limites choisies d'un bout à l'autre du domaine dans la direction "fine" (plafond et fond du canal). Notons que dans ce modèle le calcul de la pression se fait en 2D, mais on récupère des vitesses 3D, et l'équation de convection-diffusion sur ϕ est 3D. On appelle ces modèles des modèles 2.5D. Il est également possible d'écrire des modèles purement 2D en négligeant l'influence des variations de ϕ dans la direction fine sur le calcul des vitesses. Il est possible, toujours via l'approximation de Hele-Shaw de réduire l'équation (0.6d) afin d'obtenir une équation sur une valeur de ϕ ne dépendant alors plus de z . Le modèle entier s'écrit alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_{xy} \cdot [K^1(x, y) \nabla_{xy} P] = 0, \\ \left(\begin{array}{c} u \\ v \end{array} \right) (x, y) = \overline{K^2}(x, y) \nabla_{xy} P, \\ \partial_t \phi + \left(\begin{array}{c} u \\ v \end{array} \right) \cdot \nabla_{xy} \phi = \nabla_{xy} \cdot (\mathcal{D}(\phi) \nabla_{xy} \phi), \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (0.7a) \\ (0.7b) \\ (0.7c) \end{array}$$

où le coefficient $K_{2D}(x, y)$ ne dépend que de ϕ et des conditions aux limites. Ce modèle, plus simple, permet, comme on le verra au chapitre 4 de décrire les expériences de "co-flow" de façon satisfaisante, car les prédictions réalisées grâce à ce modèle sont en bon accord avec les résultats des expériences. les modèles (0.6a-0.6d) et (0.7a-0.7c) sont appelés modèles de type Reynolds.

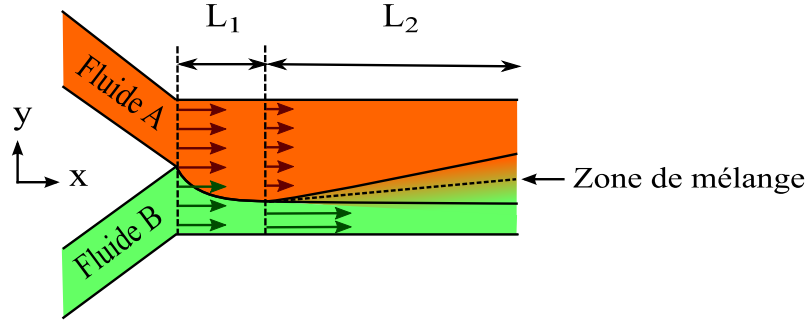


FIGURE 0.3 – Vue schématique des différentes échelles impliquées dans la simulation d'une expérience de co-flow.

Simulations Numériques

Dans ce mémoire sont présentées quelques simulations numériques effectuées sur les deux modèles réduits décrits précédemment. Les premières concernent directement les expériences de "co-flow" et font appel au modèle réduit 2D (0.6a-0.6d). Les autres simulations font plutôt appel au modèle 2.5D (0.7a-0.7c), ils permettront de percevoir les limitations de cette approche de réduction de modèle dans le cas où l'on souhaite traiter les canaux à reliefs ou bien présentant des zones de glissement.

Expériences de "co-flow"

On s'intéresse tout d'abord à l'expérience de co-flow décrite précédemment. Il s'agit d'injecter deux fluides dont les viscosités sont différentes dans un canal et de prédire d'une part la position de la zone de mélange et d'autre part la largeur de cette même zone de mélange. Cette expérience fait intervenir deux échelles dans la direction longitudinale du canal.

Tout d'abord pour de petites longueurs (Fig. 0.3, $0 < x < L_1$), pour lesquelles l'effet de la diffusion est encore négligeable, l'interface (zone de séparation entre les deux fluides) se déplace sous l'effet du gradient de viscosité, ainsi que de la différence éventuelle de vitesse d'injection. Au bout d'un certain temps, l'interface atteint une position d'équilibre qui peut être prédite par un argument simple d'équilibre des pressions et de conservation des débits. On montrera que cette position de l'interface est prédite correctement par les simulations numériques.

Pour des longueurs plus grandes (Fig. 0.3, $x > L_1$), les deux fluides se mélangent de manière significative, le profil de viscosité dans la direction transverse se trouve modifié par rapport à la position d'équilibre. Ceci engendre un nouveau déplacement transverse de l'interface (on appelle alors l'interface le milieu de la zone de diffusion, en pointillés sur la Fig. 0.3) sur de grandes longueurs (Fig. 0.3, $x \sim L_1$). Les simulations numériques effectuées sur de grandes longueurs de canal confirmeront le phénomène de déplacement de la zone de mélange par ailleurs observé expérimentalement.

Limitations du modèle de Reynolds

D'autres applications ont également été visées pour le modèle de Reynolds faisant intervenir des conditions aux limites complexes en haut et au fond du canal (reliefs, motifs de glissement). L'un des sujets les plus porteurs en micro-fluidique ces dernières années concerne l'accélération de mélanges de fluides dans des micro-canaux [40]. En effet, les écoulements micro-fluidiques étant laminaires, le mélange de fluides ne se fait que par auto-diffusion, comme on l'a vu pour les expériences de co-flow. Certaines approches d'accélération du mélange faisant intervenir des reliefs dans des micro-canaux ont

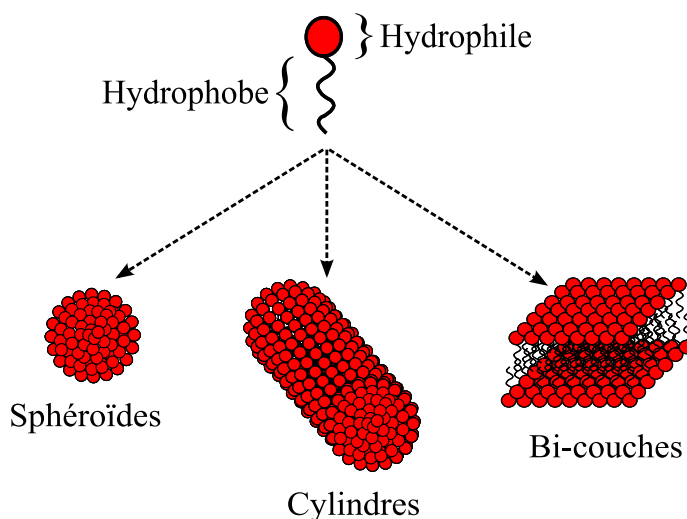


FIGURE 0.4 – Micelles géantes : en haut, molécule bipolaire servant de base aux différentes formes d'agrégats possibles : sphéroïdes, longs cylindres et phase lamellaire.

montré des résultats très intéressants [55], [56]. Plus récemment encore on a envisagé d'utiliser des surfaces traitées chimiquement afin d'induire du glissement, qui placées judicieusement pourraient en théorie modifier l'écoulement de façon suffisamment importante pour accélérer le mélange [36], [37].

On verra, par des simulations numériques que le modèle de Reynolds ne permet pas de reproduire les résultats obtenus avec ces deux approches. En faisant les approximations nécessaires à l'écriture du modèle de Reynolds on perd les effets du confinement de l'écoulement dans un canal (on ne "voit" plus les murs latéraux). C'est justement ce mécanisme de confinement qui est essentiel dans le processus d'accélération du mélange.

3) Les écoulements de solutions de micelles géantes

La deuxième partie de ce mémoire porte sur des écoulements de micelles géantes en solution dans des micro-canaux. Ce travail a été effectué en collaboration avec Annie Colin et Chloé Masselon du L.O.F. Nous nous intéressons ici à un type particulier de fluides : les micelles géantes en solution. Les micelles sont des agrégats de molécules bipolaires (un pôle hydrophile, un pôle hydrophobe) nageant dans un solvant (de l'eau par exemple). Ces agrégats peuvent prendre plusieurs formes selon les conditions de concentration et de température auxquelles elles sont exposées (voir Fig. 0.4). La plupart du temps elles prennent la forme de longs cylindres qui ont la capacité de se rompre et de se re-combiner au cours du temps. Lorsqu'elles sont au repos, c'est à dire sans sollicitation externe, ces micelles cylindriques apparaissent enchevêtrées formant ainsi un réseau visco-élastique isotrope. Par contre, lorsque l'on leur applique un cisaillement suffisamment important, cette structure de réseau se casse et les micelles se ré-arrangent en s'alignant dans une direction privilégiée donnée par le cisaillement. On considérera, qu'il s'agit là d'une phase simplement fluide.

Dans un véritable écoulement cisailé, la cassure du réseau de micelles enchevêtrées ne se fait pas partout en même temps. Certaines zones sont privilégiées suivant l'état initial du réseau de micelles. On parle alors de "localisation de l'écoulement" du fait que certaines zones se trouvant dans l'état aligné "coulent" plus vite que d'autres zones restées à l'état enchevêtré. Ce phénomène de formation de bandes de cisaillement est bien connu pour les solutions de micelles géantes. Si on considère maintenant

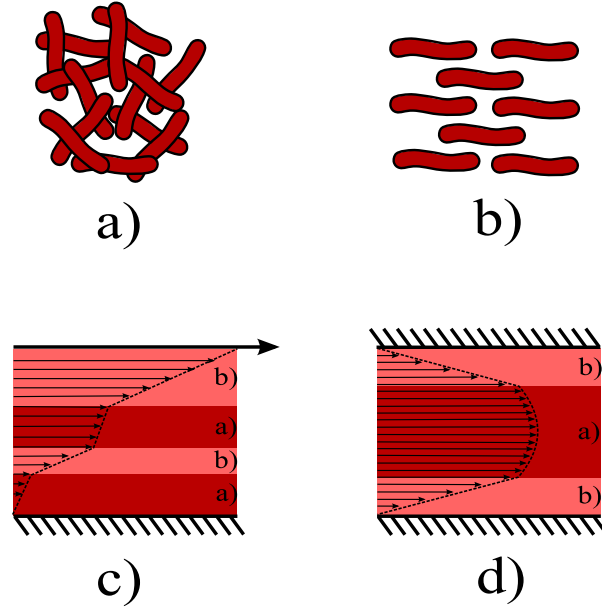


FIGURE 0.5 – Ecoulements de micelles géantes cylindriques. a) : l'état enchevêtré ; b) : l'état aligné ; c) : un écoulement cisailé de type Couette ; d) un écoulement dans un canal. Les bandes foncées dans c) et d) correspondent à un fluide dans l'état enchevêtré visco-élastique a). Les bandes claires représentent le fluide dans son état aligné plus fluide b).

un écoulement où le cisaillement n'est plus homogène, comme c'est le cas en micro-fluidique (profils de Poiseuille), les zones où le cisaillement est le plus fort se trouvent au voisinage des bords du canal. On se trouve alors généralement dans une situation où les micelles sont dans l'état aligné à proximité des murs, contrairement au centre du canal où se trouve un "bouchon" formé par la phase de micelles restées à l'état enchevêtré.

Dans cette partie de la thèse on s'intéresse plutôt aux applications à la rhéologie des écoulements micro-fluidiques. En effet, depuis quelques temps, la micro-fluidique est apparue comme un outil prometteur pour l'analyse de propriétés mécaniques sur les fluides. Cette application est née de la possibilité d'effectuer des mesures précises sur la cinématique (vitesses, taux de cisaillement, taux d'élongation, etc ...) ainsi que sur la dynamique (pressions, contraintes de cisaillement, etc ...) d'un écoulement grâce à des outils optiques. Outre la miniaturisation et l'aspect "haut débit" qu'offre la micro-fluidique, cette dernière se distingue des instruments de mesure rhéologique classique par le fait qu'elle permet d'effectuer facilement des mesures locales (en tout point du canal). Cette dernière propriété est essentielle pour l'étude des écoulements de micelles géantes, car, comme on l'a vu précédemment, l'écoulement peut être très localisé suivant les hétérogénéités initiales.

En plus de la possibilité de s'en servir comme d'un instrument de rhéologie, la micro-fluidique offre également un nouvel éclairage sur les écoulements complexes en milieux poreux. En effet, il est possible de fabriquer des réseaux de micro-canaux mimant les enfractuosités d'une roche poreuse. L'intérêt d'étudier des écoulements de micelles géantes dans des milieux poreux réside dans le fait que ce type de fluides a récemment été envisagé pour améliorer les techniques de récupération assistée du pétrole. Encore une fois, la micro-fluidique se distingue par la facilité qu'elle offre pour l'observation de tels écoulements.

Modélisation des écoulements de micelles géantes

Avant d'exposer les équations proprement dites, il est nécessaire de faire le point sur les quelques parti-pris de modélisation apparaissant dans la suite. Tout d'abord les problèmes envisagés se posent à l'échelle macroscopique. On souhaite donc écrire un modèle directement sur des grandeurs macroscopiques telles que la contrainte interne ou bien la vitesse apparaissant dans le modèle de Stokes incompressible. D'autre part on choisit de travailler sur des modèles différentiels, pour lesquels l'analyse numérique est grandement facilitée. Enfin, on souhaite pouvoir utiliser notre modèle dans n'importe quel type de géométrie, non seulement dans des canaux droits (cisaillement pur) mais aussi dans des jonctions (cisaillement et élongation). Ce sont donc les modèles dits "tensoriels" (qui décrivent l'évolution du tenseur des contraintes complet) qui se sont imposée à nous naturellement.

Le modèle de Johnson-Segalman diffusif

Le modèle que l'on choisit pour étudier les écoulements de micelles géantes est le modèle de Johnson-Segalman diffusif [31], [23], [43]. Ce modèle décrit la contrainte interne comme une somme de deux contributions, une contribution visqueuse qui représente le fluide dans sa phase "alignée" et une contribution visco-élastique σ_p qui décrit la contrainte du fluide dans sa phase "enchevêtrée" :

$$\sigma = 2\eta_s D[V] + \sigma_p.$$

L'évolution de l'extra-contrainte σ_p visco-élastique est donnée par :

$$(\partial_t + V \cdot \nabla)\sigma_p + f(V, \sigma_p) + \frac{\sigma_p}{\tau} = 2G D[V] + \mathcal{D}\Delta\sigma_p, \quad (0.8)$$

où G est un module élastique, τ un temps de relaxation local du réseau élastique et $\mathcal{D}$ un coefficient de diffusion sur la contrainte. Le terme $f(V, \sigma_p)$ est un terme linéaire en σ_p nécessaire à la description "objective" du tenseur des contraintes σ_p . Ces termes sont nécessaires car on souhaite que la loi de comportement soit indépendante du référentiel auquel est attaché le tenseur σ_p . Il existe plusieurs dérivées dites objectives différentes, chacune correspondant à une rhéologie différente. Dans cette thèse on utilise la dérivée de Gordon-Showalter :

$$f(V, \sigma_p) = \sigma_p \Omega[V] - \Omega[V] \sigma_p - a(\sigma_p D[V] + D[V] \sigma_p), \quad (0.9)$$

où $\Omega[V] = \frac{\nabla V - \nabla V^t}{2}$ représente le taux de rotation du fluide et a un paramètre à fixer entre 0 et 1. Cette dérivée est une dérivée interpolée entre la dérivée dite "sur-convectée" ($a = 1$) et la dérivée dite "sous-convectée" ($a = -1$).

La principale originalité de ce modèle réside dans le fait que lorsque l'on fixe un taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ et que l'on regarde l'état stationnaire sur la contrainte de cisaillement issue du modèle (0.8), on obtient une relation non-monotone entre la contrainte et le cisaillement (voir Fig. 0.5). Cette relation non-monotone entre contrainte et cisaillement semble au premier abord être un défaut du modèle, car elle induit d'une certaine manière une viscosité négative. Cependant lorsque l'on laisse évoluer le système, non plus en fixant le cisaillement mais en le laissant évoluer via l'équation de conservation de la quantité de mouvement, on s'aperçoit qu'à l'état stationnaire, certains points de la courbe d'écoulement sont évités dynamiquement pour former un plateau de contrainte. Ce plateau de contrainte va séparer le fluide entre les différentes phases ou "bandes de cisaillement" présentes dans l'écoulement. Cependant, si l'on choisit d'étudier le modèle sans tenir compte des effets non-locaux dans la loi de comportement (0.8) ($\mathcal{D} = 0$), on s'aperçoit que ce plateau de contrainte n'est pas unique, et sa valeur dépend grandement de la condition initiale choisie et donc de "l'histoire de l'écoulement".

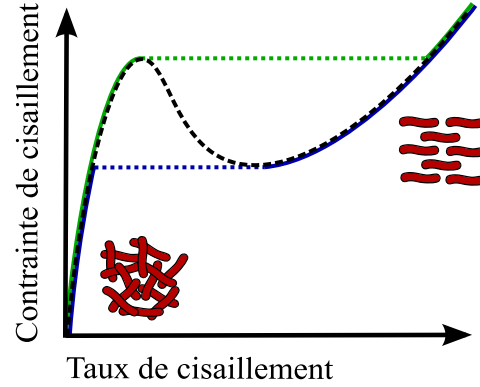


FIGURE 0.6 – Rhéogrammes pour le modèle de Johnson-Segalman sans diffusion. En pointillés : le rhéogramme caractéristique pour un cisaillement homogène. En bleu : rhéogramme issu d'un écoulement dans un canal en partant d'une condition initiale donnée dans la branche fluide (en haut à droite sur la courbe). En vert : condition initiale donnée dans la branche fluide (en bas à gauche sur la courbe).

Ce comportement d'hystérèse a été largement étudié [1], [20] dans le cas d'écoulements de Couette cylindriques. Le rôle de la diffusion dans l'équation constitutive (0.8) est donc de sélectionner un plateau de contrainte indépendant de la condition initiale.

Le gros défaut de ce modèle réside dans son comportement en élongation. Lorsque l'on fixe un taux d'élongation $\dot{\epsilon}$, les points stationnaires sur la contrainte sont stables pour $\dot{\epsilon} < \frac{1}{2\tau}$ et instables sinon. Ce modèle est donc valide uniquement pour de petits taux d'élongations. Il est donc exclu de l'utiliser en l'état pour étudier des écoulements où la géométrie impose des taux d'élongations importants en certains points (jonctions, contractions). Afin de remédier à ce problème, on rajoute dans le modèle (0.8) une non-linéarité quadratique qui va forcer la relaxation de la contrainte si l'élongation est trop importante [28], [59]. Enfin, on verra que l'ajout de cette non-linéarité ne change en rien le comportement non-monotone de la courbe cisaillement/contrainte. Le modèle complet s'écrit alors :

$$\begin{cases} \nabla \cdot (2\eta D[V] + \sigma_p) = \nabla P, & (0.10a) \\ \nabla \cdot V = 0, & (0.10b) \end{cases}$$

$$\begin{cases} (\partial_t + V \cdot \nabla) \sigma_p + f(V, \sigma_p) + \frac{\sigma_p}{\tau} + \kappa \frac{\sigma_p^2}{G\tau} = 2G D[V] + \mathcal{D} \Delta \sigma_p, & (0.10c) \end{cases}$$

où κ , sans dimensions représente l'importance de la relaxation non-linéaire devant la relaxation linéaire (on a généralement $\kappa < 1$).

Simulations numériques d'écoulements de micelles géantes

Dans ce document on propose deux applications du modèle (0.10a-0.10c) à des écoulements micro-fluidiques. Le premier cas étudié concerne des écoulements dans des canaux droits ayant une forme de "canyon". Dans ce cas on utilisera une version simplifiée du modèle complet, et on s'efforcera de comprendre l'influence du terme de diffusion sur la contrainte dans l'équation (0.10c). Le deuxième cas étudié dans cette partie du manuscrit concerne des écoulements dans des jonctions micro-fluidiques en forme de "T". Le but ici est de comprendre grâce au modèle (0.10a-0.10c) les effets de "bouchage" observés expérimentalement, et qui sont dus à la nature non-Newtonienne du fluide.

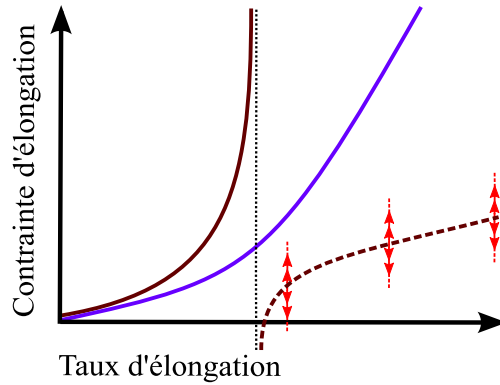


FIGURE 0.7 – Diagrammes Elongation/Contrainte (première contrainte d'élongation) pour les modèles de Johnson-Segalman (en rouge) et de Giesekus (en violet). La partie de la courbe en pointillés représente les points stationnaires instables pour le modèle de Johnson-Segalman.

Formation de bandes de cisaillement dans des canaux droits

Le premier cas d'écoulement de micelles géantes étudié dans cette thèse concerne des écoulements dans des canaux droits, la section transversale de ces canaux possédant un grand rapport d'aspect. Dans ce contexte, la description de l'écoulement est grandement simplifiée (écoulement établi, écoulement parallèle) et par conséquent, l'analyse numérique est facilitée. La simplification faite sur la partie hydrodynamique (0.10a) du modèle nous permet ici d'étudier la loi de comportement (0.10c) dans un véritable contexte d'écoulement, tout en nous affranchissant de certaines difficultés numériques apparaissant avec la discrétisation du modèle complet (0.10a-0.10c). Cette étude nous permettra en particulier d'illustrer le phénomène de séparation de phase intervenant dans le modèle comme une conséquence directe de l'évitement dynamique de certaines valeurs du taux de cisaillement au cours de l'écoulement (zone de pente négative sur la figure 0.7). D'autre part cette étude montera le véritable rôle de la diffusion dans le modèle. Cette dernière permet en fait de rendre l'état stationnaire sur le modèle (0.10a-0.10c) indépendante de la condition initiale choisie pour l'extra-contrainte σ_p . Enfin, nous constaterons la perte de la notion de courbe d'écoulement due aux effets non-locaux, par une série de tests impliquant différentes valeurs pour la diffusion dans (0.10c) ainsi que différentes conditions aux limites. Cette perte de notion de courbe d'écoulement signifie que le diagramme cisaillement/contrainte peut, dans certaines conditions, dépendre du gradient de pression imposé dans le canal. Cet effet a été observé expérimentalement par Chloé Masselon [41], durant sa thèse.

Écoulements de micelles géantes à travers des jonctions microfluidiques

Dans cette partie du mémoire on se consacrera à une application directe du modèle (0.10a-0.10c) sur des écoulements dans un domaine possédant une véritable géométrie 3D. On s'intéresse en particulier à des jonctions micro-fluidique en forme de "T". Des expériences récentes sur les écoulements de solutions de micelles géantes dans ce type de jonctions ont montré des effets de "bouchage" non triviaux. On montrera que le modèle de Johnson-Segalman permet de décrire des phénomènes de ce type à travers deux approches : une première approche où l'on simplifie le modèle (0.10a-0.10c), et une autre approche faisant intervenir des simulations 3D directes sur le même modèle. La deuxième approche nous permettra de comprendre l'influence de la géométrie sur les rapports de débits de sortie. Nous verrons en particulier l'influence de l'asymétrie de la jonction sur ces débits. Dans certains cas on observera des régimes non-permanents à la jonction. Tous les phénomènes étudiés ici sont liés à la

nature non-Newtonienne des micelles géantes, et à la tendance que possède le modèle (0.10a - 0.10c) à former des bandes de cisaillement dans l'écoulement.

Première partie

Mélanges Newtoniens dans des domaines fins, modèle de Reynolds

Cette première partie est consacrée à l'étude des écoulements de mélanges de fluides Newtoniens dans des micro-canaux fins. Dans le chapitre 1 on introduit les modèles qui permettent d'étudier des mélanges de fluides de viscosité différente. Par la suite, dans le chapitre 2, on décrit de quelle manière il est possible de réduire ces modèles grâce à l'hypothèse de micro-canaux fins. Un ensemble de méthodes numériques seront alors décrites dans le chapitre 3 afin de traiter ces modèles. Enfin, deux chapitres d'applications permettront d'une part d'exploiter le modèle de Reynolds pour réaliser des prédictions sur des expériences de "co-flow" (chapitre 4) et d'autre part de percevoir les limitations de ces modèles réduits (chapitre 5).

Chapitre 1

Hydrodynamique d'un mélange

Le but de ce chapitre est de présenter les différents modèles existants pour décrire des écoulements de mélanges de fluides Newtoniens. Avant de parler d'hydrodynamique, il convient de définir ce qu'est un mélange. Lorsque deux espèces dites miscibles sont mises en présence l'une de l'autre, intervient un phénomène appelé auto-diffusion. Cette auto-diffusion est fortement liée à l'agitation thermique dans le fluide.

À l'échelle microscopique, les molécules constituant le fluide circulent et s'entrechoquent en permanence, même si la vitesse moyenne de ces particules sur un élément de volume, c'est à dire la vitesse dont on décrit l'évolution à l'échelle macroscopique est nulle ou négligeable (voir Fig. 1.1). Cette circulation permanente des atomes est appelée mouvement Brownien, d'après le botaniste Robert Brown (1773-1858), qui fut le premier, en 1827 à le constater en observant au microscope le mouvement chaotique d'un fluide contenu à l'intérieur de grains de pollen.

Le premier à avoir donné une loi empirique permettant de décrire l'auto-diffusion fut Adolph Fick (1829-1901) en 1855 [25]. Cette loi précise que le flux de matière à travers une surface est proportionnel, via un coefficient de diffusion, au gradient de concentration normal à cette surface. Autrement dit, plus deux espèces miscibles sont "séparées" plus elles auront tendance à se mélanger. Il faudra attendre 1905 avec les travaux d'Albert Einstein (1879-1955) pour obtenir une justification théorique de la loi de Fick [22].

Dans ce chapitre on traite des mélanges de fluides Newtoniens et incompressibles. Tout d'abord on rappelle brièvement les équations pour décrire l'évolution d'un mélange idéal. On verra par la suite que, suivant la définition que l'on souhaite donner de la vitesse pour exprimer le tenseur des contraintes internes du fluide, on aboutit à deux modèles différents.

1.1 Le suivi d'un mélange

On considère un domaine Ω où sont mises en présence deux fluides incompressibles A et B (voir Fig. 1.2). Lorsque les deux fluides sont mis en présence on note $\rho_A(X)$ la densité du fluide A au point X et $\rho_B(X)$ la densité du fluide B au point X . La densité totale au point X est notée $\rho(X) = \rho_A(X) + \rho_B(X)$. La loi de conservation de la masse s'écrit :

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (V_m \rho) = 0, \quad (1.1)$$

où V_m représente la vitesse du centre de masse. Cette vitesse n'est pas à divergence nulle. Comme on l'a précisé précédemment, les espèces A et B sont miscibles. L'évolution de leurs densités respectives

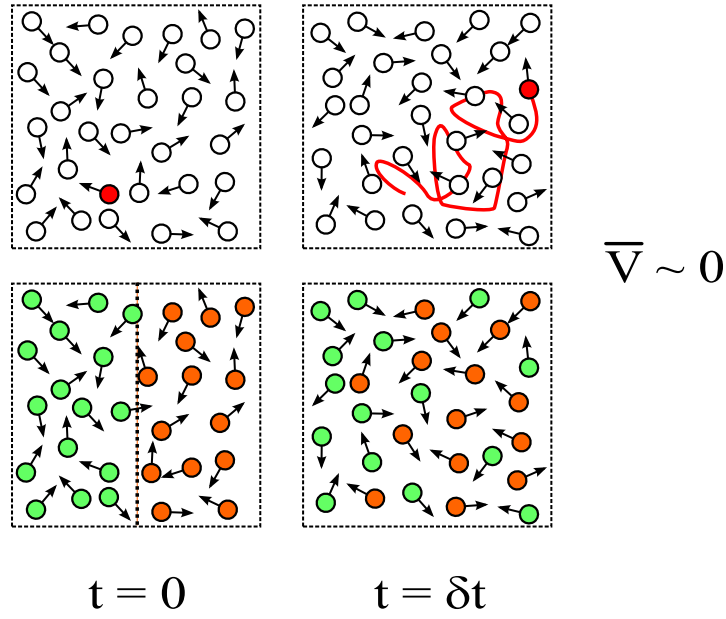


FIGURE 1.1 – Illustration du phénomène d’auto-diffusion. En haut suivi de la trajectoire erratique d’une particule, en bas mélange de deux espèces discriminées.

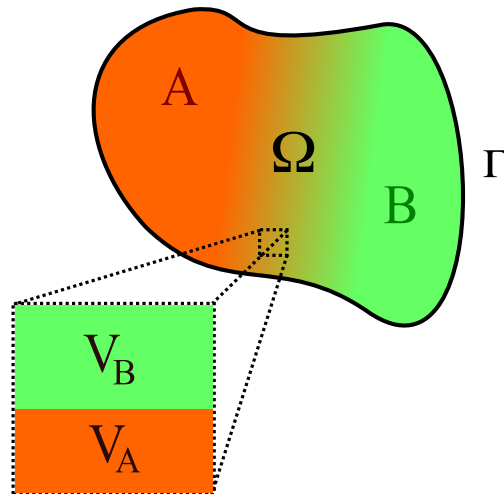


FIGURE 1.2 – Représentation schématique d’un domaine Ω où sont mises en présence deux espèces chimiques. Dans le cas du mélange parfait, chaque élément de volume est constitué du mélange d’un volume V_A de fluide A et V_B de fluide B.

est donné par la convection et par un flux diffusif proportionnel au gradient de densité (Loi de Fick) :

$$\partial_t \rho_A + \nabla \cdot (V_m \rho_A) - \nabla \cdot (\mathcal{D}_A \nabla \rho_A) = 0, \quad (1.2)$$

$$\partial_t \rho_B + \nabla \cdot (V_m \rho_B) - \nabla \cdot (\mathcal{D}_B \nabla \rho_B) = 0. \quad (1.3)$$

en sommant les deux équations (1.2-1.3) et en leur soustrayant l'équation de conservation de la masse totale (1.1) on obtient :

$$\mathcal{D}_A \nabla \rho_A + \mathcal{D}_B \nabla \rho_B = 0, \quad (1.4)$$

On définit maintenant la fraction volumique de fluide A pour un élément de volume :

$$\phi = \frac{V_A}{V_A + V_B},$$

où V_A représente le volume occupé par le fluide A dans l'élément de volume et V_B le volume occupé par le fluide B (voir Fig. 1.2). L'hypothèse de mélange parfait donne la fraction volumique de fluide B : $\psi = 1 - \phi$. Les densités ρ , ρ_A et ρ_B sont alors données par :

$$\rho_A = \rho_A^0 \phi, \quad (1.5)$$

$$\rho_B = \rho_B^0 (1 - \phi), \quad (1.6)$$

$$\rho = \rho_A^0 \phi + \rho_B^0 (1 - \phi). \quad (1.7)$$

où ρ_A^0 représente la densité du fluide A lorsqu'il est seul ($\phi = 1$) et ρ_B^0 la densité du fluide B lorsqu'il est seul ($\phi = 0$). L'équation (1.4) peut être ré-écrite en termes de ϕ :

$$\mathcal{D}_A \rho_A^0 \nabla \phi + \mathcal{D}_B \rho_B^0 \nabla (1 - \phi) = 0,$$

ce qui donne :

$$\nabla \phi (\mathcal{D}_A \rho_A^0 - \mathcal{D}_B \rho_B^0) = 0,$$

et finalement :

$$\frac{\mathcal{D}_A}{\mathcal{D}_B} = \frac{\rho_B^0}{\rho_A^0}.$$

Les coefficients de diffusion $\mathcal{D}_A$ et $\mathcal{D}_B$ étant liés on notera simplement par la suite :

$$\mathcal{D}_A =: \tilde{\mathcal{D}}, \quad (1.8)$$

$$\mathcal{D}_B = \frac{\rho_A^0}{\rho_B^0} \tilde{\mathcal{D}}. \quad (1.9)$$

Les équations de conservations (1.2-1.3) de A et B peuvent être ré-écrites grâce à (1.5-1.7) :

$$\begin{aligned} \partial_t \phi + \nabla \cdot (V_m \phi) - \nabla \cdot (\tilde{\mathcal{D}} \nabla \phi) &= 0, \\ -\partial_t \phi + \nabla \cdot (V_m (1 - \phi)) + \nabla \cdot \left(\frac{\rho_A^0}{\rho_B^0} \tilde{\mathcal{D}} \nabla \phi \right) &= 0. \end{aligned}$$

En sommant ces deux équations on obtient l'expression de la divergence de la vitesse du centre de masse V_m :

$$\nabla \cdot V_m = \nabla \cdot \left(\frac{\rho_B^0 - \rho_A^0}{\rho_B^0} \tilde{\mathcal{D}} \nabla \phi \right). \quad (1.10)$$

L'équation de conservation de la masse totale (1.1) peut être également ré-écrite :

$$\partial_t \phi + \nabla \cdot \left[V_m \left(\phi + \frac{\rho_B^0}{\rho_A^0 - \rho_B^0} \right) \right] = 0. \quad (1.11)$$

En ré-injectant l'expression de $\nabla \cdot V_m$ (1.10) dans (1.11) on obtient :

$$\partial_t \phi + \nabla \cdot (V_m \phi) - \nabla \cdot (\tilde{\mathcal{D}} \nabla \phi) = 0. \quad (1.12)$$

On a donc au final une seule équation sur la fraction volumique ϕ pour décrire l'évolution du mélange. La vitesse V_m n'étant pas à divergence nulle on lui préférera une autre définition de la vitesse :

$$V_\phi = V_m - \frac{\rho_B^0 - \rho_A^0}{\rho_B^0} \tilde{\mathcal{D}} \nabla \phi. \quad (1.13)$$

L'équation (1.12) écrite avec la vitesse V_ϕ dite "volumique" donne :

$$\partial_t \phi + V_\phi \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot \left[\left(\tilde{\mathcal{D}} + \frac{\rho_B^0 - \rho_A^0}{\rho_B^0} \phi \right) \nabla \phi \right] = 0,$$

En re-définissant le coefficient de diffusion comme :

$$\mathcal{D} = \tilde{\mathcal{D}} + \frac{\rho_B^0 - \rho_A^0}{\rho_B^0} \phi,$$

on obtient :

$$\partial_t \phi + V_\phi \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot (\mathcal{D} \nabla \phi) = 0. \quad (1.14)$$

Dans la suite on utilisera toujours l'équation (1.14) pour décrire l'évolution de la composition du mélange en chaque point du domaine.

1.2 Modèle de Stokes pour un mélange

On traite ici d'écoulements micro-fluidiques, c'est donc le modèle de Stokes incompressible qui est le plus apte à décrire l'hydrodynamique dans le contexte de notre étude :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \sigma = \nabla P, \\ \nabla \cdot V = 0. \end{cases}$$

Comme on l'a dit précédemment, on souhaite ici décrire des mélanges de fluides Newtoniens. Le tenseur des contraintes σ dépend donc linéairement de la partie déviatorique du tenseur des taux de déformations :

$$\sigma = 2\eta \operatorname{dev}(D[V]) = 2\eta(\phi) \left(\frac{\nabla V + \nabla V^t}{2} \right) - \eta(\phi) \frac{2}{3} \operatorname{trace} \left(\frac{\nabla V + \nabla V^t}{2} \right), \quad (1.15)$$

où η représente la viscosité, et, dans le cas du mélange elle peut dépendre de la concentration ϕ de fluide A. A présent il convient de définir la vitesse qui apparaît dans cette expression. D'après la section précédente il existe deux définitions de la vitesse pour un mélange : la vitesse "massique" V_m et la vitesse "volumique" V_ϕ . Suivant le choix de construction du tenseur des taux de déformation que l'on fait, on aboutit à deux modèles différents.

1.2.1 Construction sur la vitesse "volumique"

On choisit ici d'écrire le tenseur des taux de déformation comme le gradient symétrisé de la vitesse "volumique" V_ϕ :

$$\sigma = 2\eta \operatorname{dev}(D[V_\phi]) = 2\eta(\phi) \left(\frac{\nabla V_\phi + \nabla V_\phi^t}{2} \right).$$

Etant donné que $\nabla \cdot V_\phi = 0$ le terme $\text{trace}(D[V])$ dans (1.15) s'annule. Le modèle complet s'écrit alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \left[2\eta(\phi) \left(\frac{\nabla V_\phi + \nabla V_\phi^t}{2} \right) \right] = \nabla P, \end{array} \right. \quad (1.16a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot V_\phi = 0, \end{array} \right. \quad (1.16b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \phi + V_\phi \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot (D \nabla \phi) = 0. \end{array} \right. \quad (1.16c)$$

1.2.2 Construction sur la vitesse "massique"

Si on construit le tenseur des contraintes sur la vitesse "massique", on a :

$$\sigma = 2\eta(\phi) \left(\frac{\nabla V_m + \nabla V_m^t}{2} \right) - \eta(\phi) \frac{1}{3} \text{trace} \left(\frac{\nabla V_m + \nabla V_m^t}{2} \right) Id.$$

Ce second terme de cette équation ne peut être éliminé du fait que la vitesse "massique" n'est pas à divergence nulle. L'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit alors :

$$\nabla \cdot \left[2\eta(\phi) \left(\frac{\nabla V_m + \nabla V_m^t}{2} \right) \right] = \nabla \left[2\eta(\phi) \frac{2}{3} \text{trace} \left(\frac{\nabla V_m + \nabla V_m^t}{2} \right) \right] + \nabla P. \quad (1.17)$$

D'après (1.10), on a (on note $\xi = \frac{\rho_B^0 - \rho_A^0}{\rho_B^0}$) :

$$\frac{2}{3} \text{tr} \left(\frac{\nabla V_m + \nabla V_m^t}{2} \right) = -\frac{4}{3} \xi \nabla \cdot (\tilde{D} \nabla \phi).$$

L'équation (1.17) devient :

$$\nabla \cdot \left[2\eta(\phi) \left(\frac{\nabla V_m + \nabla V_m^t}{2} \right) \right] = -\frac{4}{3} \xi \nabla \cdot [\eta(\phi) \nabla \cdot (\tilde{D} \nabla \phi)] + \nabla P. \quad (1.18)$$

Par comodité on préférera ré-écrire ce modèle en vitesse "volumique" via la relation (1.13), car cette dernière est incompressible. L'équation (1.18) devient alors :

$$\nabla \cdot \left[2\eta(\phi) \left(\frac{\nabla V_\phi + \nabla V_\phi^t}{2} - \xi \frac{\nabla(\tilde{D} \nabla \phi) + \nabla(\tilde{D} \nabla \phi)^t}{2} \right) \right] = -\frac{4}{3} \xi \nabla \cdot [\eta(\phi) \nabla \cdot (\tilde{D} \nabla \phi)] + \nabla P,$$

ce qui donne au final le modèle suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \left[2\eta(\phi) \left(\frac{\nabla V_\phi + \nabla V_\phi^t}{2} \right) \right] = \xi \nabla \cdot (2\eta(\phi) \tilde{D} H(\phi) + \eta(\phi) \nabla \tilde{D} \times \nabla \phi + \eta(\phi) \nabla \phi \times \nabla \tilde{D}) \\ \quad - \frac{4}{3} \xi \nabla \cdot [\eta(\phi) \nabla \cdot (\tilde{D} \nabla \phi)] + \nabla P, \end{array} \right. \quad (1.19a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot V_\phi = 0, \end{array} \right. \quad (1.19b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \phi + V_\phi \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot (D \nabla \phi) = 0, \end{array} \right. \quad (1.19c)$$

où $H(\phi)$ est la matrice hessienne de ϕ .

1.2.3 Discussion

La question du modèle le plus pertinent entre celui qui construit le tenseur des contraintes sur la vitesse "massique" ou bien "volumique" semble faire débat entre les auteurs qui traitent de l'hydrodynamique des mélanges de fluides. Certains auteurs [10] semblent défendre l'approche "volumique" pour la construction des équations de Navier-Stokes, les arguments donnés faisant appel à la théorie cinétique. D'autres auteurs voient toutefois, dans les termes supplémentaires en ϕ dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement (1.19a), l'expression d'une contrainte mesurable [33] appelée contrainte de Korteweg, semblable à une tension de surface. Dans les chapitres qui vont suivre nous utiliserons une approximation de type "lubrification", qui va nous permettre de ne pas nous soucier de la question du choix du modèle, les termes additionnels dans (1.19a) étant alors négligeables.

Chapitre 2

Approximation de Hele-Shaw

Dans ce chapitre nous traiterons de la construction du modèle de Reynolds pour un mélange dont la viscosité varie d'une espèce à l'autre. La construction de ce modèle se fait formellement à partir d'hypothèses sur la géométrie de l'écoulement considéré (milieu mince) ainsi que sur la nature de cet écoulement (incompressible et conduit par la pression). Les milieux minces sont couramment utilisés en microfluidique lorsqu'il s'agit d'analyser des propriétés sur des fluides en raison des nombreuses simplifications qu'ils entraînent sur les modèles hydrodynamique et donc sur leur analyse. Hormis la simplicité des équations qu'elle met en jeu, l'un des principaux avantages d'une telle approximation est qu'elle permet de rendre compte de conditions aux limites complexes, par exemple glissement ou hauteur variable dans la direction que l'on a choisi fine. Ces conditions aux limites, après réduction du modèle, sont prises en compte directement dans les équations, comme des coefficients du nouveau modèle.

La plupart des résultats mathématiques sur ce modèle sont donnés dans [5] dans le cas mono-fluide, on peut également citer [6] pour le cas diphasique. Dans le cas où l'on met en présence deux fluides de viscosité différente, il est possible d'écrire deux modèles, l'un tenant compte du gradient de viscosité dans la direction fine (modèles 2.5D), l'autre ne prenant en compte qu'une moyenne de la viscosité dans cette même direction (modèles 2D).

2.1 Modèle initial et conditions aux limites

Considérons un domaine Ω représentant un canal dont la hauteur h serait petite devant sa largeur l et sa longueur L (Fig. 2.1). Rappelons les équations de l'hydrodynamique d'un mélange énoncées

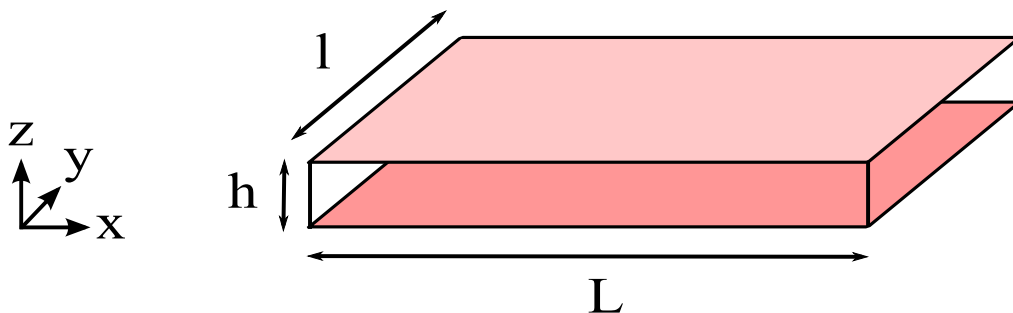


FIGURE 2.1 – Vue schématique d'un domaine fin

dans le chapitre 1.2 :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \left[2\eta(\phi) \left(\frac{\nabla V + \nabla V^t}{2} \right) \right] = \nabla P, & (2.1a) \\ \nabla \cdot V = 0, & (2.1b) \\ \partial_t \phi + V \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (D(\phi) \nabla \phi), & (2.1c) \end{cases}$$

où $V = (u, v, w)$ représente la vitesse du fluide. Nous traitons ici uniquement du modèle d'hydrodynamique construit sur des vitesses dites "volumiques". On pourra remarquer que les deux modèles "massique" et "volumiques" sont équivalents via l'approximation de Hele-Shaw (Annexe A.). Décrivons à présent les conditions aux limites à adjoindre à l'équation (2.1a). A l'entrée et à la sortie on prescrit un profil de vitesse unidirectionnelle :

$$u(x=0, y, z) = u_e(y, z), \quad (2.2)$$

$$u(x=L, y, z) = u_s(y, z), \quad (2.3)$$

où u_e et u_s sont deux profils de vitesse donnés. Sur les bords latéraux on impose une condition d'imperméabilité :

$$v(x, y=0, z) = v(x, y=h, z) = 0, \quad (2.4)$$

Pour le haut et le fond du canal on envisagera deux types de conditions :

- Une condition d'adhérence sur un canal à reliefs :

$$V(x, y, z=0) = V(x, y, z=h(x, y)) = 0, \quad (2.5)$$

où $h(x, y)$ représente la hauteur variable du canal.

- Une condition de glissement sur un canal plat :

$$\partial_z \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} (x, y, z=h) = \frac{1}{L_h(x, y)} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} (x, y, z=h), \quad (2.6)$$

$$\partial_z \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} (x, y, z=0) = -\frac{1}{L_b(x, y)} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} (x, y, z=0), \quad (2.7)$$

où L_h et L_b représentent des longueurs de glissement.

2.2 Adimensionnements

Dans cette section nous introduisons les adimensionnements nécessaires afin de faire apparaître le paramètre grâce auquel le modèle réduit pourra être écrit. Afin de rendre compte de la fine géométrie du domaine, il faut adimensionner les équations (2.1a- 2.1b) de manière à laisser apparaître les rapports d'aspect entre les différentes longueurs. Considérons les changements de variable suivants :

$$(\tilde{x}, \tilde{y}) = \frac{(x, y)}{l}, \quad (2.8)$$

$$\tilde{z} = \frac{z}{h}. \quad (2.9)$$

La condition d'incompressibilité (2.1b) s'écrit alors :

$$\partial_{\tilde{x}} u + \partial_{\tilde{y}} v + \frac{l}{h} \partial_{\tilde{z}} w = 0. \quad (2.10)$$

On voit sur cette équation que si on fait grandir le rapport d'aspect $\frac{l}{h}$, l'incompressibilité 3D n'est plus garantie, or, dans le modèle que l'on construit, on souhaite garder une incompressibilité complète. Il faut donc que l'ordre de grandeur w_0 de la vitesse w vienne contrebalancer ce fait. L'adimensionnement des vitesses doit alors prendre en compte ce problème :

$$(\tilde{u}, \tilde{v}) = \frac{(u, v)}{u_0}, \quad (2.11)$$

$$\tilde{w} = \frac{w}{w_0}. \quad (2.12)$$

où u_0 est une échelle représentative des vitesses dans les directions (x, y) . On peut par exemple choisir le maximum des vitesses d'entrée : $u_0 = \|u_e\|_\infty$. L'équation (2.10) devient alors :

$$\partial_{\tilde{x}} \tilde{u} + \partial_{\tilde{y}} \tilde{v} + \frac{l w_0}{h u_0} \partial_{\tilde{z}} \tilde{w} = 0, \quad (2.13)$$

Traisons à présent l'équation de Stokes. Une fois développée sur les trois composantes spatiales, l'équation (2.1a) donne :

$$\begin{cases} \partial_x(\eta(\phi)2\partial_x u) + \partial_y(\eta(\phi)(\partial_y u + \partial_x v)) + \partial_z(\eta(\phi)(\partial_z u + \partial_x w)) = \partial_x P, & (2.14a) \\ \partial_x(\eta(\phi)(\partial_y u + \partial_x v)) + \partial_y(\eta(\phi)2\partial_y v) + \partial_z(\eta(\phi)(\partial_z v + \partial_y w)) = \partial_y P, & (2.14b) \\ \partial_x(\eta(\phi)(\partial_z u + \partial_x w)) + \partial_y(\eta(\phi)(\partial_z v + \partial_y w)) + \partial_z(\eta(\phi)2\partial_z w) = \partial_z P. & (2.14c) \end{cases}$$

Considérons les adimensionnements suivants pour la pression et la viscosité :

$$\tilde{P} = \frac{P}{P_0}, \quad (2.15)$$

$$\tilde{\eta} = \frac{\eta}{\eta_0}. \quad (2.16)$$

En appliquant les changements de variables (2.8-2.9), (2.11-2.12) ainsi que (2.15-2.16), les équations (2.14a-2.14c) deviennent :

$$\left\{ \begin{array}{l} 2 \partial_{\tilde{x}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{x}} \tilde{u}) + \partial_{\tilde{y}}(\tilde{\eta}(\phi) (\partial_{\tilde{y}} \tilde{u} + \partial_{\tilde{x}} \tilde{v})) + \frac{l^2}{h^2} \partial_{\tilde{z}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{z}} \tilde{u}) \\ \quad + \frac{w_0 l}{u_0 h} \partial_{\tilde{z}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{x}} \tilde{w}) = \frac{P_0 l}{\eta_0 u_0} \partial_{\tilde{x}} \tilde{P}, \quad (2.17a) \\ 2 \partial_{\tilde{y}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{y}} \tilde{v}) + \partial_{\tilde{x}}(\tilde{\eta}(\phi) (\partial_{\tilde{y}} \tilde{u} + \partial_{\tilde{x}} \tilde{v})) + \frac{l^2}{h^2} \partial_{\tilde{z}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{z}} \tilde{v}) \\ \quad + \frac{w_0 l}{u_0 h} \partial_{\tilde{z}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{y}} \tilde{w}) = \frac{P_0 l}{\eta_0 u_0} \partial_{\tilde{y}} \tilde{P}, \quad (2.17b) \\ \partial_{\tilde{x}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{z}} \tilde{u}) + \frac{w_0 l}{u_0 h} \partial_{\tilde{x}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{x}} \tilde{w}) + \partial_{\tilde{y}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{z}} \tilde{v}) + \frac{w_0 l}{u_0 h} \partial_{\tilde{y}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{y}} \tilde{w}) \\ \quad + 2 \frac{w_0 l}{u_0 h} \partial_{\tilde{z}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{z}} \tilde{w}) = \frac{P_0 l}{\eta_0 u_0} \frac{l}{h} \partial_{\tilde{z}} \tilde{P}. \quad (2.17c) \end{array} \right.$$

On considère maintenant l'équation sur le mélange (2.1c). On applique les adimensionnements (2.8-2.9), (2.11-2.12), ainsi que :

$$\begin{aligned} \tilde{D} &= \frac{D}{D_0}, \\ \tilde{t} &= \frac{t}{t_0}, \end{aligned}$$

où le temps caractéristique t_0 est donné par :

$$t_0 = \frac{l}{V_0}.$$

L'équation (2.1c) adimensionnée peut être ré-écrite :

$$\partial_{\tilde{t}}\phi + \left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{v}}\right) \cdot \tilde{\nabla}_{xy}\phi + \frac{w_0 l}{u_0 h} \tilde{w} \partial_{\tilde{z}}\phi = \frac{\mathcal{D}_0}{u_0 l} \tilde{\nabla}_{xy} \cdot (\tilde{\mathcal{D}}(\phi) \tilde{\nabla}_{xy}\phi) + \frac{l^2}{h^2} \frac{\mathcal{D}_0}{u_0 l} \partial_{\tilde{z}}(\tilde{\mathcal{D}}(\phi) \partial_{\tilde{z}}\phi). \quad (2.18)$$

où :

$$\tilde{\nabla}_{xy} = \begin{pmatrix} \partial_{\tilde{x}} \\ \partial_{\tilde{y}} \end{pmatrix}.$$

A partir de ces adimensionnements, nous allons effectuer quelques approximations dans le but de réduire les équations (2.17a-2.17c) et (2.18).

2.3 Réduction du modèle

Le but ici est d'identifier un paramètre ε dépendant des dimensions caractéristiques du problème ($l, h, u_0, w_0, P_0, \eta_0$ et $\mathcal{D}_0$) permettant à la fois de rendre compte du rapport d'aspect du domaine, de l'incompressibilité et du fait que l'écoulement soit conduit par la pression. On introduira par la suite des constantes c_1, c_2 et c_3 indépendantes de ε , mais qui dépendent des grandeurs caractéristiques du modèle. Ces constantes nous permettront d'écrire les différents éléments que l'on souhaite faire tendre vers 0 (rapport d'aspect, etc ...) directement en fonction de ε .

Le grand rapport d'aspect du canal, c'est à dire le fait que $h \ll l$, s'écrit donc :

$$\frac{h}{l} = c_1 \varepsilon. \quad (2.19)$$

Afin de garder la contrainte de divergence nulle (2.10) complète, il est nécessaire d'avoir :

$$\frac{w_0}{u_0} = c_2 \varepsilon, \quad (2.20)$$

ce qui implique

$$\frac{w_0 l}{u_0 h} = \frac{c_2}{c_1}. \quad (2.21)$$

On souhaite également qu'au premier ordre, la pression apparaisse dans les équations (2.17a-2.17c). Il est alors nécessaire d'avoir :

$$\frac{P_0 l}{\eta_0 u_0} = c_3 \frac{1}{\varepsilon^2}. \quad (2.22)$$

2.3.1 Approximation de Hele-Shaw

Le système adimensionné (2.17a-2.17c) se réécrit grâce aux hypothèses (2.19), (2.21) et (2.22) :

$$\left\{ \begin{array}{l} 2 \partial_{\tilde{x}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{x}} \tilde{u}) + \partial_{\tilde{y}}(\tilde{\eta}(\phi) (\partial_{\tilde{y}} \tilde{u} + \partial_{\tilde{x}} \tilde{v})) + \frac{c_1^2}{\varepsilon^2} \partial_{\tilde{z}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{z}} \tilde{u}) \\ \quad + \frac{c_2}{c_1} \partial_{\tilde{z}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{x}} \tilde{w}) = \frac{c_3}{\varepsilon^2} \partial_{\tilde{x}} \tilde{P}, \quad (2.23a) \\ 2 \partial_{\tilde{y}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{y}} \tilde{v}) + \partial_{\tilde{x}}(\tilde{\eta}(\phi) (\partial_{\tilde{y}} \tilde{u} + \partial_{\tilde{x}} \tilde{v})) + \frac{c_1^2}{\varepsilon^2} \partial_{\tilde{z}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{z}} \tilde{v}) \\ \quad + \frac{c_2}{c_1} \partial_{\tilde{z}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{y}} \tilde{w}) = \frac{c_3^2}{\varepsilon^2} \partial_{\tilde{y}} \tilde{P}, \quad (2.23b) \\ \partial_{\tilde{x}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{z}} \tilde{u}) + \frac{c_2}{c_1} \partial_{\tilde{x}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{x}} \tilde{w}) + \partial_{\tilde{y}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{z}} \tilde{v}) + \frac{c_2}{c_1} \partial_{\tilde{y}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{y}} \tilde{w}) \\ \quad + 2 \frac{c_2}{c_1} \partial_{\tilde{z}}(\tilde{\eta}(\phi) \partial_{\tilde{z}} \tilde{w}) = \frac{c_3^2}{c_1 \varepsilon^3} \partial_{\tilde{z}} \tilde{P}. \quad (2.23c) \end{array} \right.$$

Au premier ordre, dans les équations (2.23a-2.23b) ne restent que les termes en $o\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_{\tilde{z}}(\eta(\phi) \partial_{\tilde{x}} \tilde{u}) = \mathcal{K} \partial_{\tilde{x}} \tilde{P}, \quad (2.24a) \\ \partial_{\tilde{z}}(\eta(\phi) \partial_{\tilde{y}} \tilde{v}) = \mathcal{K} \partial_{\tilde{y}} \tilde{P}, \quad (2.24b) \end{array} \right.$$

où le nombre $\mathcal{K}$ est défini par

$$\mathcal{K} = \frac{c_3^2}{c_1^2}. \quad (2.25)$$

L'équation (2.23c), quand à elle, donne au premier ordre $o\left(\frac{1}{\varepsilon^3}\right)$:

$$\partial_{\tilde{z}} \tilde{P} = 0.$$

La pression peut donc être considérée comme indépendante de $\tilde{z}$ au premier ordre. Sachant cela, on peut intégrer les équations (2.24a-2.24b) suivant $\tilde{z}$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_{\tilde{z}} \tilde{u} = \frac{\mathcal{K} \partial_{\tilde{x}} \tilde{P}}{\tilde{\eta}(\phi)} \tilde{z} + \frac{F_1(\tilde{x}, \tilde{y})}{\tilde{\eta}(\phi)}, \quad (2.26a) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_{\tilde{z}} \tilde{v} = \frac{\mathcal{K} \partial_{\tilde{y}} \tilde{P}}{\tilde{\eta}(\phi)} \tilde{z} + \frac{F_2(\tilde{x}, \tilde{y})}{\tilde{\eta}(\phi)}, \quad (2.26b) \end{array} \right.$$

où F_1 et F_2 représentent des "constantes" d'intégration suivant z . En intégrant une nouvelle fois les équations (2.26a-2.26b) suivant $\tilde{z}$ on obtient (notons que à ce stade, la concentration ϕ peut dépendre de $\tilde{z}$) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{u}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) = \partial_{\tilde{x}} \tilde{P} \int_0^{\tilde{z}} \mathcal{K} \frac{\sigma}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma + F_1(\tilde{x}, \tilde{y}) \int_0^{\tilde{z}} \frac{1}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma + G_1(\tilde{x}, \tilde{y}), \quad (2.27a) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{v}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) = \partial_{\tilde{y}} \tilde{P} \int_0^{\tilde{z}} \mathcal{K} \frac{\sigma}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma + F_2(\tilde{x}, \tilde{y}) \int_0^{\tilde{z}} \frac{1}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma + G_2(\tilde{x}, \tilde{y}), \quad (2.27b) \end{array} \right.$$

où G_1 et G_2 représentent les constantes d'intégration suivant z . Pour la suite on utilise les notations suivantes :

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{F_1}{\partial_{\tilde{x}} \tilde{P}} \frac{1}{\mathcal{K}}, \\ A_2 &= \frac{F_2}{\partial_{\tilde{y}} \tilde{P}} \frac{1}{\mathcal{K}}, \\ B_1 &= \frac{G_1}{\partial_{\tilde{x}} \tilde{P}} \frac{1}{\mathcal{K}}, \\ B_2 &= \frac{G_2}{\partial_{\tilde{y}} \tilde{P}} \frac{1}{\mathcal{K}}, \end{aligned}$$

Les équations (2.27a - 2.27b) peuvent alors être réécrites :

$$\begin{cases} \tilde{u}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) = \partial_{\tilde{x}} \tilde{P} \left(\int_0^{\tilde{z}} \frac{\sigma}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma + A_1(\tilde{x}, \tilde{y}) \int_0^{\tilde{z}} \frac{1}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma + B_1(\tilde{x}, \tilde{y}) \right) \mathcal{K}, \\ \tilde{v}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) = \partial_{\tilde{y}} \tilde{P} \left(\int_0^{\tilde{z}} \frac{\sigma}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma + A_2(\tilde{x}, \tilde{y}) \int_0^{\tilde{z}} \frac{1}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma + B_2(\tilde{x}, \tilde{y}) \right) \mathcal{K}, \end{cases} \quad (2.28a)$$

Afin d'expliciter les termes A_1 , B_1 , A_2 et B_2 , il est nécessaire de prendre en compte les conditions aux limites sur (u, v) (2.5) ou (2.5 - 2.7) en haut et au fond du canal avec (2.28a - 2.28b).

2.3.1.1 Conditions d'adhérence sur un canal à reliefs

Si on considère des conditions d'adhérence sur un canal à hauteur variable, on réécrit (2.28a - 2.28b) en $\tilde{z} = 0$:

$$\tilde{u}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z} = 0) = \partial_{\tilde{x}} \tilde{P} B_1(\tilde{x}, \tilde{y}) \mathcal{K} = 0, \quad (2.29)$$

$$\tilde{v}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z} = 0) = \partial_{\tilde{y}} \tilde{P} B_2(\tilde{x}, \tilde{y}) \mathcal{K} = 0, \quad (2.30)$$

ce qui donne :

$$B_1 = B_2 = 0. \quad (2.31)$$

Si on réécrit (2.28a - 2.28b) en $\tilde{z} = \tilde{h}(\tilde{x}, \tilde{y})$:

$$\tilde{u}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z} = \tilde{h}) = \partial_{\tilde{x}} \tilde{P} \left(\int_0^{\tilde{h}(\tilde{x}, \tilde{y})} \frac{\sigma}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma + A_1(\tilde{x}, \tilde{y}) \int_0^{\tilde{h}(\tilde{x}, \tilde{y})} \frac{1}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma \right) \mathcal{K} = 0, \quad (2.32)$$

$$\tilde{v}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z} = \tilde{h}) = \partial_{\tilde{y}} \tilde{P} \left(\int_0^{\tilde{h}(\tilde{x}, \tilde{y})} \frac{\sigma}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma + A_2(\tilde{x}, \tilde{y}) \int_0^{\tilde{h}(\tilde{x}, \tilde{y})} \frac{1}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma \right) \mathcal{K} = 0, \quad (2.33)$$

ce qui permet de calculer les coefficient A_1 et A_2 :

$$A_1(\tilde{x}, \tilde{y}) = A_2(\tilde{x}, \tilde{y}) = - \frac{\int_0^{\tilde{h}(\tilde{x}, \tilde{y})} \frac{\sigma}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma}{\int_0^{\tilde{h}(\tilde{x}, \tilde{y})} \frac{1}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma}. \quad (2.34)$$

2.3.1.2 Conditions de glissement sur un canal plat

Ici on considère la cas d'un canal qui aurait subi un traitement chimique suivant un motif donné, visant à modifier l'adhérence du fluide en haut et au fond du canal. Les conditions de glissement s'écrivent :

$$\frac{\partial \tilde{V}_\tau}{\partial \tilde{n}} = -\frac{1}{\tilde{L}} \tilde{V}_\tau, \quad (2.35)$$

où $\tilde{V}_\tau$ représente la vitesse tangentielle, et $\tilde{L}$ une longueur de glissement donnée re-normalisée sur la hauteur. On peut définir des motifs de glissement dans le canal si on fait varier L suivant $(\tilde{x}, \tilde{y})$. On définit les longueurs de glissement en haut et en bas dans le canal par $\tilde{L}_h(x, y)$ and $\tilde{L}_b(x, y)$. Les canaux considérés ici sont plats, donc la vitesse tangentielle est donnée par $(\tilde{u}, \tilde{v})$. La condition de glissement (2.35) s'écrit alors ici :

$$\partial_{\tilde{z}} \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} (\tilde{x}, \tilde{y}, 0) = -\frac{1}{\tilde{L}_b(\tilde{x}, \tilde{y}, \varphi(0))} \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} (\tilde{x}, \tilde{y}, 0), \quad (2.36)$$

$$\partial_{\tilde{z}} \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} (\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{h}) = \frac{1}{\tilde{L}_h(\tilde{x}, \tilde{y}, \varphi(h))} \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} (\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{h}). \quad (2.37)$$

Tout d'abord, dérivons en $\tilde{z}$ les vitesses $(\tilde{u}, \tilde{v})$ obtenues dans (2.28a-2.28b) :

$$\partial_{\tilde{z}} \tilde{u}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) = \partial_{\tilde{x}} \tilde{P} \left(\partial_{\tilde{z}} \int_0^{\tilde{z}} \frac{\sigma}{\tilde{\eta}(\varphi)} d\sigma + A_1(\tilde{x}, \tilde{y}) \partial_{\tilde{z}} \int_0^{\tilde{z}} \frac{1}{\tilde{\eta}(\varphi)} d\sigma \right) \mathcal{K} = \partial_{\tilde{x}} \tilde{P} \left(\frac{\tilde{z} + A_1(\tilde{x}, \tilde{y})}{\eta(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}))} \right) \mathcal{K}, \quad (2.38)$$

$$\partial_{\tilde{z}} \tilde{v}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) = \partial_{\tilde{y}} \tilde{P} \left(\partial_{\tilde{z}} \int_0^{\tilde{z}} \frac{\sigma}{\tilde{\eta}(\varphi)} d\sigma + A_2(\tilde{x}, \tilde{y}) \partial_{\tilde{z}} \int_0^{\tilde{z}} \frac{1}{\tilde{\eta}(\varphi)} d\sigma \right) \mathcal{K} = \partial_{\tilde{y}} \tilde{P} \left(\frac{\tilde{z} + A_2(\tilde{x}, \tilde{y})}{\eta(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}))} \right) \mathcal{K}. \quad (2.39)$$

On réécrit alors la condition (2.36) grâce à l'expression des vitesses (2.28a-2.28b), et de leurs dérivées en z (2.38-2.39). La première condition en $\tilde{z} = 0$ donne :

$$\partial_{\tilde{x}} \tilde{P} \left(\frac{A_1(\tilde{x}, \tilde{y})}{\eta(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, 0))} \right) \mathcal{K} = -\frac{1}{\tilde{L}_b(\tilde{x}, \tilde{y}, \phi)} \partial_{\tilde{x}} \tilde{P} B_1(\tilde{x}, \tilde{y}) \mathcal{K}, \quad (2.40)$$

$$\partial_{\tilde{y}} \tilde{P} \left(\frac{A_2(\tilde{x}, \tilde{y})}{\eta(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, 0))} \right) \mathcal{K} = \frac{1}{\tilde{L}_b(\tilde{x}, \tilde{y}, \phi)} \partial_{\tilde{x}} \tilde{P} B_2(\tilde{x}, \tilde{y}) \mathcal{K}. \quad (2.41)$$

On a alors :

$$\frac{A_1(\tilde{x}, \tilde{y})}{\eta(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, 0))} = -\frac{B_1(\tilde{x}, \tilde{y})}{\tilde{L}_b(\tilde{x}, \tilde{y}, \phi)}, \quad (2.42)$$

$$\frac{A_2(\tilde{x}, \tilde{y})}{\eta(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, 0))} = -\frac{B_2(\tilde{x}, \tilde{y})}{\tilde{L}_b(\tilde{x}, \tilde{y}, \phi)}. \quad (2.43)$$

En $z = h$ on peut également réécrire la condition de glissement (2.37) grâce à 2.28a-2.28b) et (2.38-2.39). On obtient alors :

$$A_1(\tilde{x}, \tilde{y}) \left(\frac{1}{\tilde{\eta}(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{h}))} - \frac{1}{L_h(\tilde{x}, \tilde{y}, \phi)} \int_0^{\tilde{h}} \frac{1}{\tilde{\eta}(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, \sigma))} d\sigma \right) - \frac{B_1(\tilde{x}, \tilde{y})}{L_h(x, y, \phi)} = \frac{1}{L_h(\tilde{x}, \tilde{y}, \phi)} \int_0^{\tilde{h}} \frac{\sigma}{\tilde{\eta}(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, \sigma))} d\sigma - \frac{\tilde{h}}{\tilde{\eta}(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{h}))}. \quad (2.44)$$

$$A_2(\tilde{x}, \tilde{y}) \left(\frac{1}{\tilde{\eta}(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{h}))} - \frac{1}{L_h(\tilde{x}, \tilde{y}, \phi)} \int_0^{\tilde{h}} \frac{1}{\tilde{\eta}(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, \sigma))} d\sigma \right) - \frac{B_2(\tilde{x}, \tilde{y})}{L_h(\tilde{x}, \tilde{y}, \phi)} = \frac{1}{L_h(\tilde{x}, \tilde{y}, \phi)} \int_0^{\tilde{h}} \frac{\sigma}{\tilde{\eta}(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, \sigma))} d\sigma - \frac{\tilde{h}}{\tilde{\eta}(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{h}))}. \quad (2.45)$$

Grâce à (2.42-2.43) on obtient au final :

$$A_1(\tilde{x}, \tilde{y}) = A_2(\tilde{x}, \tilde{y}) = \frac{\int_0^{\tilde{h}} \frac{\sigma}{\tilde{\eta}(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, \sigma))} d\sigma - \frac{\tilde{h} \tilde{L}_h(\tilde{x}, \tilde{y}, \phi)}{\tilde{\eta}(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{h}))}}{\left(\frac{\tilde{L}_h(\tilde{x}, \tilde{y}, \phi)}{\tilde{\eta}(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{h}))} + \frac{\tilde{L}_b(\tilde{x}, \tilde{y}, \phi)}{\eta(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, 0))} \right) - \int_0^{\tilde{h}} \frac{1}{\tilde{\eta}(\varphi(\tilde{x}, \tilde{y}, \sigma))} d\sigma},$$

$$B_1(\tilde{x}, \tilde{y}) = B_2(\tilde{x}, \tilde{y}) = -\tilde{L}_b(\tilde{x}, \tilde{y}, \phi) \frac{A_1(\tilde{x}, \tilde{y})}{\tilde{\eta}(\varphi(0))}.$$

2.3.2 Mise en forme des équations sur V et P

On a vu dans les sections 2.3.1.1 et 2.3.1.2 que, pour les conditions aux limites au fond et en haut du canal qui nous intéressent ici on avait toujours $A_1 = A_2$ et $B_1 = B_2$ dans les équations (2.28a-2.28b). Pour la suite on notera : $A_1 = A_2 = A$, $B_1 = B_2 = B$. En utilisant ces notations, les équations (2.28a-2.28b) deviennent :

$$\begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix}(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) = \tilde{\nabla}_{xy} \tilde{P} \left(\int_0^{\tilde{z}} \frac{\sigma}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma + A(\tilde{x}, \tilde{y}) \int_0^{\tilde{z}} \frac{1}{\eta(\phi)} d\sigma + B(\tilde{x}, \tilde{y}) \right) \mathcal{K}. \quad (2.46)$$

On reconnaît dans l'équation (2.46) une loi de Darcy 2D. Afin de fermer le système, il est nécessaire d'écrire une équation sur la pression. Cette équation est obtenue en intégrant la condition d'incompressibilité (2.10) suivant $\tilde{z}$, entre 0 et la hauteur "relative" variable du canal $\tilde{h}(\tilde{x}, \tilde{y}) = \frac{h(\tilde{x}, \tilde{y})}{h}$:

$$\int_0^{\tilde{h}(\tilde{x}, \tilde{y})} \tilde{\nabla}_{xy} \cdot \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} d\tilde{z} + \frac{c_2}{c_1} (\tilde{w}(\tilde{z} = 1) - \tilde{w}(\tilde{z} = 0)) = 0.$$

La condition d'imperméabilité des murs du canal implique que $\tilde{w}(\tilde{z} = 1) = \tilde{w}(\tilde{z} = 0) = 0$. De plus en remplaçant l'expression de $\tilde{u}$ et $\tilde{v}$ par l'expression trouvée en (2.46), on obtient :

$$\mathcal{K} \int_0^{\tilde{h}(\tilde{x}, \tilde{y})} \tilde{\nabla}_{xy} \cdot \left[\tilde{\nabla}_{xy} \tilde{P} \left(\int_0^{\tilde{z}} \frac{\sigma}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma + A(\tilde{x}, \tilde{y}) \int_0^{\tilde{z}} \frac{1}{\eta(\phi)} d\sigma + B(\tilde{x}, \tilde{y}) \right) \right] d\tilde{z} = 0,$$

sachant que $\tilde{P}$ est indépendant de $\tilde{z}$ on a (après calcul, dans chacun des cas qui nous intéressent, on peut passer l'intégrale à bornes variables derriere la divergence) :

$$\tilde{\nabla}_{xy} \cdot \left[\tilde{\nabla}_{xy} \tilde{P} \int_0^{\tilde{h}(\tilde{x}, \tilde{y})} \left(\int_0^{\tilde{z}} \frac{\sigma}{\tilde{\eta}(\phi)} d\sigma + A(\tilde{x}, \tilde{y}) \int_0^{\tilde{z}} \frac{1}{\eta(\phi)} d\sigma + B(\tilde{x}, \tilde{y}) \right) d\tilde{z} \right] = 0. \quad (2.47)$$

Si la concentration ϕ est connue, le système composé des équations (2.46-2.47) forme un système fermé si l'on prescrit les bonnes conditions aux limites sur $\tilde{P}$. Il est de plus possible de récupérer la vitesse $\tilde{w}$ en intégrant la condition d'incompressibilité (2.10) entre 0 et $\tilde{z}$:

$$\tilde{w}(x, y, z) = -\frac{c_2 \mathcal{K}}{c_1} \tilde{\nabla}_{xy} \cdot \left[\tilde{\nabla}_{xy} \tilde{P} \int_0^{\tilde{z}} \left(\int_0^{\sigma} \frac{s}{\tilde{\eta}(\phi)} ds + A(\tilde{x}, \tilde{y}) \int_0^{\sigma} \frac{1}{\eta(\phi)} ds + B(\tilde{x}, \tilde{y}) \right) d\sigma \right]. \quad (2.48)$$

2.3.3 Equation sur ϕ , modèles 2D et 2.5D

Dans les équations en vitesse et pression (2.46-2.47) apparaît une viscosité qui dépend directement des fractions volumiques (ϕ et $1 - \phi$) de chacun des deux fluides considérés, elle même donnée par l'équation (2.1c). Il est alors possible d'écrire deux types de modèles : d'une part les modèles qui prennent en compte les variations de ϕ dans la direction fine $\tilde{z}$ (modèles 2.5D) et d'autre part les modèles qui ne prennent en compte qu'une valeur "moyennée" de la fraction volumique en $\tilde{z}$ (modèles 2D).

Voyons à présent les approximations nécessaires pour obtenir une équation réduite sur ϕ . Comme on a vu à la section 2.2, les équations du mélange (2.1c) adimensionnées s'écrivent :

$$\partial_{\tilde{t}}\phi + \left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{v}} \right) \cdot \tilde{\nabla}_{xy}\phi + \frac{w_0 l}{u_0 h} \tilde{w} \partial_{\tilde{z}}\phi = \frac{\mathcal{D}_0}{u_0 l} \tilde{\nabla}_{xy} \cdot (\tilde{\mathcal{D}}(\phi) \tilde{\nabla}_{xy}\phi) + \frac{l^2}{h^2} \frac{\mathcal{D}_0}{u_0 l} \partial_{\tilde{z}}(\tilde{\mathcal{D}}(\phi) \partial_{\tilde{z}}\phi).$$

cette équation, ré-écrite en fonction du paramètre ε donne :

$$\partial_{\tilde{t}}\phi + \left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{v}} \right) \cdot \tilde{\nabla}_{xy}\phi + \frac{c_2}{c_1} \tilde{w} \partial_{\tilde{z}}\phi = \frac{1}{\mathcal{P}_e} \tilde{\nabla}_{xy} \cdot (\tilde{\mathcal{D}}(\phi) \tilde{\nabla}_{xy}\phi) + \frac{c_1^2}{\varepsilon^2} \frac{1}{\mathcal{P}_e} \partial_{\tilde{z}}(\tilde{\mathcal{D}}(\phi) \partial_{\tilde{z}}\phi),$$

où $\mathcal{P}_e$ représente un nombre de Péclet, et ne dépend pas du paramètre ε :

$$\mathcal{P}_e = \frac{u_0 l}{\mathcal{D}_0}. \quad (2.49)$$

Si on choisit de considérer, d'un côté, que ϕ varie peu dans la direction $\tilde{z}$, c'est-à-dire :

$$\partial_{\tilde{z}}\phi = o(\varepsilon), \quad (2.50)$$

$$\partial_{\tilde{z}\tilde{z}}^2\phi = o(\varepsilon^2), \quad (2.51)$$

alors, tous les termes de l'équation (2.18) sont au même ordre de grandeur. On garde alors l'équation 3D (2.18) complète dans le modèle, ce sont les modèles 2.5D (2D pour la pression, 3D pour les vitesses et ϕ).

D'un autre côté, si on ne fait aucune considération sur les dérivées en $\tilde{z}$ de ϕ , alors il ne reste que le dernier terme, celui en $\frac{c_1}{\varepsilon^2}$ au premier ordre dans l'équation (2.18). On a donc à l'ordre $o\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right)$:

$$\partial_{\tilde{z}}(\tilde{\mathcal{D}}(\phi) \partial_{\tilde{z}}\phi) = 0.$$

En intégrant suivant $\tilde{z}$ on obtient :

$$\tilde{\mathcal{D}}(\phi) \partial_{\tilde{z}}\phi(x, y, z) = \tilde{\mathcal{D}}(\phi) \partial_{\tilde{z}}\phi(x, y, z = 0),$$

la condition d'imperméabilité au fond du canal impose : $\partial_{\tilde{z}}\phi(x, y, z = 0) = 0$. On a donc finalement :

$$\partial_{\tilde{z}}\phi(x, y, z) = 0. \quad (2.52)$$

La condition (2.52) obtenue au premier ordre ré-injectée dans l'équation (2.18) donne :

$$\partial_{\tilde{t}}\phi + \left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{v}} \right) \cdot \tilde{\nabla}_{xy}\phi = \frac{\mathcal{D}_0}{u_0 l} \tilde{\nabla}_{xy} \cdot (\tilde{\mathcal{D}}(\phi) \tilde{\nabla}_{xy}\phi). \quad (2.53)$$

en moyennant l'équation (2.53) suivant $\tilde{z}$, on a :

$$\partial_{\tilde{t}}\phi + \left(\frac{\tilde{u}}{\tilde{v}} \right) \cdot \tilde{\nabla}_{xy}\phi = \frac{\mathcal{D}_0}{u_0 l} \tilde{\nabla}_{xy} \cdot (\tilde{\mathcal{D}}(\phi) \tilde{\nabla}_{xy}\phi). \quad (2.54)$$

ou le vitesse $(\bar{u}, \bar{v})$ moyennée en z est définie par :

$$\begin{pmatrix} \bar{u} \\ \bar{v} \end{pmatrix} = \frac{1}{\bar{h}} \int_0^{\bar{h}} \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} dz. \quad (2.55)$$

On obtient donc une équation 2D pour ϕ , qui ne nécessite que de connaître une valeur moyenne des vitesses horizontales pour les termes de transport. On appellera les modèles qui en découlent les modèles 2D.

2.4 Modèles complets et conditions aux limites

On vient de voir que différents modèles peuvent être ré-écrits en prenant compte ou non des variations de ϕ dans la direction verticale (modèles 2.5D ou modèles 2D). On a aussi vu que la fermeture du modèle, c'est à dire l'évaluation des coefficients A et B apparaissant dans les équations (2.46- 2.47), dépend des conditions aux limites que l'on souhaite placer en haut et au fond du canal. Pour la suite on détaillera l'écriture des modèles 2.5D et 3D pour deux types de conditions aux limites : une condition de glissement sur un fond plat et une condition d'adhérence sur un fond à reliefs (h variable). Par commodité, et étant donné que les différentes réductions de modèles ont déjà été faites, on re-dimensionnera toutes les variables sur leurs dimensions caractéristiques respectives via les relations (2.8-2.9), (2.11-2.12) et (2.15-2.16).

2.4.1 Modèles 2.5D

On résume ici le modèle 2.5D en reprenant les équations (2.47), (2.46), (2.48) et (2.1c) écrites sous une forme plus simple :

$$\begin{cases} \nabla_{xy} \cdot [K_1(x, y) \nabla_{xy} P] = 0, & (2.56a) \\ \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} (x, y, z) = K_2(x, y, z) \nabla_{xy} P, & (2.56b) \\ w = -\nabla_{xy} \cdot \left[\nabla_{xy} P \int_0^z K_2(x, y, z) d\sigma \right], & (2.56c) \\ \partial_t \phi + \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (\mathcal{D}(\phi) \nabla \phi). & (2.56d) \end{cases}$$

où les coefficients K_1 et K_2 sont définis par :

$$K_1(x, y) = \int_0^{h(x, y)} \left(\int_0^z \frac{\sigma}{\eta(\phi)} d\sigma + A(x, y) \int_0^z \frac{1}{\eta(\phi)} d\sigma + B(x, y) \right) dz, \quad (2.57)$$

et :

$$K_2(x, y, z) = \int_0^z \frac{\sigma}{\eta(\phi)} d\sigma + A(x, y) \int_0^z \frac{1}{\eta(\phi)} d\sigma + B(x, y). \quad (2.58)$$

Les coefficients A et B apparaissant dans l'écriture des coefficients K_1 et K_2 dépendent du type de conditions aux limites que l'on souhaite prendre en compte en haut et au fond du canal. Nous avons détaillé leurs expressions dans les sections 2.3.1.1 et 2.3.1.2 dans le cas de conditions de glissement dans un canal plat et dans le cas de conditions de d'adhérence dans un canal à reliefs.

Le système (2.56a-2.56d) est fermé si on lui adjoint des conditions aux limites. Considérons un domaine rectangulaire Ω représentant le canal (voir Fig. 2.2), on notera Γ_e et Γ_s les bords d'entrée et

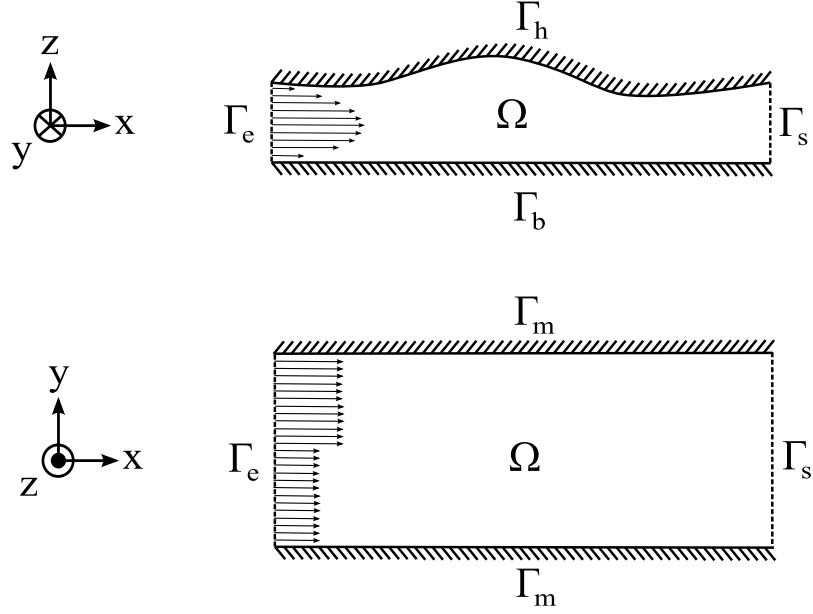


FIGURE 2.2 – Domaine et notations pour les modèles (2.56a-2.56d) et (2.64a-2.64c).

de sortie du canal, Γ_m les murs latéraux et enfin Γ_b et Γ_h le haut et le fond du canal. L'équation (2.56a) est 2D, les variables spatiales qu'elle met en jeu sont (x, y) (canal vu de haut, en bas sur la Fig 2.2). Il est donc nécessaire d'imposer des conditions aux limites pour cette équation sur $\Gamma_e \cup \Gamma_s \cup \Gamma_m$. A l'entrée on souhaite imposer un profil de vitesse $u_0(y)$. Grâce à la loi de Darcy (2.58), cette condition d'entrée sur les vitesses peut être réécrite en termes de conditions aux limites de Neumann sur la pression :

$$\partial_x P|_{\Gamma_e} = \frac{\overline{u_0}(y)}{K_2(0, y, z)} .$$

A la sortie on impose la pression :

$$P|_{\Gamma_s} = 0 .$$

Sur les murs latéraux, la condition d'imperméabilité $v|_{\Gamma_m} = 0$ peut être traduite, grâce à (2.58) en une condition de Neumann sur la pression :

$$\partial_y P|_{\Gamma_m} = 0 .$$

Passons à l'équation (2.56d) sur ϕ . Cette équation est 3D, il sera donc nécessaire de lui adjoindre des conditions aux limites sur $\Gamma_e \cup \Gamma_s \cup \Gamma_m \cup \Gamma_h \cup \Gamma_b$. A l'entrée on impose une condition de Dirichlet inhomogène correspondant aux conditions d'injection du fluide dans le canal :

$$\phi|_{\Gamma_e} = \phi_1(y) ,$$

Sur les murs latéraux, ainsi qu'en haut et au fond, l'imperméabilité des bords du canal impose d'utiliser une condition de Neumann homogène pour les bords $\Gamma_m \cup \Gamma_h \cup \Gamma_b$. On a donc :

$$\partial_y \phi|_{\Gamma_m} = 0 ,$$

ainsi que :

$$\partial_z \phi|_{\Gamma_b} = 0 ,$$

et finalement :

$$\partial_{\vec{n}}\phi|_{\Gamma_h} = 0.$$

A la sortie, on a une condition de Neumann sur ϕ :

$$\partial_x\phi|_{\Gamma_s} = 0.$$

En résumé on adjoint les conditions aux limites suivantes au modèle (2.56a-2.56d) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_x P|_{\Gamma_e} = \frac{\overline{u_0}(y)}{K_2(0, y, z)}, \\ P|_{\Gamma_s} = 0, \\ \partial_y P|_{\Gamma_m} = 0, \\ \phi|_{\Gamma_e} = \phi_1(y), \\ \partial_y \phi|_{\Gamma_m} = 0, \\ \partial_z \phi|_{\Gamma_b} = 0, \\ \partial_{\vec{n}} \phi|_{\Gamma_h} = 0, \\ \partial_x \phi|_{\Gamma_s} = 0. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (2.59a) \\ (2.59b) \\ (2.59c) \\ (2.59d) \\ (2.59e) \\ (2.59f) \\ (2.59g) \\ (2.59h) \end{array}$$

2.4.2 Modèles 2D

Résumons à présent le modèle 2D en rassemblant les équations (2.47), (2.47) (écrite dans une version moyennée en z) et (2.54) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_{xy} \cdot [K_1(x, y) \nabla_{xy} P] = 0, \\ \left(\frac{\overline{u}}{\overline{v}} \right) (x, y) = \overline{K_2}(x, y) \nabla_{xy} P, \\ \partial_t \phi + \left(\frac{\overline{u}}{\overline{v}} \right) \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (\mathcal{D}(\phi) \nabla \phi). \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (2.60a) \\ (2.60b) \\ (2.60c) \end{array}$$

Les écritures K_1 et de K_2 se trouvent ici grandement simplifiées par le fait que la viscosité ne dépend plus de z . A partir de l'équation (2.57), K_1 s'écrit :

$$K_1(x, y) = \frac{h^3(x, y)}{6\eta(\phi)} + A(x, y) \frac{h^2(x, y)}{2\eta(\phi)} + h(x, y) B(x, y). \quad (2.61)$$

De la même manière on obtient K_2 :

$$K_2(x, y, z) = \frac{z^2}{2\eta(\phi)} + A(x, y) \frac{z}{\eta(\phi)} + B(x, y). \quad (2.62)$$

Dans l'équation (2.64b), c'est une valeur moyennée de K_2 qui apparaît :

$$\overline{K_2}(x, y) = \frac{1}{h} \int_0^h K_2(x, y, z) dz = \frac{h^2}{6\eta(\phi)} + A(x, y) \frac{h}{2\eta(\phi)} + B(x, y). \quad (2.63)$$

Comme précédemment on adjoint des conditions aux limites sur ce modèle. Toutes les équations de (2.64a-2.64c) étant 2D, les bords du domaine sont ici $\Gamma_e \cup \Gamma_s \cup \Gamma_m$ (voir Fig. 2.2). Les conditions aux

limites sur la pression et sur ϕ seront donc ici absolument identiques à celles énoncées à la section 2.4.1 :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_x P|_{\Gamma_e} = \frac{\overline{u_0}(y)}{\overline{K_2}(0, y)}, \\ P|_{\Gamma_s} = 0, \\ \partial_y P|_{\Gamma_m} = 0, \\ \phi|_{\Gamma_e} = \phi_1(y), \\ \partial_y \phi|_{\Gamma_m} = 0, \\ \partial_x \phi|_{\Gamma_s} = 0. \end{array} \right.$$

2.5 Un résultat d'existence sur le modèle 2D

On donne ici un résultat d'existence de solutions faibles globales sur le modèle (2.64a - 2.64c).

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_{xy} \cdot [K_1(\phi) \nabla_{xy} P] = 0, \\ \left(\frac{\overline{u}}{\overline{v}} \right) (x, y) = \overline{K_2}(\phi) \nabla_{xy} P, \\ \partial_t \phi + \left(\frac{\overline{u}}{\overline{v}} \right) \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (\mathcal{D}(\phi) \nabla \phi). \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (2.64a) \\ (2.64b) \\ (2.64c) \end{array}$$

auquel on ajoute la condition initiale

$$\phi(0, x, y) = \phi_0(x, y), \quad \forall (x, y) \in \Omega, \quad (2.65)$$

où ϕ_0 est une fonction régulière donnée sur Ω . On s'intéresse au cas particulier d'un canal à hauteur constante. On a donc les valeurs suivantes de K_1 et $\overline{K_2}$:

$$\begin{aligned} K_1(x, y) &= \frac{h^3}{12 \eta(\phi)}, \\ \overline{K_2}(x, y) &= -\frac{h^2}{12 \eta(\phi)}. \end{aligned}$$

On considère également le cas où le coefficient de diffusion $\mathcal{D}$ est constant et on effectue d'ores et déjà l'hypothèse suivante sur les coefficients K_1 et $\overline{K_2}$

$$\begin{aligned} \exists (\alpha_i, \beta_i) \in \mathbb{R}_+^*, \quad i = 1, 2 \quad t.q. \quad \forall \varphi \in L_{\text{loc}}^\infty(\mathbb{R}_+; L^2) \cap L_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}_+; H^1), \\ \alpha_1 \leq K_1(\phi) \leq \beta_1, \quad \alpha_2 \leq -\overline{K_2}(\phi) \leq \beta_2. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Cette hypothèse est utile pour effectuer des estimations a priori sur le système (2.64a - 2.64c). Pour plus de commodité, on introduit le relèvement suivant :

$$\phi(x, y) = \varphi(x, y) + \phi_1(y).$$

On rappelle que ϕ_1 est la condition d'entrée sur ϕ . Le système (2.64a - 2.64c) s'écrit alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_{xy} \cdot [K_1(\varphi + \phi_1) \nabla_{xy} P] = 0, \\ \left(\frac{\overline{u}}{\overline{v}} \right) (x, y) = \overline{K_2}(\varphi + \phi_1) \nabla_{xy} P, \\ \partial_t \varphi + \left(\frac{\overline{u}}{\overline{v}} \right) \cdot \nabla \varphi - \mathcal{D} \Delta \varphi = -v \partial_y \phi_1 + \mathcal{D} \partial_{yy}^2 \phi_1. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (2.67a) \\ (2.67b) \\ (2.67c) \end{array}$$

Les conditions aux limites sur φ s'écrivent alors :

$$\varphi|_{\Gamma_e} = 0, \quad (2.68)$$

$$\partial_y \varphi|_{\Gamma_m} = 0, \quad (2.69)$$

$$\partial_x \varphi|_{\Gamma_s} = 0. \quad (2.70)$$

Les conditions aux limites sur la pression s'écrivent par ailleurs :

$$\partial_y P|_{\Gamma_m} = 0, \quad (2.71)$$

$$\partial_x P|_{\Gamma_e} = \frac{\overline{u_0}(y)}{K^2(\phi_1)}, \quad (2.72)$$

$$P|_{\Gamma_s} = 0. \quad (2.73)$$

Le théorème d'existence est le suivant.

Théorème 1. *On suppose que (2.66) est satisfaite et que $\phi_1(y) \in H^2(0, l)$, $\overline{u_0}(y) \in L^2(0, l)$, $\phi_0 \in H^1(\Omega)$. Alors il existe une solution faible globale*

$$\begin{aligned} \varphi &\in L_{loc}^\infty(\mathbb{R}_+; L^2(\Omega)) \cap L_{loc}^2(\mathbb{R}_+; H^1(\Omega)) \\ (\overline{u}, \overline{v}) &\in \left(L_{loc}^2(\mathbb{R}_+; L^2(\Omega)) \right)^2 \\ P &\in L_{loc}^2(\mathbb{R}_+; H^1(\Omega)) \end{aligned}$$

au système (2.67a - 2.67c) associé aux conditions limites (2.68 - 2.73).

Démonstration. La démonstration repose sur la méthode de Galerkin associée à la base orthonormée $(e_{ij})_{i,j \in \mathbb{N}}$ des fonctions propres de l'opérateur Laplacien sur Ω vérifiant les conditions aux limites (2.68 - 2.70)

$$e_{ij} = \sin \left(\left(i + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi x}{L} \right) \cos \left(j \frac{\pi y}{L} \right),$$

où $(i, j) \in \mathbb{N}^2$. On re-numérote les éléments de la base $(e_{ij})_{(i,j) \in \mathbb{N}^2}$ avec un indice unique $(e_k)_{k \in \mathbb{N}}$. On note également V_n l'espace vectoriel engendré par les n premiers éléments de la base $(e_k)_{k \in \mathbb{N}}$. Toute fonction φ peut alors être décomposée sur la base $(e_k)_{k \in \mathbb{N}}$ par :

$$\varphi(t, x, y) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k(t) e_k(x, y).$$

La solution approchée $\overline{u}_n, \overline{v}_n, p_n \varphi_n$ est définie par $\varphi_n \in V_n$ et $\forall 0 \leq k \leq n$:

$$\begin{cases} \nabla_{xy} \cdot [K_1(\varphi_n + \phi_1) \nabla_{xy} P_n] = 0, & (2.74a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \left(\frac{\overline{u}_n}{\overline{v}_n} \right) (x, y) = \overline{K_2}(\varphi_n + \phi_1) \nabla_{xy} P_n, & (2.74b) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \partial_t \int_{\Omega} \varphi_n e_k + \int_{\Omega} \left(\frac{\overline{u}_n}{\overline{v}_n} \right) \cdot \nabla \varphi_n e_k - \mathcal{D} \int_{\Omega} \Delta \varphi_n e_k = \int_{\omega} \left(-v_n \partial_y \phi_1 + \mathcal{D} \partial_{yy}^2 \phi_1 \right) e_k. & (2.74c) \end{cases}$$

Le système (2.74a - 2.74c) représente un système d'équations différentielles ordinaires. D'après le théorème de Cauchy-Lipschitz, il possède une unique solution sur un intervalle $[0, T_n[$ où $T_n > 0$. Pour

prouver le Théorème 1, il suffit donc d'établir des estimations a priori afin de démontrer que $T_n = +\infty$ et de passer à la limite $n \rightarrow +\infty$ dans le système (2.74a-2.74c). Pour cela, on écrit :

$$\varphi_n(t, x, y) = \sum_{k=0}^n \alpha_k(t) e_k(x, y),$$

et on multiplie chaque équation (2.74c) par α_k et on somme les équations résultantes entre 0 et n pour obtenir

$$\int_{\Omega} \varphi_n \partial_t \varphi_n + \int_{\Omega} \left(\frac{\bar{u}_n}{\bar{v}_n} \right) \cdot \nabla \varphi_n \varphi_n - \mathcal{D} \int_{\Omega} \Delta \varphi_n \varphi_n = \int_{\Omega} \left(-v_n \partial_y \phi_1 + \mathcal{D} \partial_{yy}^2 \phi_1 \right) \varphi_n.$$

En utilisant des intégrations par parties, les conditions aux limites (2.68-2.73) et le fait que

$$\nabla \cdot \left(\frac{\bar{u}_n}{\bar{v}_n} \right) = 0,$$

on obtient

$$\frac{1}{2} \partial_t \int_{\Omega} \varphi_n^2 + \int_{\Gamma} \frac{\varphi_n^2}{2} \left(\frac{\bar{u}_n}{\bar{v}_n} \right) \cdot \vec{n} + \mathcal{D} \int_{\Omega} |\nabla \varphi_n|^2 = \int_{\Omega} \left(-v_n \partial_y \phi_1 + \mathcal{D} \partial_{yy}^2 \phi_1 \right) \varphi_n. \quad (2.75)$$

On rappelle maintenant que sur les murs latéraux

$$\left(\frac{\bar{u}_n}{\bar{v}_n} \right) \cdot \vec{n} = 0$$

et qu'en entrée, $\varphi_n = 0$. Ainsi

$$\int_{\Gamma} \frac{\varphi_n^2}{2} \left(\frac{\bar{u}_n}{\bar{v}_n} \right) \cdot \vec{n} = \int_{\Gamma_s} \frac{\varphi_n^2}{2} \bar{u}_n(L).$$

On démontre ensuite le lemme suivant.

Lemme 1. *Pour chaque $n \in \mathbb{N}$, la solution u_n de l'équation (2.74b) vérifie $u_n(L) \geq 0$ pour $t \in [0, T_n[$.*

Démonstration. On commence par montrer que la pression P_n est positive dans le domaine Ω . Pour cela, on décompose $P_n = P_n^+ + P_n^-$ où $P_n^+ = \max(P_n, 0)$ et $P_n^- = \min(P_n, 0)$. On multiplie l'équation (2.74a) par P_n^- , et on effectue une intégration par parties

$$- \int_{\Omega} K_1(\varphi_n + \phi_1) |\nabla P_n^-|^2 + \int_{\Gamma} K_1(\varphi_n + \phi_1) \frac{\partial P_n^-}{\partial \vec{n}} P_n^- = 0.$$

Ainsi, puisque $P_n = 0$ en sortie, $\frac{\partial P_n}{\partial \nu} = 0$ sur les murs latéraux et qu'en entrée,

$$\frac{\partial P_n}{\partial \vec{n}} = \frac{\bar{u}_0(y)}{\bar{K}_2(\phi_1)},$$

on obtient

$$- \int_{\Omega} K_1(\varphi_n + \phi_1) |\nabla P_n^-|^2 - \int_{\Gamma_e} K_1(\phi_1) \frac{\bar{u}_0(y)}{\bar{K}_2(\phi_1)} P_n^- = 0.$$

Or, par hypothèse, $K_1(\varphi_n + \phi_1) \geq 0$, $K_1(\phi_1) \geq 0$, $\overline{K_2}(\phi_1) \leq 0$ et $\overline{u_0}(y) \geq 0$, ce qui donne

$$\int_{\Gamma_e} K_1(\phi_1) \frac{\overline{u_0}(y)}{\overline{K_2}(\phi_1)} P_n^- \geq 0.$$

D'où $|\nabla P_n^-| = 0$ et ainsi $P_n^- = 0$, ce qui assure $P_n \geq 0$ sur Ω . A la sortie, on a $P_n = 0$. On en déduit que sur Γ_s ,

$$\frac{\partial P_n}{\partial x} \leq 0,$$

ce qui fournit, d'après l'équation (2.74b) et le fait que $\overline{K_2}(\phi_1) \leq 0$, $\overline{u_n}(L) \geq 0$. $\square$

On peut maintenant conclure la démonstration du Théorème 1. D'après l'équation (2.75), on obtient

$$\frac{1}{2} \partial_t \int_{\Omega} \varphi_n^2 + \mathcal{D} \int_{\Omega} |\nabla \varphi_n|^2 \leq c |\varphi_n|_{L^2(\Omega)}, \quad (2.76)$$

puisque $\phi_1 \in H^2(0, D)$, où c ne dépend que de ϕ_1 . L'inégalité de Gronwall permet de conclure que φ_n est bornée dans $L_{\text{loc}}^\infty(R_+; L^2(\Omega)) \cap L_{\text{loc}}^2(R_+; H^1(\Omega))$ et donc que $T_n = +\infty$. On en déduit aisément que $\overline{u_n}$ et $\overline{v_n}$ sont bornées dans $L_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}_+; L^2(\Omega))$ d'après l'hypothèse (2.66). Le passage à la limite se fait dans la formulation faible (2.74a-2.74c) en utilisant le fait que

$$\nabla \cdot \begin{pmatrix} \overline{u_n} \\ \overline{v_n} \end{pmatrix} = 0$$

et le lemme de compacité d'Aubin qui donne une convergence forte dans $L^\infty(0, T, L^2)$ pour φ_n . $\square$

Chapitre 3

Méthodes numériques

Dans ce chapitre nous détaillons l'ensemble des méthodes numériques utilisées afin de pouvoir effectuer des prédictions sur les modèles introduits au chapitre précédent. Ces méthodes numériques font intervenir des méthodes de différences finies en temps et de volumes finis en espace. Le choix a été fait ici de discrétiser les équations sur un maillage cartésien, car cette approche est particulièrement bien adaptée dans le contexte des écoulements micro-fluidiques (écoulements dans des canaux rectilignes). Dans la suite de ce chapitre nous exposons tout d'abord les méthodes numériques utilisées afin de discrétiser les équations en temps, puis nous écrirons en détail les schémas numériques utilisés pour approcher les différents opérateurs en espace apparaissant dans le modèle. L'implémentation de ces méthodes numériques dans le code de calcul développé par ailleurs sera systématiquement validée grâce à une batterie de cas-tests simples. Rappelons tout d'abord le système générique que l'on veut discrétiser :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_{xy} \cdot [K_1(\phi, x, y) \nabla_{xy} P] = 0, \\ \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} (x, y, z) = K_2(\phi, x, y, z) \nabla_{xy} P, \\ w(x, y, z) = -\nabla_{xy} \cdot \left[\nabla_{xy} P \int_0^z K_2(\phi, x, y, z) d\sigma \right], \\ \partial_t \phi + \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot (\mathcal{D}(\phi) \nabla \phi) = 0. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (3.1a) \\ (3.1b) \\ (3.1c) \\ (3.1d) \end{array}$$

3.1 Discrétisation en temps

On introduit pour toute la suite du chapitre les pas de temps discrets : $t_n = n \delta t$ où $n \in \mathbb{N}$ et où δt représente le pas de temps numérique. On verra par la suite que ce pas de temps sera soumis à une restriction nécessaire à la stabilité du schéma. Le modèle (3.1a-3.1d) sera écrit à ces différents temps discrets. Les différentes variables P, u, v, w, ϕ du modèle écrites à ces pas de temps discrets sont notés :

$$\begin{aligned} P^n(x, y) &\sim P(t_n, x, y), \\ u^n(x, y, z) &\sim u(t_n, x, y, z), \\ v^n(x, y, z) &\sim v(t_n, x, y, z), \\ w^n(x, y, z) &\sim w(t_n, x, y, z), \\ \phi^n(x, y, z) &\sim \phi(t_n, x, y, z). \end{aligned}$$

Voyons à présent les différentes étapes nécessaires pour résoudre le problème (3.1a-3.1d) en temps. Supposons que l'on connaisse ϕ^n , on peut alors calculer les coefficients $K_1(\phi^n, x, y)$ $K_2(\phi^n, x, y, z)$ dans les équations (3.1a-3.1c). On résout d'abord le problème :

$$\nabla_{xy} \cdot [K_1(\phi^n, x, y) \nabla_{xy} P^n] = 0.$$

Une fois que l'on a calculé la pression P^n on peut calculer les vitesses u^n , v^n , et w^n avec :

$$\begin{aligned} u^n(x, y, z) &= K_2(\phi^n, x, y, z) \partial_x P^n, \\ v^n(x, y, z) &= K_2(\phi^n, x, y, z) \partial_y P^n, \\ w^n(x, y, z) &= -\nabla_{xy} \cdot \left[\nabla_{xy} P^n \int_0^z K_2(\phi^n, x, y, z) d\sigma \right]. \end{aligned}$$

Reste maintenant à mettre à jour la concentration ϕ en grâce à l'équation de convection-diffusion (3.1d). Cette équation contient une dérivée en temps que l'on approche par une méthode de différences finies :

$$\partial_t \phi(t_n, x, y, z) \sim \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\delta t}.$$

On connaît la vitesse $V^n = (u^n, v^n, w^n)$, on résout explicitement le terme de transport, et implicitement le terme de diffusion. L'équation (3.1d) discrétisée en temps s'écrit alors :

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\delta t} + V^n \cdot \nabla \phi^n - \nabla \cdot (\mathcal{D}(\phi^n) \nabla \phi^{n+1}) = 0,$$

on met donc à jour ϕ en résolvant le problème suivant :

$$(1 - \delta t \nabla \cdot (\mathcal{D}(\phi^n) \nabla \cdot)) \phi^{n+1} = \phi^n - \delta t V^n \cdot \nabla \phi^n.$$

On obtient une nouvelle valeur de ϕ , au temps t_{n+1} et on peut reprendre le calcul à partir de (3.2a). On vient de décrire de quelle manière le système était semi-dicrétisé en temps, il reste à montrer de quelle manière sont résolues ces différentes étapes faisant intervenir des dérivées spatiales. En résumé, on cherche à discrétiser en espace les équations suivantes :

$$\begin{cases} \nabla_{xy} \cdot [K_1(\phi^n, x, y) \nabla_{xy} P^n] = 0, & (3.2a) \\ u^n(x, y, z) = K_2(\phi^n, x, y, z) \partial_x P^n, & (3.2b) \\ v^n(x, y, z) = K_2(\phi^n, x, y, z) \partial_y P^n, & (3.2c) \\ w^n(x, y, z) = -\nabla_{xy} \cdot \left[\nabla_{xy} P^n \int_0^z K_2(\phi^n, x, y, z) d\sigma \right], & (3.2d) \\ (1 - \delta t \nabla \cdot (\mathcal{D}(\phi^n) \nabla \cdot)) \phi^{n+1} = \phi^n - \delta t V^n \cdot \nabla \phi^n. & (3.2e) \end{cases}$$

3.2 Discrétisation en espace

On définit un maillage cartésien du domaine Ω dans lequel est écrit le modèle (3.1a-3.1c) :

$$\begin{aligned} x_i &= i \delta x, & i &= 1 \dots N_x, \\ y_j &= j \delta y, & j &= 1 \dots N_y, \\ z_k &= k \delta z, & k &= 1 \dots N_z. \end{aligned}$$

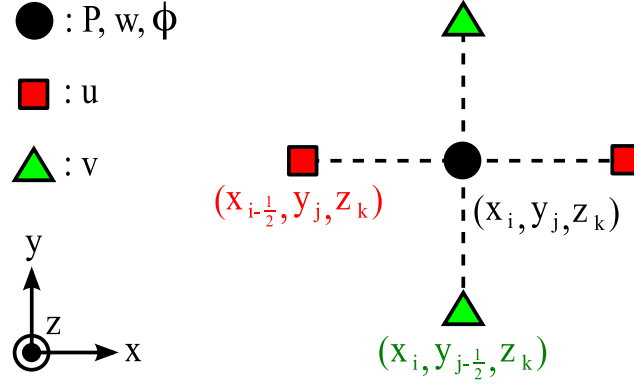


FIGURE 3.1 – Placement des différentes variables sur une grille décalée pour la discrétisation des équations (3.1a-3.1d).

où N_x, N_y, N_z définissent la résolution du maillage, et où $\delta x, \delta y$ et δz représentent les pas de discrétisation en espace. Dans le cas où le domaine est donné par $\Omega = [0, L] \times [0, l] \times [0, h]$, ces pas de discrétisation sont définis par :

$$\delta x = \frac{L}{N_x}, \quad (3.3)$$

$$\delta y = \frac{l}{N_y}, \quad (3.4)$$

$$\delta z = \frac{h}{N_z}, \quad (3.5)$$

Les différentes variables du problème (3.1a-3.1d) sont données sur une grille décalée (pour u et v , voir Fig. 3.1) définie par :

$$\begin{aligned} P_{ijk}^n &\sim P^n(x_i, y_j, z_k), \\ u_{ijk}^n &\sim u^n(x_{i-1/2}, y_j, z_k), \\ v_{ijk}^n &\sim v^n(x_i, y_{j-1/2}, z_k), \\ w_{ijk}^n &\sim w^n(x_i, y_j, z_k), \\ \phi_{ijk}^n &\sim \phi^n(x_i, y_j, z_k). \end{aligned}$$

Ce placement de variables permet une discrétisation directement à l'ordre 2 pour les différentes équations (3.1a-3.1d).

3.2.1 Traitement des problèmes elliptiques

On s'intéresse tout d'abord aux problèmes elliptiques apparaissant dans les étapes (3.2a) et (3.2e). Ces équations s'écrivent sous la forme générale :

$$\alpha S - \nabla \cdot (K \nabla S) = f, \quad (3.6)$$

où α est un coefficient positif donné, et où f est une fonction connue. Pour l'étape (3.2a) on a : $\alpha = 0$, $K = K^{2D}(\phi^n, x, y)$ et $f = 0$ avec $S = P(x, y)$. Pour l'étape (3.2e) on a : $\alpha = 1$, $K = \delta t \mathcal{D}(\phi^n(x, y, z))$ et $f = \phi^n(x, y, z) - \delta t V^n(x, y, z) \cdot \nabla \phi^n(x, y, z)$ et enfin $S = \phi(x, y, z)$. On ne détaille ici que la discrétisation du cas 3D pour l'équation (3.6), celle du cas 2D en découlant naturellement.

3.2.1.1 Discrétisation de l'équation

On choisit d'utiliser ici un formalisme "volumes finis" afin de mettre en valeur l'aspect localement conservatif de notre schéma, propriété essentielle pour notre problème. Intégrons l'équation (3.6) sur un volume de contrôle défini par :

$$\Omega_{ijk} = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [y_{j-1/2}, y_{j+1/2}] \times [z_{k-1/2}, z_{k+1/2}],$$

ce qui donne :

$$\alpha \int_{\Omega_{ijk}} S \, dx \, dy \, dz - \int_{\Omega_{ijk}} \nabla \cdot (K \nabla S) \, dx \, dy \, dz = \int_{\Omega_{ijk}} f \, dx \, dy \, dz.$$

On applique alors la formule de Stokes au second terme du membre de gauche de cette équation :

$$\alpha \int_{\Omega_{ijk}} S \, dx \, dy \, dz - \int_{\Gamma_{ijk}} K \nabla S \cdot \vec{n} \, d\Gamma_{ijk} = \int_{\Omega_{ijk}} f \, dx \, dy \, dz, \quad (3.7)$$

où $\Gamma_{i,j,k}$ représente le bord du volume de contrôle $\Omega_{i,j,k}$ et $\vec{n}$ le vecteur normal extérieur à ce bord. Avant d'évaluer l'intégrale sur $\Gamma_{i,j,k}$, on approche les intégrales sur $\Omega_{i,j,k}$ par :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_{ijk}} S \, dx \, dy \, dz &\sim S_{ijk} \, \delta x \, \delta y \, \delta z, \\ \int_{\Omega_{ijk}} f \, dx \, dy \, dz &\sim f_{ijk} \, \delta x \, \delta y \, \delta z. \end{aligned}$$

Le bord du volume de contrôle peut être décomposé en 6 faces :

$$\Gamma_{i,j,k} = \mathcal{F}_1 \cup \mathcal{F}_2 \cup \mathcal{F}_3 \cup \mathcal{F}_4 \cup \mathcal{F}_5 \cup \mathcal{F}_6.$$

L'intégrale de bord apparaissant dans l'équation (3.7) s'écrit donc :

$$\int_{\Gamma_{ijk}} K \nabla S \cdot \vec{n} \, d\Gamma_{ijk} = \sum_{p=1}^6 \int_{\mathcal{F}_p} K \nabla S \cdot \vec{n} \, d\mathcal{F}_p. \quad (3.8)$$

Montrons comment l'intégrale sur $\mathcal{F}_1$ est évaluée :

$$\int_{\mathcal{F}_1} K \nabla S \cdot \vec{n} \, d\mathcal{F}_1 = \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \left(\int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} K(x_{i+1/2}, y, z) \, \partial_x S(x_{i+1/2}, y, z) \, dz \right) dy.$$

La dérivée en x est approchée de la manière suivante :

$$\partial_x S(x_{i+1/2}, y, z) \sim \frac{S_{i+1,jk} - S_{ijk}}{\delta x}.$$

On ne dispose pas directement de la valeur $K(x_{i+1/2}, y, z)$ il faut donc interpoler les valeurs $K_{i+1,j,k}$ et $K_{i,j,k}$. Pour cela on utilise une moyenne harmonique, cette dernière assurant la continuité du flux à travers $\mathcal{F}_1$. On introduit $K_{i+1/2,jk} \sim K(x_{i+1/2}, y_j, z_k)$, qui est calculé grâce à une moyenne harmonique entre K_{ijk} et $K_{i+1,jk}$:

$$\frac{1}{K_{i+1/2,jk}} = \frac{1}{K_{i+1,jk}} + \frac{1}{K_{ijk}}, \quad (3.9)$$

ce qui implique :

$$K_{i+1/2,jk} = \frac{2 K_{i+1,jk} K_{ijk}}{K_{i+1,jk} + K_{ijk}}.$$

Finalement, l'intégrale complète est approchée par :

$$\int_{\mathcal{F}_1} K \nabla S \cdot \vec{n} d\mathcal{F}_1 \sim K_{i+1/2,jk} \left(\frac{S_{i+1,jk} - S_{ijk}}{\delta x} \right) \delta y \delta z. \quad (3.10)$$

De la même manière on approche les autres intégrales dans (3.8) :

$$\int_{\mathcal{F}_2} K \nabla S \cdot \vec{n} d\mathcal{F}_2 \sim K_{i-1/2,jk} \left(\frac{S_{i-1,jk} - S_{ijk}}{\delta x} \right) \delta y \delta z, \quad (3.11)$$

$$\int_{\mathcal{F}_3} K \nabla S \cdot \vec{n} d\mathcal{F}_3 \sim K_{i,j+1/2,k} \left(\frac{S_{i,j+1,k} - S_{ijk}}{\delta y} \right) \delta x \delta z, \quad (3.12)$$

$$\int_{\mathcal{F}_4} K \nabla S \cdot \vec{n} d\mathcal{F}_4 \sim K_{i,j-1/2,k} \left(\frac{S_{i,j-1,k} - S_{ijk}}{\delta y} \right) \delta x \delta z, \quad (3.13)$$

$$\int_{\mathcal{F}_5} K \nabla S \cdot \vec{n} d\mathcal{F}_5 \sim K_{ij,k+1/2} \left(\frac{S_{ij,k+1} - S_{ijk}}{\delta z} \right) \delta x \delta y, \quad (3.14)$$

$$\int_{\mathcal{F}_6} K \nabla S \cdot \vec{n} d\mathcal{F}_6 \sim K_{ij,k-1/2} \left(\frac{S_{ij,k-1} - S_{ijk}}{\delta z} \right) \delta x \delta y. \quad (3.15)$$

En rassemblant les formules (3.10-3.15) on obtient le schéma suivant :

$$\begin{aligned} S_{ijk} \left[\alpha \delta x \delta y \delta z + \left((K_{i+1/2,jk} + K_{i-1/2,jk}) \frac{\delta y \delta z}{\delta x} + (K_{i,j+1/2,k} + K_{i,j-1/2,k}) \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right. \right. \\ \left. \left. + (K_{ij,k+1/2} + K_{ij,k-1/2}) \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right) \right] - S_{i+1,jk} \left[K_{i+1/2,jk} \frac{\delta y \delta z}{\delta x} \right] - S_{i-1,jk} \left[K_{i-1/2,jk} \frac{\delta y \delta z}{\delta x} \right] \\ - S_{i,j+1,k} \left[K_{i,j+1/2,k} \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right] - S_{i,j-1,k} \left[K_{i,j-1/2,k} \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right] - S_{ij,k+1} \left[K_{ij,k+1/2} \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right] \\ - S_{ij,k-1} \left[K_{ij,k-1/2} \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right] = f_{ijk} \delta x \delta y \delta z. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Ce système écrit pour tous les $i = 0 \dots N_x$, $j = 0 \dots N_y$, $k = 0 \dots N_z$, auquel on ajoute une discrétisation des conditions aux limites adéquates (voir section 3.2.1.2), constitue un système linéaire symétrique à diagonale strictement dominante de taille $N_x N_y N_z \times N_x N_y N_z$. Ce système est inversible. En pratique, on utilisera un algorithme de gradient conjugué pour le résoudre.

3.2.1.2 Conditions aux limites

Pour que le système discrétisé (3.16) soit fermé, il faut, comme pour le système continu, des conditions aux limites. Considérons tout d'abord des conditions de Neumann sur le bord du domaine défini par :

$$\Gamma = \Gamma^{+x} \cup \Gamma^{-x} \cup \Gamma^{+y} \cup \Gamma^{-y} \cup \Gamma^{+z} \cup \Gamma^{-z},$$

où :

$$\begin{aligned}\Gamma^{-x} &:= \{(x, y, z) \in \Omega \mid x = 0\} , \\ \Gamma^{+x} &:= \{(x, y, z) \in \Omega \mid x = N_x \delta x\} , \\ \Gamma^{-y} &:= \{(x, y, z) \in \Omega \mid y = 0\} , \\ \Gamma^{+y} &:= \{(x, y, z) \in \Omega \mid y = N_y \delta y\} , \\ \Gamma^{-z} &:= \{(x, y, z) \in \Omega \mid z = 0\} , \\ \Gamma^{+z} &:= \{(x, y, z) \in \Omega \mid z = N_z \delta z\} .\end{aligned}$$

On ne décrira ici précisément que l'écriture de la condition aux limites sur le bord Γ^{+x} , les autres bords suivant exactement le même traitement.

Pour imposer une condition de Neumann du type : $\nabla S \cdot \vec{n}|_{\Gamma^{+x}} = g(x, y, z)$ il suffit de réécrire le schéma (3.16) en (N_x, j, k) en remplaçant le flux à travers la face $\mathcal{F}_1$ (qui appartient alors au bord Γ^{+x}) par sa valeur g donnée par la condition aux limites. On obtient alors :

$$\begin{aligned}S_{N_x j k} &\left[\alpha \delta x \delta y \delta z + \left(K_{N_x-1/2, j k} \frac{\delta y \delta z}{\delta x} + (K_{N_x, j+1/2, k} + K_{N_x, j-1/2, k}) \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (K_{N_x j, k+1/2} + K_{N_x j, k-1/2}) \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right) \right] - S_{N_x-1, j k} \left[K_{N_x-1/2, j k} \frac{\delta y \delta z}{\delta x} \right] \\ &- S_{N_x, j+1, k} \left[K_{N_x, j+1/2, k} \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right] - S_{N_x, j-1, k} \left[K_{N_x, j-1/2, k} \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right] - S_{N_x j, k+1} \left[K_{N_x j, k+1/2} \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right] \\ &- S_{N_x j, k-1} \left[K_{N_x j, k-1/2} \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right] = f_{N_x j k} \delta x \delta y \delta z - g_{N_x j k} K_{N_x, j k} \delta y \delta z .\end{aligned}$$

Si on considère maintenant la conditions de Dirichlet : $S|_{\Gamma^{+x}} = S^*$, il suffit de remplacer la valeur de $S_{N_x+1, j k}$ par la valeur S^* donnée par la condition aux limites. On obtient alors :

$$\begin{aligned}S_{N_x, j k} &\left[\alpha \delta x \delta y \delta z + \left((K_{N_x, j k} + K_{N_x-1/2, j k}) \frac{\delta y \delta z}{\delta x} + (K_{N_x, j+1/2, k} + K_{N_x, j-1/2, k}) \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (K_{N_x j, k+1/2} + K_{N_x j, k-1/2}) \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right) \right] - S_{N_x-1, j k} \left[K_{N_x-1/2, j k} \frac{\delta y \delta z}{\delta x} \right] \\ &- S_{N_x, j+1, k} \left[K_{N_x, j+1/2, k} \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right] - S_{N_x, j-1, k} \left[K_{N_x, j-1/2, k} \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right] - S_{N_x j, k+1} \left[K_{N_x j, k+1/2} \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right] \\ &- S_{N_x j, k-1} \left[K_{N_x j, k-1/2} \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right] = f_{N_x j k} \delta x \delta y \delta z + S_{j k}^* \left[K_{N_x j k} \frac{\delta y \delta z}{\delta x} \right] .\end{aligned}$$

3.2.1.3 Validation du code

Afin de valider la méthode numérique décrite ci-dessus, on s'intéresse au cas-test 2D suivant :

$$S - \nabla \cdot (K \nabla S) = f, \quad \text{sur } \Omega = [-1.5; 1.5] \times [-1.5; 1.5],$$

où le coefficient $K(x, y)$ est donné par :

$$K(x, y) = 1 + \varepsilon + \text{erf}(l(r - 1/2)) ,$$

où $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, et où la fonction erf est définie par :

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-s^2} ds. \quad (3.17)$$

La valeur de l donnera l'épaisseur de la zone de transition entre les deux valeurs de K . La valeur de ε règle la hauteur du saut entre les deux valeurs de K . On choisit comme terme source :

$$f(x, y) = \cos(2\pi x) \cos(2\pi y) + 2\pi \partial_x K \sin(2\pi x) \cos(2\pi y) + 2\pi \partial_y K \cos(2\pi x) \sin(2\pi y) + 8\pi^2 K(x, y) \cos(2\pi x) \cos(2\pi y).$$

On prescrit au bord Γ du domaine Ω une condition de Dirichlet : $S|_{\Gamma} = 0$. La solution exacte de ce problème s'écrit alors :

$$S_{\text{exact}}(x, y) = \cos(2\pi x) \cos(2\pi y).$$

Pour les tests qui vont suivre on fixe la valeur $\varepsilon = 0.1$ (saut de 1 à 0.1) et on fait varier la valeur de l . Le tableau 3.2 et la figure 3.3 résument les tests de précision effectués pour $l = 10$, $l = 20$, $l = 100$.

Résolution	Erreur (L^2)	Ordre	Erreur (L^2)	Ordre	Erreur (L^2)	Ordre
32×32	$2.078e^{-2}$	-	$2.450e^{-2}$	-	$1.943e^{-1}$	-
64×64	$5.296e^{-3}$	1.97	$6.328e^{-3}$	1.95	$2.959e^{-2}$	2.71
128×128	$1.331e^{-3}$	1.99	$1.588e^{-3}$	1.99	$5.277e^{-3}$	2.48
256×256	$3.360e^{-4}$	1.98	$3.974e^{-4}$	1.99	$1.285e^{-3}$	2.03
512×512	$8.293e^{-5}$	2.02	$1.000e^{-4}$	1.99	$3.21e^{-4}$	2.01

FIGURE 3.2 – Précision de la méthode numérique décrite à la section 3.2.1, de gauche à droite : $l = 10$, $l = 20$, $l = 100$.

On constate que la méthode décrite à la section 3.2.1 permet d'approcher la solution de ce type de problèmes à l'ordre 2. On peut s'apercevoir également que l'erreur a tendance à se concentrer dans les zones où le gradient de K est fort (figure 3.4).

Comme on peut le voir dans l'équation (3.1b), le calcul des vitesses ne se fait pas par la pression directement, mais par le gradient de pression. L'erreur commise dans le calcul des vitesses est donc tributaire de l'erreur commise sur les gradients dans la résolution du problème elliptique. Il est donc judicieux de déterminer les erreurs commises sur le gradient pour ce cas-test. Le gradient de la solution exacte s'écrit ici :

$$\nabla S_{\text{exact}} = \begin{pmatrix} 2\pi \sin(2\pi x) \cos(2\pi y) \\ 2\pi \cos(2\pi x) \sin(2\pi y) \end{pmatrix}.$$

Le tableau 3.5 résume les tests d'erreur sur le gradient pour différentes valeurs de l'épaisseur de la zone de transition sur K . La méthode utilisée pour déterminer le gradient de la solution approchée est celle décrite dans la section 3.2.2. Comme pour la solution, la méthode est d'ordre 2 sur le gradient et l'erreur se concentre sur la zone où K varie beaucoup.

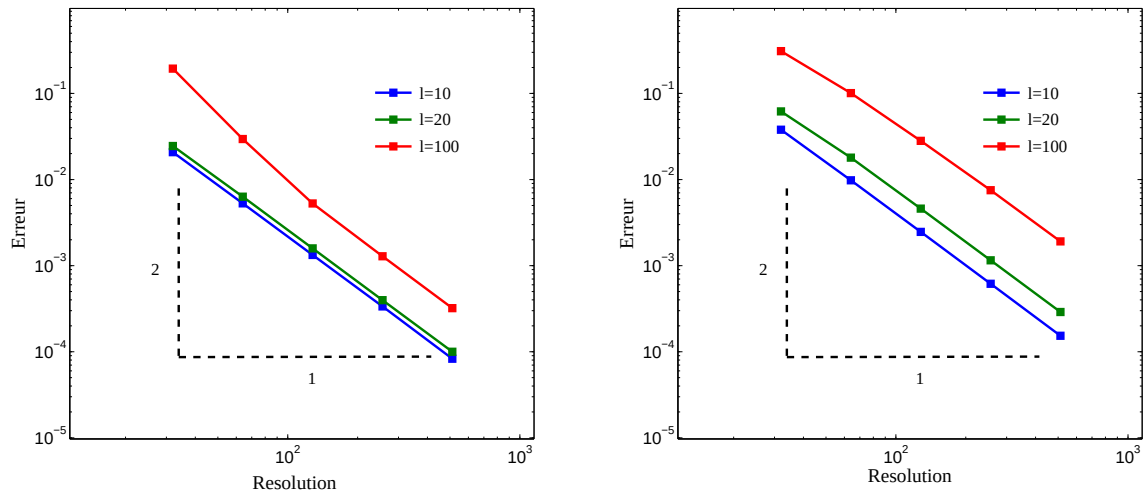


FIGURE 3.3 – Erreurs commises entre la solution numérique issue du schéma décrit à la section 3.2.1 et la solution exacte, en fonction de la résolution du maillage. À gauche : erreurs sur la solution, à droite : erreurs sur le gradient de la solution.

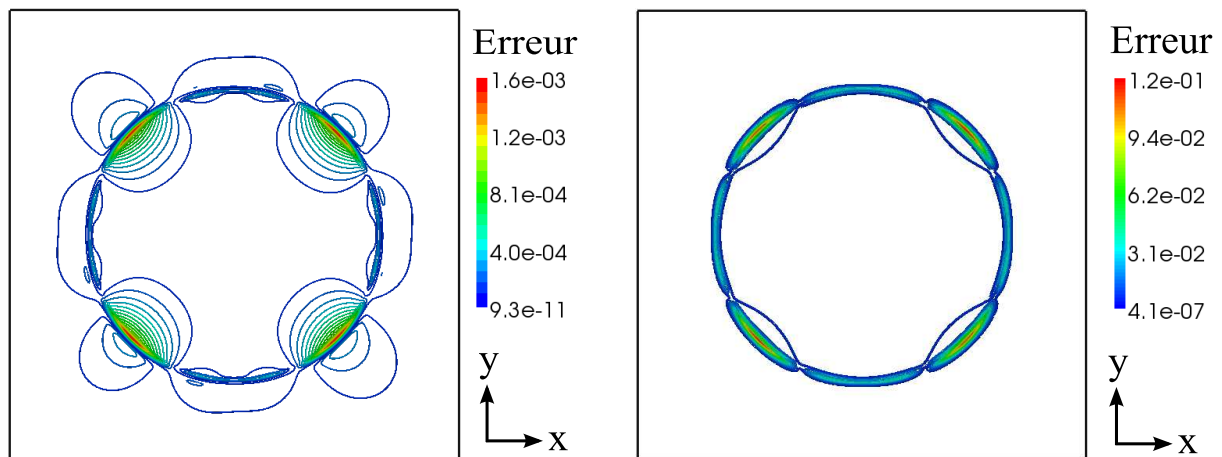


FIGURE 3.4 – carte de la répartition de l'erreur entre la solution exacte et la solution approchée. À gauche : erreur sur la solution, à droite erreur sur le gradient. Résolution 256×256 , $l = 100$.

Résolution	Erreur $\nabla (L^2)$	Ordre	Erreur $\nabla (L^2)$	Ordre	Erreur $\nabla (L^2)$	Ordre
32×32	$3.787e^{-2}$	-	$6.177e^{-2}$	-	$3.100e^{-1}$	-
64×64	$9.807e^{-3}$	1.94	$1.794e^{-2}$	1.78	$1.009e^{-1}$	1.61
128×128	$2.463e^{-3}$	1.99	$4.591e^{-3}$	1.96	$2.817e^{-2}$	1.84
256×256	$6.165e^{-4}$	1.99	$1.153e^{-3}$	1.99	$7.523e^{-3}$	1.90
512×512	$1.534e^{-4}$	2.00	$2.895e^{-4}$	1.99	$1.911e^{-3}$	1.97

FIGURE 3.5 – Précision de la méthode numérique sur le gradient, de gauche à droite : $l = 10$, $l = 20$, $l = 100$

3.2.2 Calcul des vitesses

Les étapes (3.2b-3.2d) du modèle semi-discrétisé en temps traitent du calcul des vitesses connaissant la pression (donnée par la résolution du problème elliptique décrit précédemment).

3.2.2.1 Discrétisation de la loi de Darcy : calcul de u et v

On rappelle la loi de Darcy :

$$\begin{cases} u(x, y, z) = K_2(x, y, z) \partial_x P(x, y), \\ v(x, y, z) = K_2(x, y, z) \partial_y P(x, y). \end{cases}$$

Le placement des variables décrit précédemment (voir Fig. 3.1) permet d'approcher au second ordre les deux composantes du gradient de pression. On a donc :

$$\begin{cases} u_{ijk} \sim K_{2,i-1/2,jk} \frac{P_{ij} - P_{i-1,j}}{\delta x}, \\ v_{ijk} \sim K_{2,i,j-1/2,k} \frac{P_{ij} - P_{i,j-1}}{\delta y}. \end{cases} \quad \begin{matrix} (3.18a) \\ (3.18b) \end{matrix}$$

Comme vu à la Section 3.2.1.3, l'erreur commise sur le gradient de pression par la résolution du problème elliptique approché est du second ordre. L'erreur commise sur le calcul des vitesses est donc du second ordre également.

3.2.2.2 Intégration numérique : calcul des coefficients K_1 et K_2 .

Afin d'évaluer les coefficients K_1 et K_2 nécessaires à la résolution de l'équation elliptique en pression et au calcul des vitesses il est nécessaire de calculer des intégrales en z du type :

$$K(x, y) = \int_0^h g(x, y, z) dz.$$

On approche simplement :

$$K(x_i, y_j) \sim \sum_{k=1}^{N_z-1} \left(\frac{g_{ijk} + g_{ij,k+1}}{2} \right). \quad (3.19)$$

Cette formule permet d'approcher l'intégrale au second ordre. En suivant (3.19), le coefficient :

$$K_2(x, y, z) = \int_0^z \frac{\sigma}{\eta(\phi)} d\sigma + A(x, y) \int_0^z \frac{1}{\eta(\phi)} d\sigma + B(x, y),$$

se discrétise de la manière suivante :

$$K_2(x_i, y_j, z_k) \sim \frac{\delta z}{2} \sum_{l=0}^{k-1} \left(\frac{l}{\eta(\phi_{ijl})} + \frac{l+1}{\eta(\phi_{ij,l+1})} \right) + A_{ij} \frac{\delta z}{2} \sum_{l=0}^{k-1} \left(\frac{1}{\eta(\phi_{ijl})} + \frac{1}{\eta(\phi_{ij,l+1})} \right) + B_{ij},$$

et, de la même manière, le coefficient :

$$K_1(x, y) = \int_0^h K_2(x, y, z) dz,$$

est discrétisé par :

$$K_1(x_i, y_j) \sim \frac{\delta z}{2} \sum_{k=0}^{N_z-1} (K_{ijk}^{3D} + K_{ij,k+1}^{3D}).$$

3.2.2.3 Calcul des vitesses w

L'équation sur la vitesse w reprend la formulation de l'équation elliptique en pression avec un coefficient noté ici K^* variant suivant la hauteur z :

$$w(x, y, z) = -\nabla_{xy} \cdot [K^*(x, y, z) \nabla_{xy} P].$$

On reprend donc la même discrétisation que celle décrite à la section 3.2.1 pour l'opérateur $\nabla \cdot (K^* \nabla)$:

$$\begin{aligned} w_{ijk} = & -P_{ijk} \left[(K_{i+1/2,jk}^* + K_{i-1/2,jk}^*) \frac{\delta y}{\delta x} + (K_{i,j+1/2,k}^* + K_{i,j-1/2,k}^*) \frac{\delta x}{\delta y} \right] + P_{i+1,jk} \left[K_{i+1/2,jk}^* \frac{\delta y}{\delta x} \right] \\ & + P_{i-1,jk} \left[K_{i-1/2,jk}^* \frac{\delta y}{\delta x} \right] + P_{i,j+1,k} \left[K_{i,j+1/2,k}^* \frac{\delta x}{\delta y} \right] + P_{i,j-1,k} \left[K_{i,j-1/2,k}^* \frac{\delta x}{\delta y} \right]. \end{aligned} \quad (3.20)$$

3.2.3 Traitement du transport

Dans cette section on s'intéresse à la discrétisation en espace du terme $V \cdot \nabla \phi$ apparaissant dans l'équation (3.1d) du modèle. Pour cela on utilise un schéma numérique introduit dans [39] sous le nom de schéma WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory c'est à dire schéma à poids, globalement non-oscillatoire). Ce choix provient de deux contraintes : d'une part il faut être capable de transporter des discontinuités sans introduire d'oscillations pour des raisons de stabilité à cause des divers couplages non-linéaires présents dans le modèle, et d'autre part il faut que ce schéma n'induisse pas de diffusion numérique trop importante car la largeur de la zone de mélange à une importance capitale pour les applications envisagées par la suite. Le schéma WENO 5 satisfait bien ces deux attentes.

3.2.3.1 Le schéma WENO 5

On considère une équation de transport 1D (l'extension 2D ou 3D étant immédiate) :

$$\partial_t \phi + u \partial_x \phi = 0. \quad (3.21)$$

Cette équation semi-discrétisée explicitement en temps donne :

$$\phi^{n+1} = \phi^n - \delta t u^n \partial_x \nabla \phi^n. \quad (3.22)$$

Comme on l'a vu précédemment (voir Fig. 3.1) les variables sont placées en espace de la manière suivante :

$$\begin{aligned} u_i &= u(x_{i-1/2}), \\ \phi_i &= \phi(x_i). \end{aligned}$$

Le schéma WENO s'écrit sur une grille où les variables ϕ et u sont localisés aux mêmes points et non pas sur une grille décalée. Il est donc nécessaire d'interpoler u pour disposer de sa valeur en (x_i) :

$$u_i^* = \frac{u_i + u_{i+1}}{2}.$$

L'équation (3.22) discrétisée en espace donne :

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \delta t u_i^{*,n} F(u^{*,n}, \phi^n).$$

où $F(u^{*,n}, \phi)$ reste à déterminer. L'approche que l'on envisage ici est une approche "upwind" où l'écriture de F dépend du signe des vitesses. On note donc :

$$F(u^*, \phi) = \begin{cases} F^+(u^*, \phi) & \text{si : } u_i^* > 0, \\ F^-(u^*, \phi) & \text{si : } u_i^* < 0. \end{cases}$$

Le schéma "upwind" le plus simple consiste en :

$$\begin{aligned} F^+(u^*, \phi) &= \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\delta x}, \\ F^-(u^*, \phi) &= \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\delta x}. \end{aligned} \tag{3.23}$$

Le schéma Weno décompose F^+ et F^- comme une combinaison de cinq contributions notées :

$$\begin{aligned} F_1^+ &= \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\delta x}, & F_5^- &= \frac{\phi_{i-2} - \phi_{i-3}}{\delta x}, \\ F_2^+ &= \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\delta x}, & F_4^- &= \frac{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{\delta x}, \\ F_3^+ &= \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\delta x}, & F_3^- &= \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\delta x}, \\ F_4^+ &= \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\delta x}, & F_2^- &= \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\delta x}, \\ F_5^+ &= \frac{\phi_{i+3} - \phi_{i+2}}{\delta x}, & F_1^- &= \frac{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}}{\delta x}, \end{aligned} \tag{3.24}$$

Les approximations décentrées de la dérivée spatiale de ϕ , F^+ et F^- s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} F^{+/-}(u^*, \phi) &= \omega_1 \left(\frac{1}{3} F_1^{+/-} + \frac{7}{6} F_2^{+/-} + \frac{11}{6} F_3^{+/-} \right) + \omega_2 \left(-\frac{1}{6} F_2^{+/-} + \frac{1}{6} F_3^{+/-} + \frac{1}{3} F_4^{+/-} \right) \\ &\quad + \omega_3 \left(\frac{1}{3} F_3^{+/-} + \frac{5}{6} F_4^{+/-} - \frac{1}{6} F_5^{+/-} \right) \end{aligned}$$

les poids ω_1 , ω_2 et ω_3 étant définis en fonction de la régularité de ϕ .

$$\omega_1 = \frac{a_1}{a_1 + a_2 + a_3}, \quad (3.25)$$

$$\omega_2 = \frac{a_2}{a_1 + a_2 + a_3}, \quad (3.26)$$

$$\omega_3 = \frac{a_3}{a_1 + a_2 + a_3}, \quad (3.27)$$

où les coefficients a_1 , a_2 et a_3 s'écrivent :

$$a_1 = \frac{1}{10} \frac{1}{(S_1 + \iota)^2},$$

$$a_2 = \frac{6}{10} \frac{1}{(S_2 + \iota)^2},$$

$$a_3 = \frac{3}{10} \frac{1}{(S_3 + \iota)^2},$$

où ι est un nombre petit devant 1. Les coefficients S_1 , S_2 et S_3 dépendent de $F_i^{+/-}$ $i = 1..6$, ils donnent une indication sur la régularité de ϕ :

$$S_1 = \frac{13}{12} \left(F_1^{+/-} - 2 F_2^{+/-} + F_3^{+/-} \right)^2 + \frac{1}{4} \left(F_1^{+/-} - 4 F_2^{+/-} + 3 F_3^{+/-} \right)^2,$$

$$S_2 = \frac{13}{12} \left(F_2^{+/-} - 2 F_3^{+/-} + F_4^{+/-} \right)^2 + \frac{1}{4} \left(F_2^{+/-} - F_4^{+/-} \right)^2,$$

$$S_3 = \frac{13}{12} \left(F_3^{+/-} - 2 F_4^{+/-} + F_5^{+/-} \right)^2 + \frac{1}{4} \left(3 F_3^{+/-} - 4 F_4^{+/-} + F_5^{+/-} \right)^2.$$

Notons que les poids utilisés dans (3.25- 3.27) dépendant de ϕ , le schéma ainsi construit est non-linéaire. l'écriture du schéma dépend donc de la régularité de ϕ .

3.2.3.2 Validation du code

Afin de tester la méthode, on traite le cas du transport 2D d'un cercle :

$$\partial_t \phi + V \cdot \nabla \phi = 0,$$

avec comme donnée initiale :

$$\phi(x, t = 0) = \frac{1}{2} \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{r - 0.5}{2l} \right) \right), \quad \text{où : } r = \sqrt{x^2 + (y - 0.2)^2},$$

l paramétrise la régularité de la condition initiale. On considère également un domaine $\Omega = [-0.5, 0.5]$ dans lequel on définit un champ de vecteurs vitesse :

$$V = \begin{pmatrix} -y \\ x \end{pmatrix}.$$

Ce champ de vitesse correspond au champ de vitesses d'une rotation solide. Les conditions aux limites utilisées ici sont des conditions périodiques. Le calcul est arrêté pour $t = 2\pi$, et la solution analytique devient alors :

$$\phi(x, t = 2\pi) = \phi(x, t = 0).$$

On teste la méthode pour différentes valeurs de l : 10^{-8} (discontinu pour toutes les résolutions), 10^{-2} , $5 \cdot 10^{-2}$. Le tableau 3.6 résume les tests de convergence effectués.

Résolution	Erreur (L^2)	Ordre	Erreur (L^2)	Ordre	Erreur (L^2)	Ordre
32×32	$6.97e^{-3}$	-	$6.50e^{-3}$	-	$3.87e^{-3}$	-
64×64	$2.63e^{-3}$	1.4	$2.16e^{-3}$	1.6	$7.00e^{-4}$	2.4
128×128	$9.93e^{-4}$	1.4	$7.02e^{-4}$	1.6	$2.25e^{-5}$	4.9

FIGURE 3.6 – Précision de la méthode numérique pour le transport, de gauche à droite : $l = 10^{-8}$ (vu comme discontinu pour toutes les résolutions), $l = 0.01$, $l = 0.05$

Sur ces tests on s'aperçoit que l'ordre de convergence est bien plus élevé pour des solutions dont la condition initiale est plus régulière. D'autre part la méthode gère le transport de discontinuités sans introduire d'oscillations parasites, moyennant un peu de diffusion numérique. Cette diffusion numérique se limite toute seule, car elle tend à régulariser la solution qui est alors transportée de manière plus précise. Notons enfin que pour des conditions initiales suffisamment régulières ($l = 0.05$) ce schéma numérique peut s'avérer très précis (ordre proche de 5).

Chapitre 4

Application : expériences de co-flow

Dans ce chapitre on s'intéresse aux applications du modèle 2D (2.64a- 2.64c) décrit au chapitre 2 pour des expériences de "co-flow". Ces expériences d'écoulements micro-fluidiques ont pour but d'analyser des réactions chimiques, c'est à dire de déterminer des constantes de réaction ainsi que l'apparition d'intermédiaires réactionnels. Le principe est le suivant : deux espèces chimiques A et B sont mises en présence via un injecteur en Y à une vitesse relativement faible (telle que $Re \ll 1$) ; dans ces conditions les fluides A et B se mélangent uniquement via le phénomène d'auto-diffusion décrit dans le Chapitre 1 ; les différentes étapes en temps de la réaction chimique sont alors "dépliées" et l'observation en différents points du canal permet de décrire entièrement cette réaction (voir Fig. 4.1).

Afin de procéder à cette analyse il faut être capable de décrire l'évolution de la largeur et de la position de la zone de mélange dans le canal. Cette zone de mélange étant portée par l'écoulement, il est nécessaire de décrire l'hydrodynamique de façon correcte. Bien que l'écoulement soit laminaire, ce dernier peut toutefois être complexe du fait que les deux espèces que l'on souhaite étudier peuvent avoir des viscosités très différentes. L'introduction du modèle de mélange décrit au Chapitre 1 semble donc nécessaire ici.

Par commodité, les expériences réalisées en laboratoire sont faites sur des canaux ayant une géométrie fine. L'approximation de Hele-Shaw décrite au Chapitre 2 semble alors appropriée pour modéliser l'écoulement dans ce contexte. De plus, les mesures effectuées grâce à des méthodes optiques ne permettent d'avoir accès qu'à une valeur moyennée de la concentration ϕ dans la hauteur du canal. Il semble donc inutile de disposer d'une description plus fine de ϕ que celle donnée par le modèle 2D décrit au chapitre précédent.

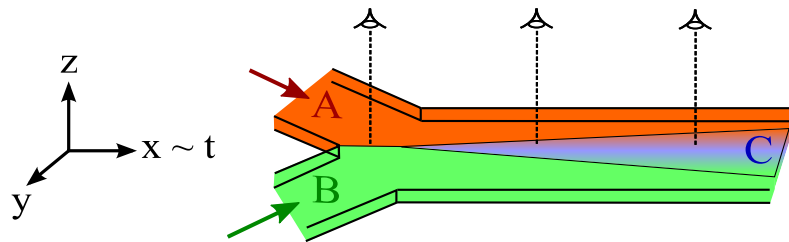


FIGURE 4.1 – Représentation schématique d'une expérience de "co-flow" mettant en scène deux réactifs A et B suivant la réaction totale : $A + B \rightarrow C$.

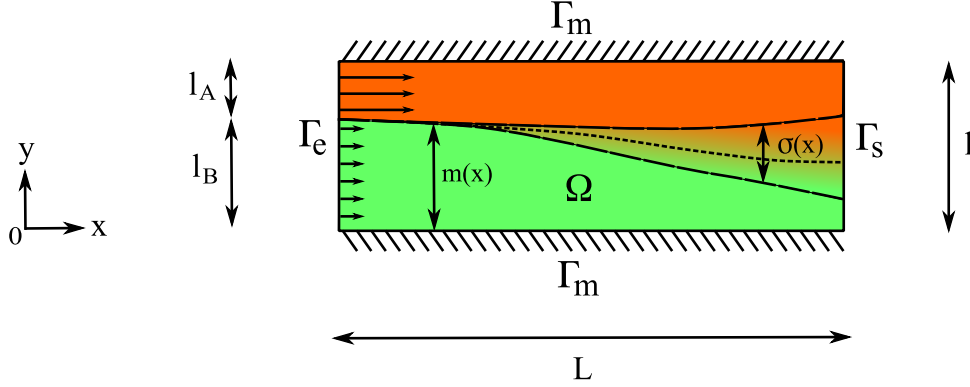


FIGURE 4.2 – Représentation schématique du domaine, notations.

4.1 Description du problème et notations

On se donne la géométrie suivante (voir Fig. 4.2) : un domaine Ω rectangulaire délimité par les bords Γ_e pour l'entrée, Γ_s pour la sortie et Γ_m pour les murs latéraux. La longueur l_A (r.p. l_B) représente la largeur occupée par la fluide A (r.p. B) à l'entrée. On définit également deux quantités $\sigma(x)$ et $m(x)$ qui représentent respectivement la largeur et la position de la zone de mélange entre les deux fluides, ils dépendent du positionnement x dans le canal. Si ϕ représente la concentration de l'espèce B, on pourra extraire les valeurs de $m(x)$ et $\sigma(x)$ en calculant des moments d'ordre 1 et 2 sur ϕ :

$$m(x) = \int_0^l x |\partial_y \phi(x, y)| dy, \quad (4.1)$$

$$\sigma(x) = \int_0^l x^2 |\partial_y \phi(x, y)| dy - m(x)^2. \quad (4.2)$$

Remarquons que les formules (4.1-4.2) permettent de déterminer la position et la largeur de l'interface seulement lorsque l'application $y \rightarrow \phi(x, y)$ représente une fonction de répartition, c'est à dire qu'elle est monotone en y avec $\phi(x, 0) = 0$ et $\phi(x, l) = 1$, autrement dit lorsque le mélange n'atteint pas les murs latéraux du canal. On rappelle le modèle (2.64a-2.64c) écrit dans le cas particulier de conditions d'adhérence en haut et au fond du canal et dans le cas où la hauteur h du canal, ainsi que le coefficient de diffusion $\mathcal{D}$ sont constants :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_{xy} \cdot \left[\frac{1}{\eta(\phi)} \nabla_{xy} P \right] = 0, \end{array} \right. \quad (4.3a)$$

$$\left(\begin{array}{c} u \\ v \end{array} \right) (x, y) = -\frac{h^3}{12\eta(\phi)} \nabla_{xy} P, \quad (4.3b)$$

$$\partial_t \phi + \left(\begin{array}{c} u \\ v \end{array} \right) \cdot \nabla \phi = \mathcal{D} \Delta \phi. \quad (4.3c)$$

Les conditions aux limites à adjoindre à ce modèle sont : à l'entrée Γ_e :

$$\phi|_{\Gamma_e}(y) = 0 \quad \text{si } y > l_B, \quad (4.4)$$

$$\partial_x P|_{\Gamma_e}(y) = -\frac{\eta(0)}{h^3} u_A \quad \text{si } y > l_B, \quad (4.5)$$

$$\phi|_{\Gamma_e}(y) = 1 \quad \text{si } y < l_B, \quad (4.6)$$

$$\partial_x P|_{\Gamma_e}(y) = -\frac{\eta(1)}{h^3} u_B \quad \text{si } y < l_B, \quad (4.7)$$

où u_A représente la vitesse d'injection du fluide A et u_B la vitesse d'injection du fluide B. A la sortie on impose :

$$\partial_x \phi|_{\Gamma_s} = 0, \quad (4.8)$$

$$P|_{\Gamma_s} = 0, \quad (4.9)$$

et enfin, sur les murs latéraux on a :

$$\partial_y \phi|_{\Gamma_m} = 0, \quad (4.10)$$

$$\partial_y P|_{\Gamma_m} = 0. \quad (4.11)$$

4.2 Un cas de validation : le déplacement visqueux

La première série de tests concerne les déplacements de l'interface intervenant aux petites échelles de longueurs $x \sim l$. Lorsque deux fluides de viscosités différentes sont mis en présence l'un de l'autre dans un canal, avec une vitesse d'injection identique, la zone de séparation entre ces deux fluides se déplace du fait du gradient de viscosité. Ce phénomène s'établit généralement à des longueurs suffisamment petites pour négliger le rôle de la diffusion.

On introduit par la suite un paramètre c , sans dimensions, qui représente le contraste de viscosité entre les deux fluides :

$$c = \frac{\eta_B - \eta_A}{2(\eta_B + \eta_A)}. \quad (4.12)$$

On s'attend à ce que plus ce contraste soit élevé, plus le déplacement de l'interface occasionné soit grand. Il est par ailleurs possible de prévoir la position d'équilibre de l'interface par de simples arguments d'équilibre des pressions et d'égalités des débits dans chaque phase du fluide. A l'équilibre des pressions on a :

$$\partial_y P = 0, \quad (4.13)$$

$$\partial_x P = cst. \quad (4.14)$$

On a précisé que la diffusion jouait ici un rôle négligeable, donc chaque phase peut être considérée comme distincte tout au long du processus de déplacement visqueux. Grâce à la loi de Darcy (4.3b) et sachant (4.13), les vitesses dans chaque phase à l'équilibre s'écrivent alors :

$$u_A^* = -\frac{h^3}{12\eta_A} \partial_x P,$$

$$u_B^* = -\frac{h^3}{12\eta_B} \partial_x P.$$

Grâce à (4.14) on a donc d'une part :

$$\eta_A u_A^* = \eta_B u_B^*, \quad (4.15)$$

D'autre part, les deux fluides étant à ce stade encore non-mélangés, les débits dans chaque phase à l'état d'équilibre doivent être les mêmes que les débits d'entrée Q_A et Q_B . On a donc :

$$Q_A = u_A (l - m^*) h, \quad (4.16)$$

$$Q_B = u_B m^* h. \quad (4.17)$$

En divisant ces deux équations et en se servant de la relation (4.15) on obtient :

$$\frac{Q_A}{Q_B} = \frac{\eta_B}{\eta_A} \frac{l - m^*}{m^*}.$$

Après calcul, on obtient la position d'équilibre de l'interface par :

$$m^* = \frac{Q_B \eta_B}{Q_A \eta_A + Q_B \eta_B} l. \quad (4.18)$$

Dans le cas particulier où $Q_A = Q_B$, on a, également après calcul :

$$c = \frac{\eta_B - \eta_A}{2(\eta_B + \eta_A)} = \frac{m^* - l/2}{l}, \quad (4.19)$$

d'où :

$$m^* = l \left(c + \frac{1}{2} \right). \quad (4.20)$$

La relation (4.20) entre le contraste de viscosité et le positionnement de l'interface nous permettra par la suite de donner une validation physique du modèle et des simulations numériques dans ce cas particulier que sont les expériences de co-flow.

Passons à présent aux simulations numériques. On se donne le jeu de données suivant : une largeur de canal $l = 200 \mu m$, une longueur de domaine pour la simulation $L = 250 \mu m$, des viscosités $\eta_A = 0.67 Pa.s$ et η_B compris entre $8.37e^{-2} Pa.s$ et $5.36 Pa.s$, et des vitesses d'injection $u_A = u_B = 1.8e^{-2} m.s^{-1}$. On commence par effectuer une étude de convergence en maillage en effectuant des simulations avec ces paramètres pour les maillages suivants : $N_x \times N_y = [50 \times 40, 100 \times 80, 200 \times 160]$. Notons également que toutes les simulations présentées dans ce chapitre sont effectuées avec le pas de temps suivant :

$$\delta t = 0.9 \frac{1}{\left(\frac{\|u\|_{L^\infty}}{\delta x} + \frac{\|v\|_{L^\infty}}{\delta y} \right)}.$$

La Fig. 4.3, à gauche représente l'évolution en temps de la position de l'interface à la sortie du domaine de calcul ($x = L$), pour ces différentes résolutions de maillage. On voit clairement une convergence en temps de la position de l'interface à la sortie vers une position d'équilibre pour chaque résolution testée. De plus la valeur stationnaire de $m(L)$ semble converger vers une valeur précise à mesure que l'on affine le maillage. La Fig. 4.3, à droite montre un exemple de distribution spatiale de concentration ϕ obtenue par un calcul sur un maillage de 200×160 . On voit sur cette figure le placement progressif de l'interface $m(x)$ vers une position d'équilibre m^* à mesure que l'on avance dans le canal.

Examinons à présent la validité, vis à vis de la relation (4.20), des prédictions sur le déplacement de l'interface obtenues grâce à des simulations numériques. Pour la suite on garde les données décrites précédemment, sauf pour la viscosité du fluide B qui va varier dans les différentes simulations de manière à changer le contraste de viscosité c défini dans (4.13). Grâce aux paramètres décrits ci dessus, on fait varier c entre -0.4 et 0.4 . Prenant en compte la rapide étude de convergence en maillage effectuée précédemment, nous choisissons pour cette étude une résolution de $N_x \times N_y = 200 \times 160$ pour

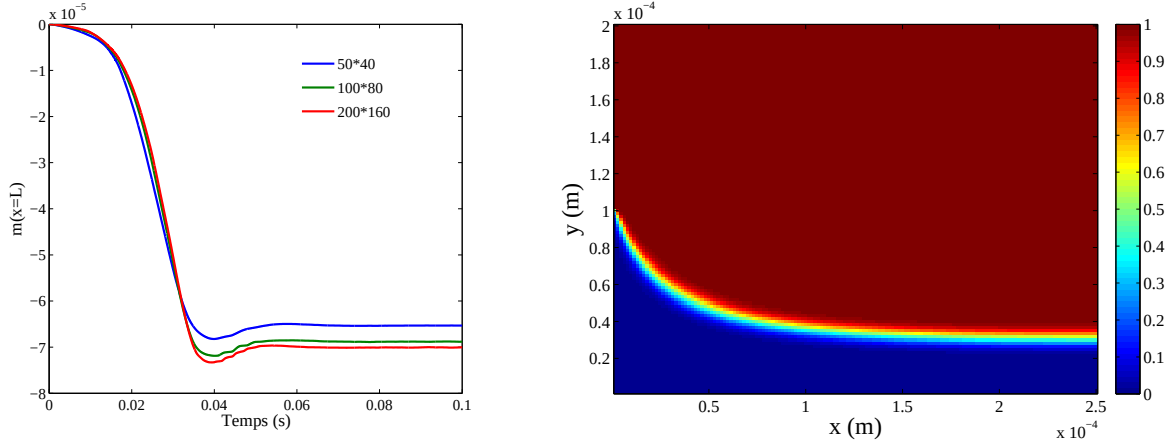


FIGURE 4.3 – Vérification numérique de convergence en maillage pour des simulations de déplacements de l’interface dus à des gradients de viscosité. A gauche, évolution temporelle de la position de l’interface au bout du domaine de calcul ($x = L$) pour différentes résolutions de maillage. A droite, carte de concentration ϕ en espace à l’état stationnaire.

le maillage. La Fig. 4.4 montre la comparaison entre les résultats donnés par la simulation numérique et la prédiction (4.20). Les résultats numériques sont en bon accord avec la théorie, ce qui laisse supposer que le modèle ainsi que la méthode numérique associée sont valides pour décrire l’hydrodynamique des expériences de co-flow.

4.3 Exploitation des simulations numériques

Le reste de ce chapitre est consacré aux simulations numériques conduites dans des conditions réalistes, comparées aux expériences de co-flow conduites par Jean-Baptiste Salmon au L.O.F. Ce travail permet d’une part d’évaluer le coefficient de diffusion $\mathcal{D}$ contenu dans le modèle par comparaison directe avec l’expérience, et d’autre part de caractériser les déplacements de l’interface, non plus sur de courtes distances mais sur des distances mettant en scène un mélange significatif des deux fluides.

4.3.1 Données expérimentales connues

Les caractéristiques des micro-canaux considérés dans cette étude sont les suivantes : une largeur $l = 1 \text{ mm}$, une hauteur $h = 80 \mu\text{m}$. La longueur réelle de ces micro-canaux est de 6 cm . Cependant, on ne peut prendre en compte cette longueur dans son ensemble de façon très précise. On considère, compte tenu des données expérimentales, que les deux fluides se mélangent de façon significative pour les longueurs autour de 2 cm . Nous concentrerons donc les simulations sur une longueur $L = 2 \text{ cm}$ pour le domaine de calcul.

Les deux fluides étudiés ici sont : pour l’espèce A un mélange de 55.5% d’eau et de 44.5% de glycérol, pour l’espèce B, de l’eau. Le fluide A est donc bien plus visqueux que le fluide B. La viscosité de mélange $\eta(\phi)$ n’est pas linéaire, elle est donnée par [38] (voir Fig. 4.5). Le coefficient de diffusion entre ces deux fluides n’est pas connu a priori, on testera plusieurs valeurs pour $\mathcal{D}$ et on choisira celle qui convient le mieux avec les résultats expérimentaux.

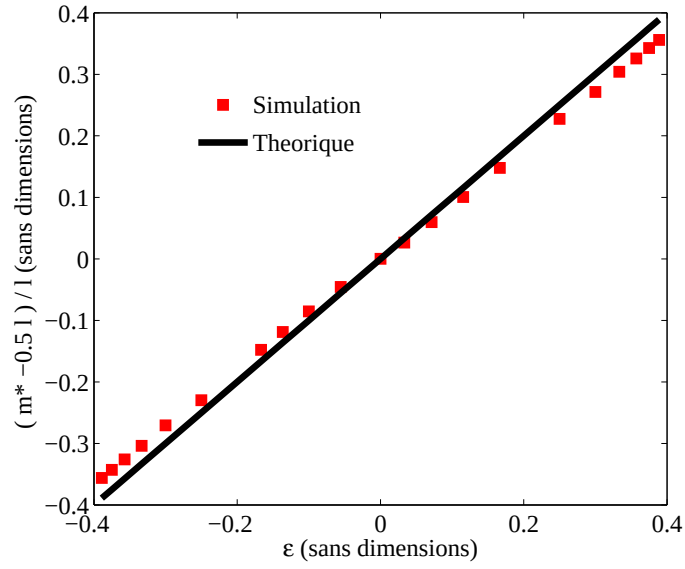


FIGURE 4.4 – Comparaison entre les résultats numériques (en rouge) et théoriques (en noir) du positionnement de l'interface à l'équilibre m^* en fonction du contraste de viscosité prescrit.

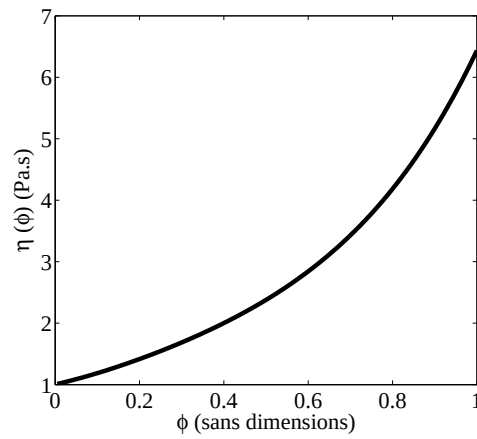


FIGURE 4.5 – Courbe du profil de viscosités $\eta(\phi)$, données tirées de [38].

4.3.2 Positionnement de l'interface, conditions d'entrée

Dans les expériences menées au L.O.F., les observations sont faites en plaçant l'interface à diverses positions dans le canal. Contrairement à ce que l'on a vu précédemment, on ne contrôle plus l'interface en jouant sur la gradient de viscosité, mais sur les débits d'entrée Q_A et Q_B . On se donne les débits d'entrée suivants :

$$Q_A = [250, 100, 50, 50] \mu L/h, \quad (4.21)$$

$$Q_B = [150, 350, 300, 450] \mu L/h. \quad (4.22)$$

Les positions d'équilibres correspondantes pour l'interface calculées avec (4.20) sont alors :

$$m^* = [1.48, 3.64, 5, 6] 10^{-4} m. \quad (4.23)$$

Les vitesses dans chaque phase à l'équilibre calculés avec (4.16 - 4.17) sont donc :

$$u_A = [5.14, 3.333, 2.083, 2.6] 10^{-3} m/s, \quad (4.24)$$

$$u_B = [8.88, 5.494, 3.4722, 4.333] 10^{-4} m/s. \quad (4.25)$$

Ces conditions "à l'équilibre" prédisant un positionnement de l'interface et des vitesses pour chacune des phases serviront de condition d'entrée pour les simulations numériques qui vont suivre. La raison pour laquelle on effectue des tests en plaçant l'interface à diverses positions est que l'on cherche à montrer que les phénomènes observés par la suite sont indépendants de la distance de l'interface aux murs latéraux du canal, à proximité duquel le modèle de Reynolds ne décrit plus précisément l'hydrodynamique.

4.3.3 Estimation du coefficient de diffusion

Avant de décrire les phénomènes de déplacement d'interface à l'échelle longue, on va estimer la valeur du coefficient de diffusion qui conviendra pour la suite en comparant des simulations numériques pour plusieurs valeurs de $\mathcal{D}$ avec les données expérimentales.

On reprend les paramètres décrits aux Sections 4.3.1 et 4.3.2 en fixant les débits d'entrée à : $Q_A = 50 \mu L/h$ et $Q_B = 300 \mu L/h$, ce qui correspond au positionnement de l'interface au milieu du canal. Les différents coefficients de diffusion testés sont :

$$\mathcal{D} = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9] 10^{-10} m^2/s. \quad (4.26)$$

La Fig. 4.6 donne la carte de concentration $\phi(x, y)$ dans le canal à l'état stationnaire pour ces différentes valeurs de $\mathcal{D}$. On voit bien qu'à mesure que le coefficient de diffusion grandit, la largeur de la zone de diffusion grandit également. La Fig. 4.8 montre l'évolution du carré de la largeur de la zone d'inter-diffusion σ^2 dans le canal pour une simulation numérique avec un coefficient de diffusion $\mathcal{D} = 5.10^{-10} m^2/s$, ainsi que celle mesurée dans les expériences. On voit que l'évolution de σ^2 dans le canal est linéaire. Le résultat donné pour les simulations avec $\mathcal{D} = 5.10^{-10} m^2/s$ correspond assez bien aux résultats donnés par les expériences (voir également la Fig. 4.7). C'est donc cette valeur du coefficient de diffusion que l'on choisira pour la suite de notre étude.

4.3.4 Un déplacement de la zone de mélange à l'échelle longue

Une fois que l'on a bien établi le coefficient de diffusion à utiliser pour les simulations, on s'intéresse aux déplacements de la zone de diffusion dans le canal. En effet, sur la Fig. 4.6 on s'aperçoit déjà que la zone de diffusion n'évolue pas de manière symétrique dans le canal. Bien que le déplacement de

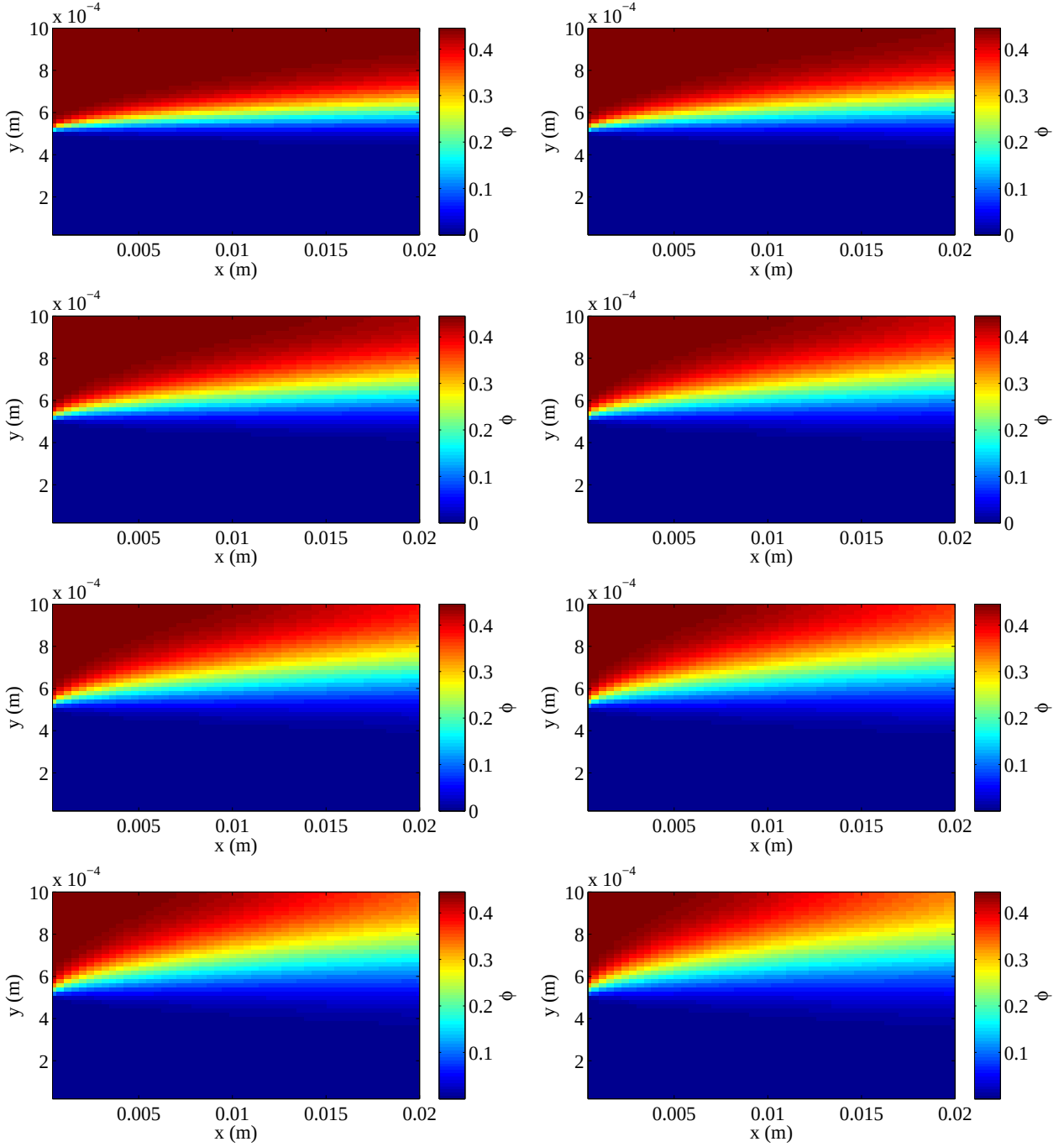


FIGURE 4.6 – Distribution spatiale de ϕ dans le cas où $Q_A = 50 \mu L/h$ et $Q_B = 300 \mu L/h$ (placement de l'interface au milieu du canal), pour différentes valeurs de $\mathcal{D}$. De gauche à droite, puis de haut en bas : $\mathcal{D} = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9] 10^{-10} m^2/s$. On s'aperçoit qu'à mesure que le coefficient d'interdiffusion grandit, le cône de diffusion grandit également. Par ailleurs le déplacement de l'interface à l'échelle longue mentionnée dans ce chapitre est de plus en plus important à mesure que l'on augmente $\mathcal{D}$.

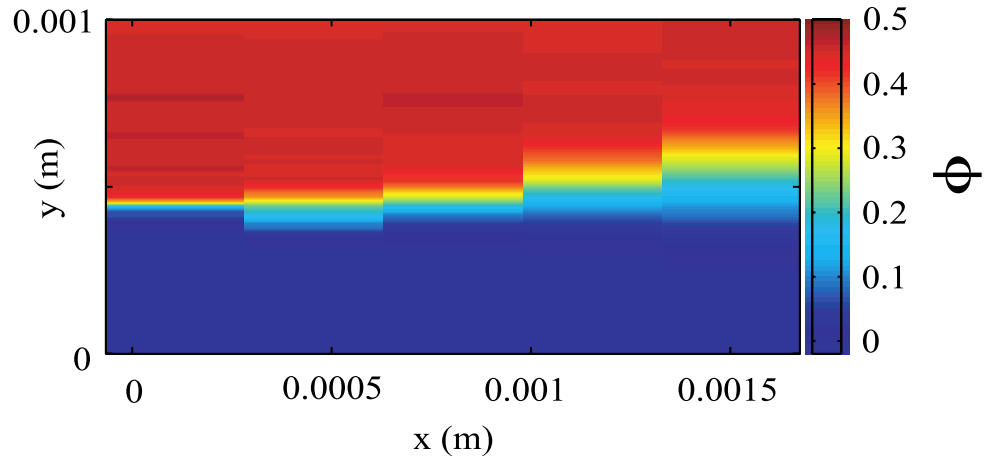


FIGURE 4.7 – Distribution spatiale de ϕ issue des expériences menées au L.O.F. par Jean-Baptiste Salmon (figure extraite de [19]).

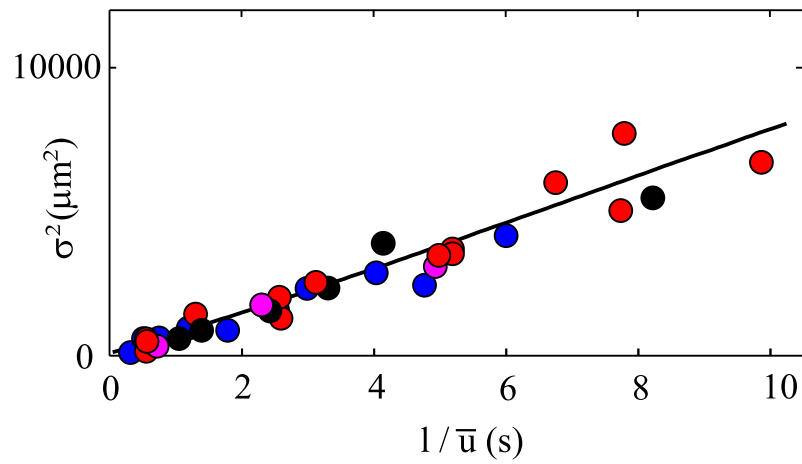


FIGURE 4.8 – Comparaison entre l'évolution de σ^2 dans le canal issue des simulations numériques (trait plein, en noir) et des expériences (points). Abscisse re-normalisée pour rendre la comparaison indépendante de la vitesse moyenne $\bar{u}(x)$.

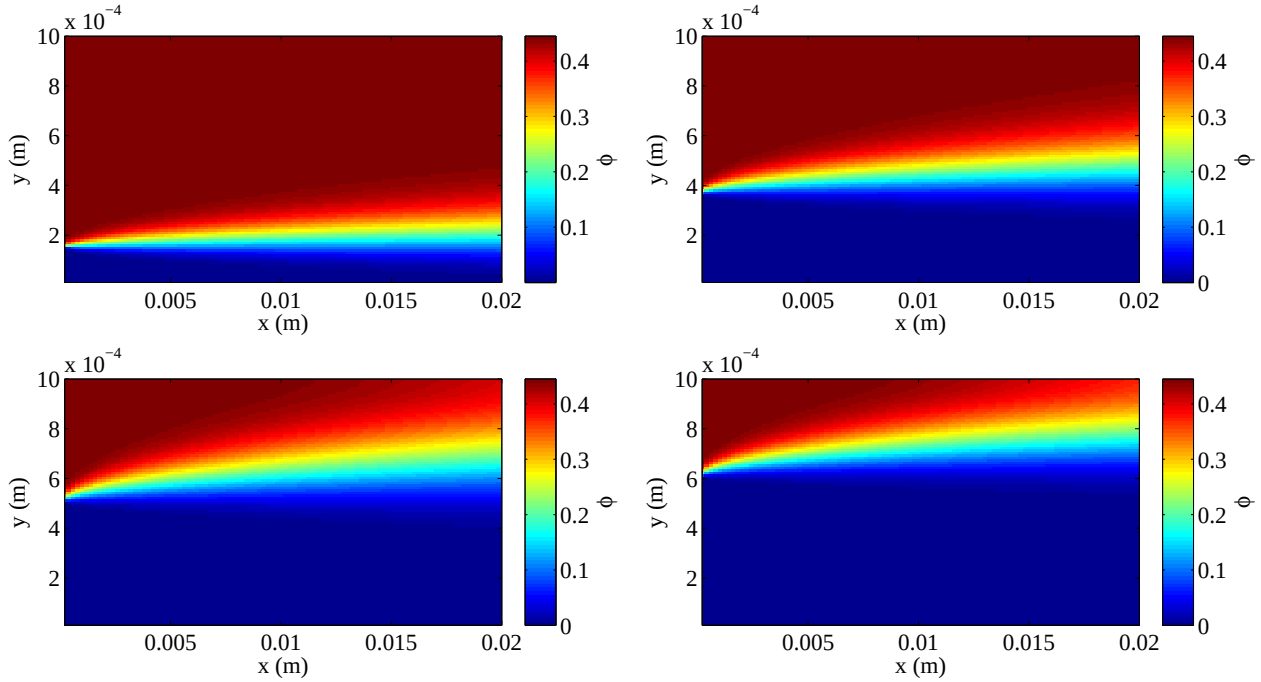


FIGURE 4.9 – Distribution spatiale de ϕ pour les simulations numériques dans les conditions identiques à celles des expériences menées au L.O.F. Comme dans les expériences, on effectue différents placements de l'interface à l'entrée $m^* = [1.48, 3.64, 5, 6] 10^{-4} m$ en modulant les débits d'entrée (4.21 - 4.22), et en nous servant de la formule (4.17) pour trouver la position d'équilibre m^* correspondante.

l'interface lié au gradient de viscosité à l'entrée du domaine de calcul doit être nul du fait que l'on a choisi des conditions d'entrée "à l'équilibre", ce raisonnement ne tient plus lorsque l'effet de la diffusion devient non négligeable. Cette dernière "étaie" les valeurs de ϕ dans le canal et, donc modifie le profil transverse de viscosité. S'en suit alors le déplacement de la zone de mélange du fluide le moins visqueux (eau) vers le fluide le plus visqueux (glycérol).

Ce phénomène s'est montré suffisamment important pour avoir été observé dans les expériences menées au L.O.F. Les simulations numériques sont venues étayer les résultats expérimentaux. Pour ces simulations, on se place dans les conditions des expériences décrites précédemment, l'interface à l'équilibre est placée en différents endroits du canal en modulant les débits d'entrée. Les données à l'équilibre (4.23) et (4.24-4.25) serviront de conditions d'entrée pour les simulations. La résolution du maillage est ici de $N_x \times N_y = 200 \times 100$. La Fig. 4.9 montre la répartition de la concentration ϕ dans le canal pour différents placements de l'interface à l'équilibre. On constate que le déplacement de la zone de mélange va toujours dans le même sens, du moins visqueux au plus visqueux, quelque soit la condition d'entrée. La Fig. 4.10 montre la comparaison entre l'évolution dans le canal de la position de la zone d'inter-diffusion m , issu des simulations, avec la position de cette même zone de mélange issue des expériences. On constate ici que la corrélation entre la simulation et l'expérience est plutôt bonne.

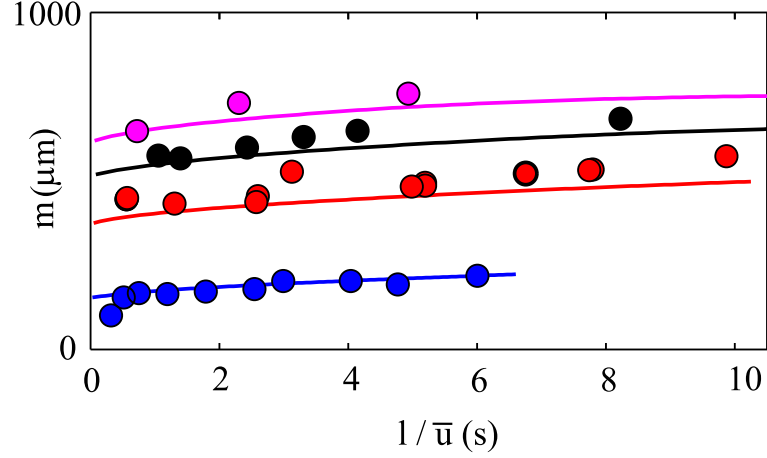


FIGURE 4.10 – Comparaison entre l'évolution du milieu de l'interface m dans le canal issue des simulations numériques (traits pleins) et des expériences (points), pour les différents débits d'entrée (4.21 - 4.22). Abscisse re-normalisée pour rendre la comparaison indépendante de la vitesse moyenne $\bar{u}(x)$.

4.4 Conclusion et perspectives

Dans ce Chapitre nous avons décrit une application du modèle de Reynolds 2D à un cas où les résultats des simulations numériques se sont révélées proches de la réalité. Les prédictions que l'on a pu faire sur les expériences ont révélé que ce modèle permet une description suffisamment précise dans l'état actuel des moyens de comparaison dont on dispose (limite des instruments de mesure). Tout d'abord nous avons pu, grâce à une série de simulations, estimer un coefficient d'inter-diffusion entre l'eau et le glycérol de manière satisfaisante, ensuite, un phénomène nouveau, observé expérimentalement a été confirmé par les simulations numériques. Ce travail a fait l'objet d'une publication dans *New Journal of Physics* [19].

Pour la suite il serait intéressant d'inclure dans le système un modèle de réaction-diffusion décrivant l'évolution d'une réaction chimique, et de refaire la même étude. Si les résultats permettaient une bonne estimation des constantes de réaction, on pourrait disposer d'un outil puissant d'analyse de réactions chimiques en écrivant un problème inverse à partir du modèle "Reynolds + Chimie". En entrant comme donnée de départ la donnée expérimentale (cartes de concentration des réactifs et des produits de la réaction), le problème inverse nous permettrait d'estimer les différentes constantes du modèle.

Chapitre 5

Autres applications, limitations du modèle

Dans cette section nous traitons d'une des applications que nous avons envisagé pour les modèle de Reynolds 2.5D (2.56a-2.56d) et 2D (2.64a-2.64c) : l'accélération de mélange en micro-fluidique. En effet, comme on l'a vu au chapitre 2, il est possible de prendre en compte des conditions aux limites complexes en haut et au fond du canal. Ces dernières apparaissent comme des coefficients dans les modèles ainsi construits. On s'intéresse à deux approches "passives" (sans ajout d'énergie au système autre que l'écoulement lui-même) pour l'accélération de mélange : la modification du relief et la modification de la nature chimique des surfaces.

5.1 Ajouts de reliefs

De nombreux travaux récents s'appuient sur une modification de la géométrie des canaux pour accélérer le mélange de deux fluides en micro-fluidique. L'un des exemples les plus édifiants de l'efficacité de cette approche est donnée dans [55] où sont montrées des expériences sur des micro-mixers passifs de type "herring-bone". Ces reliefs consistent en un placement judicieux d'arêtes permettant de créer des tourbillons dans la direction transverse du canal (voir Fig 5.1).

L'objectif ici est de déterminer si le modèle 2.5D (2.56a-2.56d) adapté à un canal à reliefs permet de décrire correctement un écoulement dans ce type de micro-canaux, et de reproduire les re-circulations observées, qui sont nécessaires à l'accélération du mélange. Pour cela on compare des simulations numériques issues du modèle de Reynolds avec des simulations directes sur le modèle de Stokes incompressible (2.1a-2.1c) dont il dérive. La méthode numérique utilisée pour traiter le problème de Stokes sera décrite dans la deuxième partie de ce document, au chapitre 3.

La géométrie du domaine est la suivante : $L = 2.5 \text{ mm}$, $l = 500 \mu\text{m}$. La hauteur varie suivant (x, y)

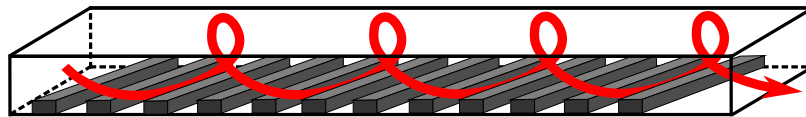


FIGURE 5.1 – Schéma de principe d'un mélangeur micro-fluidique passif. En rouge : trajectoire d'une particule lâchée à l'entrée du canal.

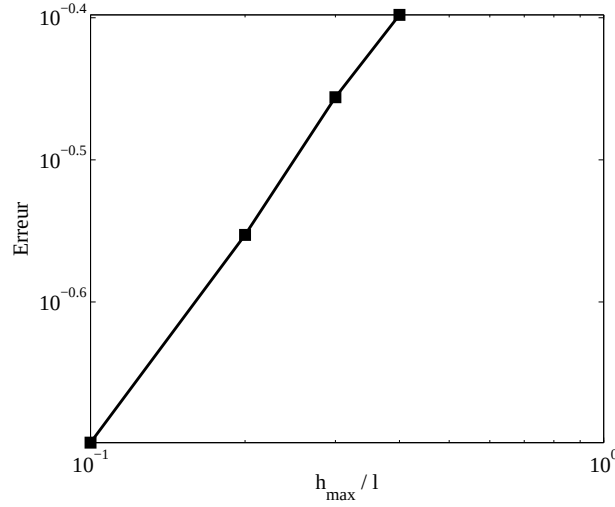


FIGURE 5.2 – Erreur sur les vitesses entre les résultats donnés par les simulations numériques effectuées sur le modèle de Reynolds (2.56a - 2.56d) et sur le modèle de Stokes (2.1a - 2.1c) dont il dérive, en fonction de la hauteur du canal re-normalisée sur la largeur.

et on choisira plusieurs hauteurs maximales pour le canal :

$$h(x, y) = h_{\max}(1 - \delta h(1 + \cos(6\pi(x + 2y)))) , \quad (5.1)$$

où $h_{\max}$ représente la hauteur maximale du canal, et δh (sans dimensions) l'amplitude souhaitée des reliefs. Les valeurs de $h_{\max}$ varieront entre $50 \mu m$ et $200 \mu m$ et on prendra pour toute la suite $\delta h = 0.2$. Toutes les simulations présentées ici sont faites avec la résolution : $N_x \times N_y \times N_z = 400 \times 100 \times 50$. On choisit la viscosité du fluide constante, car c'est l'influence des conditions en haut et au fond du canal sur l'écoulement qui nous intéresse ici, plutôt que les effets de gradients de viscosité. On prend donc $\eta = 1 Pa.s$. Pour les mêmes raisons, la vitesse d'injection n'a aucune importance ici.

On voit sur la Fig. 5.2 que plus le domaine est fin, plus l'erreur entre le modèle de Reynolds et le modèle de Stokes est faible. De plus on a la confirmation que cette erreur est en $o\left(\frac{h}{l}\right)$. C'est un résultat attendu car on a bien construit le modèle de Reynolds sur une hypothèse de domaine fin. La Fig. 5.3 montre les différences entre les résultats donnés par le modèle de Reynolds et le modèle de Stokes sur des lignes de courant partant de l'entrée et à proximité du fond du canal. Sur cette figure on constate que le modèle de Stokes semble laisser les reliefs du canal guider l'écoulement vers les murs latéraux, après quoi, le confinement de l'écoulement amène une re-circulation permettant ainsi de "replier" les lignes de courant. Le modèle de Reynolds semble lui incapable de reproduire ce phénomène. C'est pourtant de dernier mécanisme de confinement qui est la clé de l'approche "reliefs" pour l'accélération de mélange. Il n'est donc pas envisageable d'utiliser le modèle de Reynolds dans le but d'étudier des écoulements dans des mélangeurs micro-fluidiques à reliefs.

5.2 Surfaces de glissement

Dans cette section on s'intéresse à une autre approche pour modifier les écoulements de fluides dans des micro-canaux. Cette approche fait intervenir des surfaces de glissement en haut et au fond du canal. En pratique, ces surfaces de glissement sont obtenues en appliquant un traitement chimique

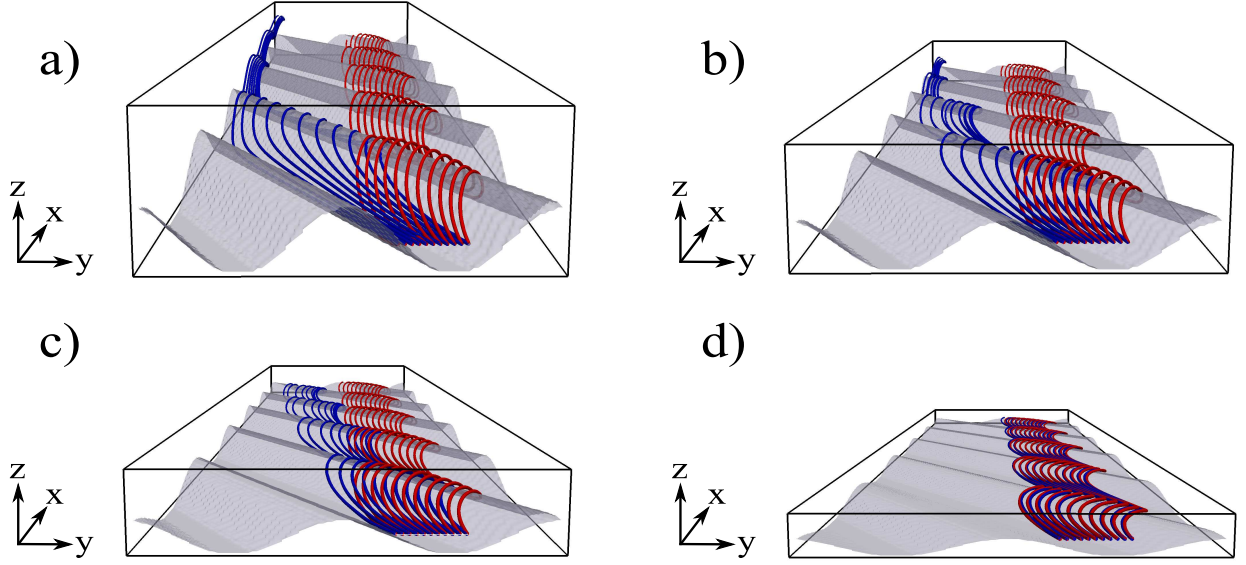


FIGURE 5.3 – Simulations numériques d'écoulements dans des canaux possédants les reliefs décrits dans l'équation (5.1). a) : $h_{\max} = 200 \mu m$, b) : $h_{\max} = 150 \mu m$, c) : $h_{\max} = 100 \mu m$, d) : $h_{\max} = 50 \mu m$. En bleu : lignes de courant calculées à partir de simulations numériques sur le modèle de Stokes incompressible (2.1a- 2.1c); en rouge : lignes de courant issues de simulations sur le modèle de Reynolds 2.5D (2.56a- 2.56d).

sur les parois du canal. Dans un premier temps on considérera que les traitements du haut et du fond du canal sont identiques. C'est donc le modèle de Reynold 2D adapté à des surfaces glissantes qui va nous intéresser ici. Rappelons la condition de Navier pour des surfaces glissantes :

$$\partial_{\vec{n}} V_{\tau} = \frac{1}{L_g} V_{\tau}, \quad (5.2)$$

où L_g représente une longueur de glissement. Par la suite on dimensionnera cette longueur de glissement sur la hauteur du canal. On considère deux fluides A et B dont les fractions volumiques sont données par ϕ et $1 - \phi$. Deux types de surfaces sont envisagées :

- La surface "A-phile", adhérente pour A et glissante pour B :

$$L_g^A(\phi) = \delta h h (1 - \phi), \quad (5.3)$$

- La surface "B-phile", adhérente pour B et glissante pour A :

$$L_g^B(\phi) = \delta h h \phi, \quad (5.4)$$

En plaçant ces surfaces judicieusement dans le canal, on peut modifier l'écoulement de manière significative. On considère donc tout d'abord un cas où deux fluides miscibles à viscosités identiques sont injectés dans un canal de longueur $L = 2.5 mm$, de largeur $l = 500 \mu m$ et de hauteur $h = 200 \mu m$. Sont également placées suivant la disposition décrite sur la Fig. 5.4 des dalles de glissement en haut et au fond du canal ($L_h(x, y) = L_b(x, y)$). Les simulations numériques présentées ici sont effectuées avec une résolution de $N_x \times N_y = 200 \times 100$. On teste plusieurs longueurs de glissements : $\delta h = [0, 0.04, 0.08, 0.12]$. La Fig. 5.5 montre des cartes spatiales de concentration de fluide A issues

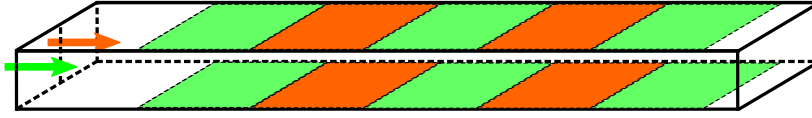
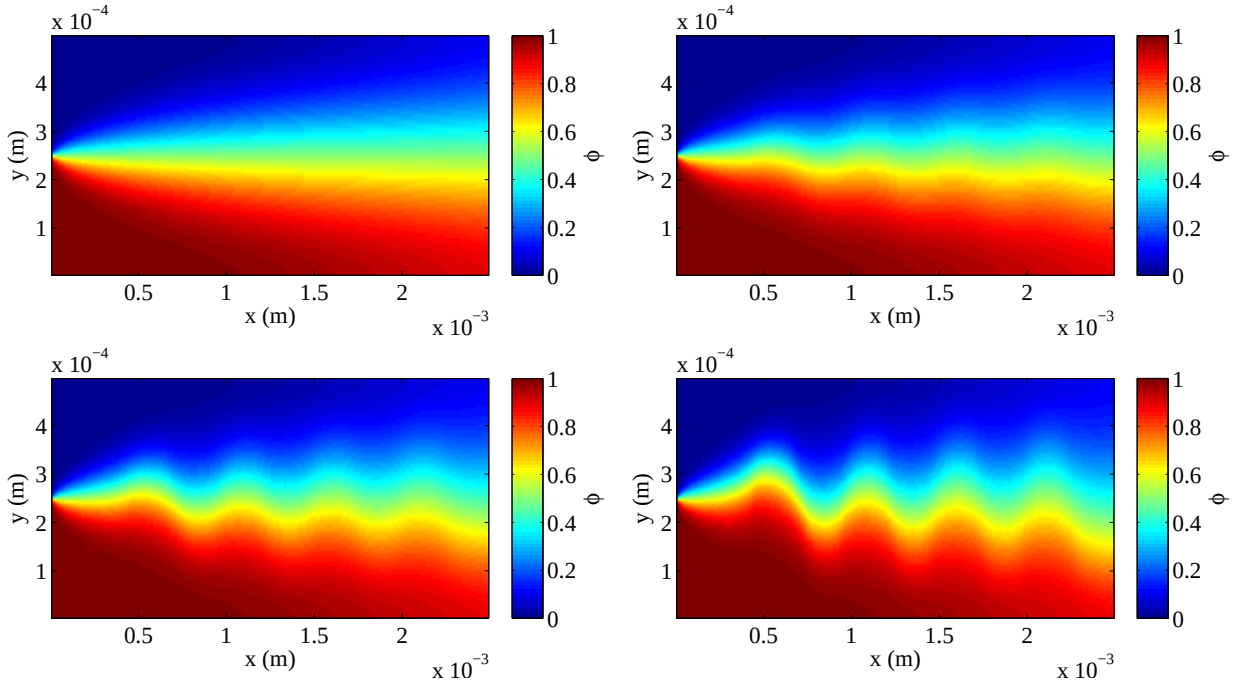


FIGURE 5.4 – Schéma de principe d'un micro-canal comportant des motifs de glissement.

FIGURE 5.5 – Cartes de la concentration $\phi(x, y)$ dans le canal pour un écoulement présentant des surfaces de glissements comme décrit sur la Fig. 5.4. Longueurs de glissement relatives : $\delta h = [0, 0.04, 0.08, 0.12]$.

de simulations numériques sur le modèle 2D (2.56a- 2.56d) pour la géométrie et les motifs de glissement en haut et au fond du canal décrites ci-dessus. On s'aperçoit que pour un tel placement des plaques de glissement, il est possible de faire se déplacer la zone de diffusion dans le canal. De cette manière on peut allonger la zone de diffusion et ainsi augmenter légèrement le mélange.

D'autres approches faisant intervenir des motifs de glissement différents en haut et au fond on été proposés dans [36] et [37]. Ces études ont montré qu'il était possible de produire des re-circulations en plaçant une surface "A-phile" en haut et une surface "B-phile" au fond du canal. Le modèle de Reynolds développé ici est toutefois incapable de reproduire un tel phénomène, car il ne peut en fait prendre en compte que la somme des longueurs de glissement en haut et au fond du canal, cette somme étant alors constante ($L_h(x, y) + L_b(x, y) = L_g^B(\phi) + L_g^B(\phi) = 2\delta h h = cst$). Nous ne sommes pas en mesure pour l'instant de déterminer la validité du modèle dans ce cas de figure, les longueurs de glissement envisagées ici étant bien supérieures à celles disponibles dans les expériences. Des comparaisons pourraient être faites à l'avenir avec des simulations sur le modèle de Stokes pour un mélange avec des conditions de glissement en haut et au fond du canal.

Le but était ici de percevoir les limites des modèles de Reynolds écrits dans les cas particuliers de canaux à reliefs et de canaux à motifs de glissement. Ces modèles se sont révélés inefficaces pour

les applications d'accélération de mélange nécessitant une modification importante de l'écoulement (re-circulations, etc...).

Deuxième partie

Hydrodynamique des systèmes de micelles géantes, effets de surface

Cette partie du document est consacrée à l'étude des écoulements de micelles géantes en micro-fluidiques. Le chapitre 6 détaille l'expression d'un modèle existant pour décrire de tels écoulements, ainsi que les modifications qu'il est nécessaire d'y apporter afin de pouvoir l'utiliser dans un contexte général (écoulement 3D, cisaillement, élongation). Un ensemble de méthodes numériques sont alors présentées au chapitre 7 afin d'effectuer des prédictions sur ces modèles. Un premier chapitre d'application (chapitre 8) portant sur un modèle réduit nous permettra d'appréhender le comportement des solutions de micelles géantes sous cisaillement, ainsi que le phénomène de formation de bandes de cisaillement dans le fluide. Enfin, le chapitre 9 nous permettra d'étudier le modèle décrit au chapitre 6, dans un véritable contexte d'écoulement 3D, à savoir un écoulement dans une jonction micro-fluidique.

Chapitre 6

Un modèle pour les écoulements de micelles géantes

Ce chapitre est consacré à la présentation d'un modèle rhéologique servant à la description des écoulements micro-fluidiques de micelles géantes en solution. Ces fluides ont des propriétés non-Newtoniennes très particulières, et tendent, à la manière des fluides à seuil, à former des bandes de cisaillement. Le modèle présenté ici dérive du modèle de Johnson-Segalman [31], qui consiste en un modèle de Jeffrey convecté écrit avec une dérivée de Gordon-Schowalter pour décrire l'entraînement élastique du matériau. La particularité de ce modèle réside dans le fait qu'il est l'un des seuls modèles linéaires et tensoriels capable de décrire la formation de bandes de cisaillement. A ce modèle sont ajoutés plusieurs éléments. Tout d'abord on considère l'ajout d'un terme de diffusion permettant, comme on le verra au chapitre 8, d'assurer une transition indépendante de l'état initial entre les différentes bandes de cisaillement en présence dans l'écoulement. Puis, on considère l'ajout d'une non-linéarité quadratique dans la loi de comportement, assurant, quand à elle, un comportement correct du modèle dans le cas d'écoulements possédant une forte composante d'élongation. Enfin divers modèles réduits sont écrits à partir d'hypothèses fortes sur l'écoulement (canaux droits). Ces modèles réduits nous permettront par la suite d'une part de mieux comprendre le comportement du modèle de Johnson-Segalman (chapitre 8), et d'autre part de bénéficier d'une méthode de détermination de conditions d'entrée pour des écoulements micro-fluidiques.

6.1 Micelles géantes

Les micelles géantes sont des agrégats de molécules possédants deux pôles : un pôle hydrophile et un pôle hydrophobe. Sous certaines conditions (concentration et températures), ces agrégats peuvent prendre la forme de longs cylindres baignant dans un solvant. De la même manière que des polymères, ces cylindres peuvent former un réseau d'enchevêtrements possédant une élasticité propre. Cependant, si ces enchevêtrements sont soumis à une contrainte suffisamment importante, les cylindres qui le forment peuvent se briser et se re-combiner dans une configuration alignée dans l'écoulement. Cette capacité de cassure et de re-combinaison a donné aux micelles géantes le surnom de "polymères vivants". De cette manière, les solutions de micelles géantes peuvent co-exister en plusieurs phases dont les propriétés mécaniques (viscosité, élasticité) sont radicalement différentes.

Ce phénomène conduit à la formation de bandes de cisaillement dans l'écoulement. Par exemple, dans le cas particulier d'un écoulement dans un micro-canal, les expériences montrent très clairement l'existence de zones plus fluides au voisinage des parois du canal (voir Fig. 6.2).

Du point de vue de la modélisation, il est absolument nécessaire d'être capable de reproduire ce com-

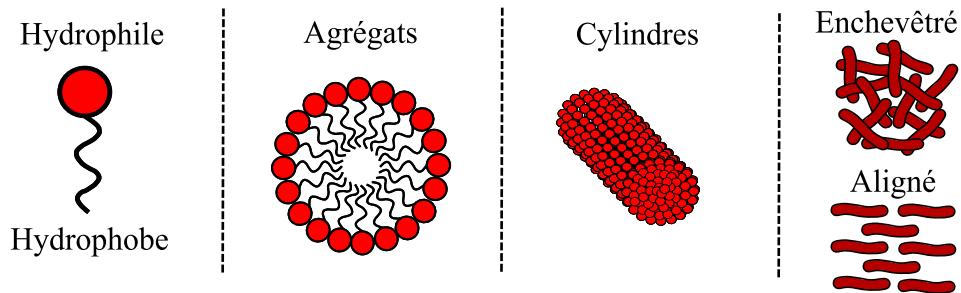


FIGURE 6.1 – Vue schématique des différentes échelles apparaissant dans la formation de micelles géantes, de l'échelle moléculaire à l'échelle du nano-mètre, où s'expriment les comportements collectifs qui vont conditionner l'écoulement à l'échelle macroscopique.

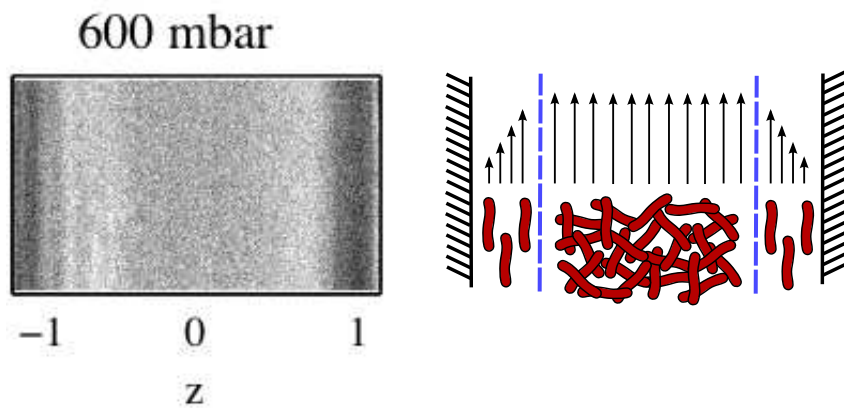


FIGURE 6.2 – À gauche : localisation du cisaillement dans une expérience d'écoulement de micelles géantes dans un micro-canal (figure extraite de la thèse de Chloé Masselon [41]). Les zones les plus sombres mettent en évidence des bandes de cisaillement plus élevées à proximité des parois du canal. À droite : vue schématique des états alignés et enchevêtrés ainsi que des profils de vitesses typiques de ces écoulements.

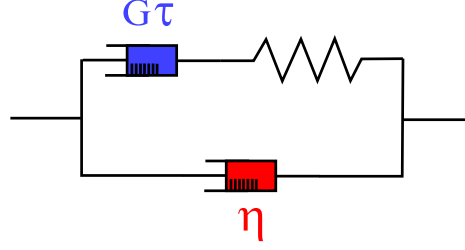


FIGURE 6.3 – Modèle rhéologique de Jeffrey.

portement de localisation de l'écoulement. On verra par la suite que le modèle introduit par Johnson et Segalman [31] convient par certains aspects à l'étude de fluides capables de former des bandes de cisaillement.

Récemment, des expériences menées sur des écoulements micro-fluidiques ont pu mettre en évidence des phénomènes propres aux micelles géantes qui jusque-là n'avaient jamais été observés. Dans les expériences d'écoulements de fluides non-Newtoniens dans des canaux droits (cisaillement pur) il est possible de mesurer à la fois le cisaillement $\dot{\gamma}$ (s^{-1}) et la contrainte locale de cisaillement σ (Pa) subie par le fluide. La plupart du temps, quelque soit le débit d'injection, la relation $\sigma(\dot{\gamma})$ mesurée est unique, on parle alors de courbe d'écoulement ou bien de rhéogramme. Dans les expériences récentes menées par Chloé Masselon et Annie Colin [41], cette correspondance n'est plus unique du fait d'effets non-locaux sur la contrainte. Il faudra également tenir compte de ce fait lors de l'écriture du modèle et introduire un terme prenant en compte ces effets non locaux.

6.2 La loi de comportement

Le but est ici de décrire la contrainte interne σ du fluide en fonction des variables cinématiques dont on dispose (vitesse V , gradient de vitesse ∇V). Du fait que le fluide que l'on étudie ici possède des propriétés élastiques, une partie de la contrainte sera donnée par une équation d'évolution appelée "loi de comportement". On suppose ici que la contrainte interne du fluide est la somme d'une contribution visqueuse (dépendant donc linéairement du taux de déformation) et d'une contribution visco-élastique donnée par une loi de comportement :

$$\sigma = 2\eta D[V] + \sigma_p, \quad (6.1)$$

où η représente une viscosité. L'équation sur σ_p donnera donc le comportement visco-élastique du fluide. Afin de bien comprendre les différents constituants des modèles de fluides non-Newtoniens, l'analogie la plus courante consiste à se ramener à des systèmes mécaniques du type "piston-ressort", un piston représentant une contrainte visqueuse et un ressort représentant une contrainte élastique. L'assemblage mécanique correspondant à la contrainte décrite dans l'équation (6.1) s'appelle la cellule de Jeffrey. Elle est constituée de l'assemblage en parallèle d'un piston et d'un assemblage en série piston-ressort (voir fig 6.3).

L'ajout d'une viscosité en parallèle ne semble pas au premier abord être un élément pertinent, cependant, on verra dans la section 6.2.2 que la loi de comportement introduite dans la section 6.2.1 exige l'ajout d'une viscosité η "en parallèle" afin que le modèle garde un comportement réaliste.

6.2.1 Le modèle de Johnson-Segalman

Le modèle de Johnson-Segalman fait partie des lois de comportements dites "linéaires", c'est à dire que l'équation qui en résulte est linéaire si l'on fixe la vitesse et ses dérivées ∇V . Ces modèles linéaires s'appuient, pour la description de l'élasticité, sur la loi de Hooke (contrainte proportionnelle à la déformation). Par conséquent ils ne sont valides que dans des régimes où la déformation élastique, c'est à dire la déformation des objets responsables de l'élasticité (ici les micelles) est suffisamment faible. Ce type de description convient bien à la description de systèmes très dilués pour tous les régimes d'écoulement, ou bien à des systèmes concentrés pour de petits taux de déformation.

Afin de décrire l'entraînement élastique, le modèle de Johnson-Segalman fait intervenir une dérivée objective, c'est à dire une dérivée en temps invariante par changement du référentiel auquel est attaché le tenseur σ_p , appelée dérivée de Gordon-Showalter :

$$\overset{\circ}{\sigma}_p = \partial_t \sigma_p - (\Omega \sigma_p - \sigma_p \Omega) - a(D \sigma_p + \sigma_p D), \quad (6.2)$$

avec :

$$\Omega = \frac{\nabla V - \nabla V^t}{2}, \quad D = \frac{\nabla V + \nabla V^t}{2},$$

où a est un paramètre du modèle à déterminer par comparaison avec des mesures expérimentales. Il est remarquable que cette dérivée n'est pas la seule qui soit objective, il en existe en fait un très grand nombre. Chacune des différentes dérivées objectives que l'on peut écrire correspond à une hypothèse rhéologique différente. La dérivée de Gordon-Schowalter contient en particulier les dérivées dites "sur-convectée" ($a = 1$), "sous-convectée" ($a = -1$) et "co-rotationnelle" ($a = 0$).

L'équation constitutive permettant de décrire l'évolution de l'extra-contrainte visco-élastique σ_p s'écrit alors :

$$\overset{\circ}{\sigma}_p + V \cdot \nabla \sigma_p + \frac{1}{\tau} \sigma_p = 2 G D, \quad (6.3)$$

où τ (s) représente un temps caractéristique de relaxation du fluide et G (Pa) un module élastique. On constate comme on l'a mentionné précédemment que pour V fixé (donc pour $D, \Omega, \nabla V$ fixés) cette équation est linéaire en σ_p . Afin de comprendre le comportement de l'équation (6.3), on va étudier deux cas d'écoulements classiques : le cisaillement plan et l'élongation.

6.2.2 Comportement en cisaillement

Dans cette section on fixe un taux de déformation correspondant à un cisaillement homogène (voir Fig. 6.4) :

$$\nabla V = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.4)$$

où $\dot{\gamma}$ (s^{-1}) représente un taux de cisaillement. Une fois ce taux de cisaillement fixé on cherche l'état stationnaire correspondant pour σ_p via l'équation (6.3). On obtient à l'état stationnaire (calcul en Annexe B) la contrainte de cisaillement suivante :

$$\sigma_p^{xy}(\dot{\gamma}) = 2 G \tau \frac{\dot{\gamma}}{1 + 4 \tau^2 (1 - a^2) \dot{\gamma}^2}. \quad (6.5)$$

Si $a < 1$, on constate que pour des taux de cisaillements tels que : $\dot{\gamma} > \frac{1}{2 \tau \sqrt{1 - a^2}}$, la contrainte $\sigma_p^{xy}(\dot{\gamma})$ décroît. Ce comportement n'est pas physique si l'on n'ajoute pas la viscosité "en parallèle" η

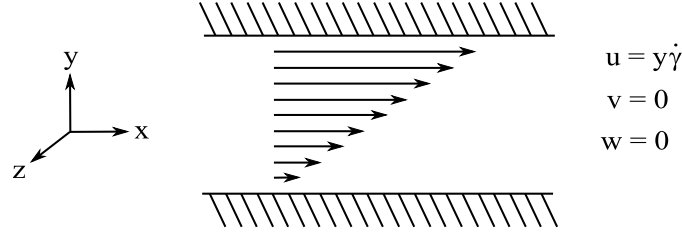
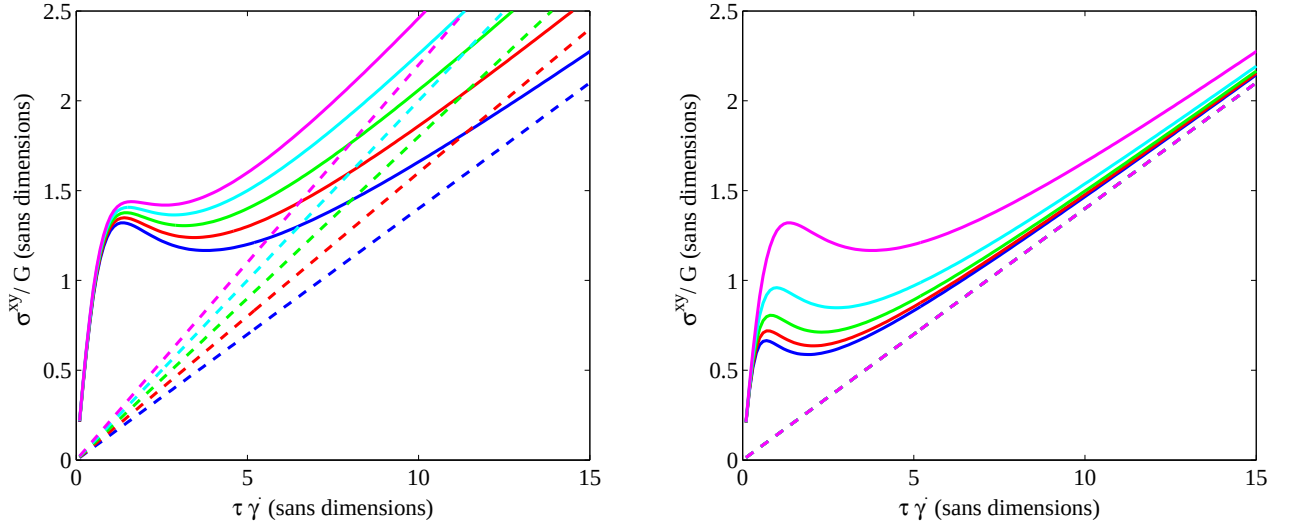


FIGURE 6.4 – Schéma de principe d'un écoulement cisailé unidirectionnel.

FIGURE 6.5 – Courbes d'écoulement obtenues grâce à l'équation (6.6). À gauche on fait varier le rapport de viscosités $\alpha = \frac{\eta}{G\tau}$, à droite on fait varier le paramètre sans dimensions a .

comme on l'a vu précédemment dans (6.1) pour "redresser" la contrainte totale lorsque σ_p décroît. La contrainte totale de cisaillement en fonction du taux de cisaillement s'écrit alors :

$$\sigma^{xy}(\dot{\gamma}) = 2\eta\dot{\gamma} + 2G\tau \frac{\dot{\gamma}}{1 + 4\tau^2(1 - a^2)\dot{\gamma}^2}. \quad (6.6)$$

La Fig. 6.5 montre les profils $\sigma(\dot{\gamma})$, appelées courbes d'écoulement, obtenues grâce à (6.6). Sur une courbe d'écoulement, une pente correspond à une viscosité. On peut constater qu'en général les courbes obtenues ici sont non-monotones, ce qui semble à première vue être un comportement aberrant (zone de viscosité négative). Cependant, on verra par la suite que, lorsque l'on ne fixe plus le taux de déformation, mais qu'on le laisse évoluer avec σ_p via une équation de conservation de la quantité de mouvement, les zones où la pente de $\sigma(\dot{\gamma})$ est négative sont évitées dynamiquement, pouvant dans certains cas séparer le fluide en deux phases distinctes.

On voit également sur la Fig. 6.5 l'influence des différents paramètres sur la forme de la courbe d'écoulement. Par un jeu d'adimensionnements, on peut s'apercevoir que seuls deux paramètres comptent : $\alpha = \frac{\eta}{G\tau}$ qui représente le rapport entre la viscosité "en parallèle" et la viscosité effective de la partie visco-élastique de la contrainte, et la paramètre a qui règle la hauteur de la zone de pente négative.

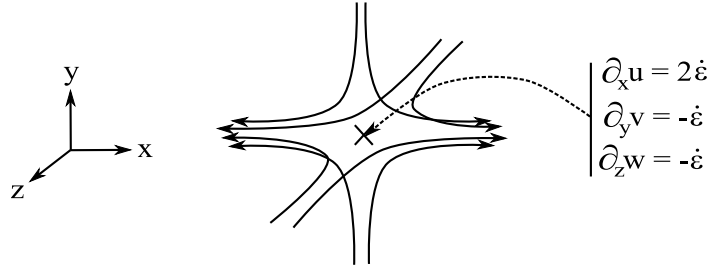


FIGURE 6.6 – Schéma de principe d'un écoulement d'élongation. Au milieu de l'écoulement se trouve un point d'arrêt où l'on a une déformation d'élongation pure

6.2.3 Comportement en élongation

Fixons à présent un taux de déformation correspondant à un point d'arrêt dans un écoulement d'élongation (voir Fig. 6.6) :

$$\nabla V = \begin{pmatrix} 2\dot{\epsilon} & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{\epsilon} & 0 \\ 0 & 0 & -\dot{\epsilon} \end{pmatrix}, \quad (6.7)$$

où $\dot{\epsilon}$ (s^{-1}) représente un taux d'élongation. De la même manière que précédemment, on fixe ce taux de déformation et on calcule l'état stationnaire sur le modèle (6.3). On obtient (calculs en Annexe B.) :

$$\sigma^{xx}(\dot{\epsilon}) = 2\eta\dot{\epsilon} + 2G\tau \frac{\dot{\epsilon}}{1 - 2a\tau\dot{\epsilon}}, \quad (6.8)$$

$$\sigma^{yy}(\dot{\epsilon}) = \sigma^{zz}(\dot{\epsilon}) = -\eta\dot{\epsilon} - G\tau \frac{\dot{\epsilon}}{1 + a\tau\dot{\epsilon}}. \quad (6.9)$$

La Fig. 6.7 montre différents tracés de (6.8). On s'aperçoit alors que $\sigma^{xx}(\dot{\epsilon})$ a une valeur singulière pour $\dot{\epsilon} = \frac{1}{2a\tau}$. De plus, tous les points stationnaires de $\sigma^{xx}(\dot{\epsilon})$ pour $\dot{\epsilon} > \frac{1}{2a\tau}$ sont des points stationnaires instables (voir Annexe B). Le modèle (6.3) a donc un très mauvais comportement en élongation. Ce dernier n'est valide que dans la limite $\dot{\epsilon} \ll \frac{1}{2a\tau}$, c'est à dire dans des écoulements pour lesquels la composante d'élongation est relativement faible (écoulements cisailés, micro-canaux droits). Dans le chapitre 9 on étudiera des écoulements dans des jonctions micro-fluidiques. Dans cette géométrie particulière, le fluide se sépare en deux parties pour se répartir dans deux branches de sortie. La composante d'élongation du tenseur des taux de déformations peut alors être suffisamment importante pour amener le système (6.3) dans une situation instable. Il est donc nécessaire de modifier le modèle afin de pouvoir l'utiliser dans cette situation.

6.2.4 L'ajout d'une non-linéarité

En suivant l'exemple du modèle de Giesekus [28], on ajoute un terme quadratique dans l'équation (6.3). La loi de comportement devient :

$$\dot{\sigma}_p + V \cdot \nabla \sigma_p + \frac{1}{\tau} \sigma_p + \frac{\kappa}{G\tau} \sigma_p^2 = 2GD, \quad (6.10)$$

où le coefficient κ , sans dimensions, déterminera l'importance du terme additionnel. Le terme quadratique additionnel forcera la relaxation de σ_p dans des cas où le taux d'élongation est trop important.

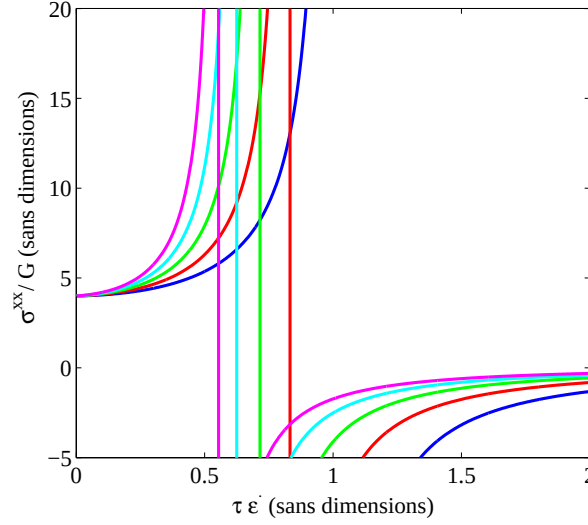


FIGURE 6.7 – Courbes représentant la première contrainte d'élongation σ^{xx} en fonction du taux d'élongation fixé. On fait varier le paramètre a pour obtenir les différentes courbes.

De la même manière qu'à la section 6.2.3, on fixe un taux de déformation correspondant à un point d'arrêt dans un écoulement d'élongation, et on calcule les états stationnaires pour l'équation (6.10). On obtient alors (calculs en Annexe B.) :

$$\sigma^{xx}(\dot{\epsilon}) = 2\eta\dot{\epsilon} + \frac{G}{2\kappa} \left((4a\tau\dot{\epsilon} - 1) + \sqrt{(4a\tau\dot{\epsilon} - 1)^2 + 16\kappa\tau\dot{\epsilon}} \right), \quad (6.11)$$

$$\sigma^{yy}(\dot{\epsilon}) = \sigma^{zz}(\dot{\epsilon}) = -\eta\dot{\epsilon} + \frac{G}{2\kappa} \left(-(2a\tau\dot{\epsilon} + 1) + \sqrt{(2a\tau\dot{\epsilon} + 1)^2 - 8\kappa\tau\dot{\epsilon}} \right). \quad (6.12)$$

La Fig. 6.8 montre, à gauche, le tracé de (6.11) pour plusieurs valeurs de κ . On peut voir qu'il n'y a plus de valeurs singulières pour $\sigma^{xx}(\dot{\epsilon})$, de plus tous les points tracés ici sont des points stationnaires stables. Lorsque $\dot{\epsilon}$ grandit, $\sigma^{xx}(\dot{\epsilon})$ possède une asymptote dont la pente dépend de κ . En d'autres mots, la viscosité élongationnelle, définie par :

$$\eta_{\text{Elong}} = \frac{\sigma^{xx} - \sigma^{yy}}{\dot{\epsilon}}, \quad (6.13)$$

possède une valeur limite quand $\dot{\epsilon}$ grandit : $\eta_{\text{Elong}} = 4a \frac{\tau G}{\kappa}$. La valeur limite de la viscosité est plus grande que celle de la viscosité au repos ($\dot{\epsilon} = 0$). Par l'ajout d'une non-linéarité, on a donc conféré au modèle un caractère "rhéo-épaississant" en élongation (plus on étire le fluide, plus il résiste à l'étirement). D'autres types de non-linéarités sont envisageables (par exemple les modèles PTT [49] - FENE [61] [30]), et produisent des comportements différents. Remarquons enfin que l'ajout du terme quadratique dans l'équation (6.3) change peu le comportement en cisaillement du fluide, et surtout qu'il ne change pas le caractère non-monotone, vu dans la section 6.2.2, des courbes d'écoulement, essentiel pour produire des bandes de cisaillement avec le modèle de Johnson-Segalman.

6.2.5 L'ajout d'un terme de diffusion

Revenons sur le modèle (6.3). On a vu que le profil de la courbe d'écoulement $\sigma^{xy}(\dot{\gamma})$ pouvait être non-monotone. Dans une véritable dynamique d'écoulement, les zones de pentes négatives sur

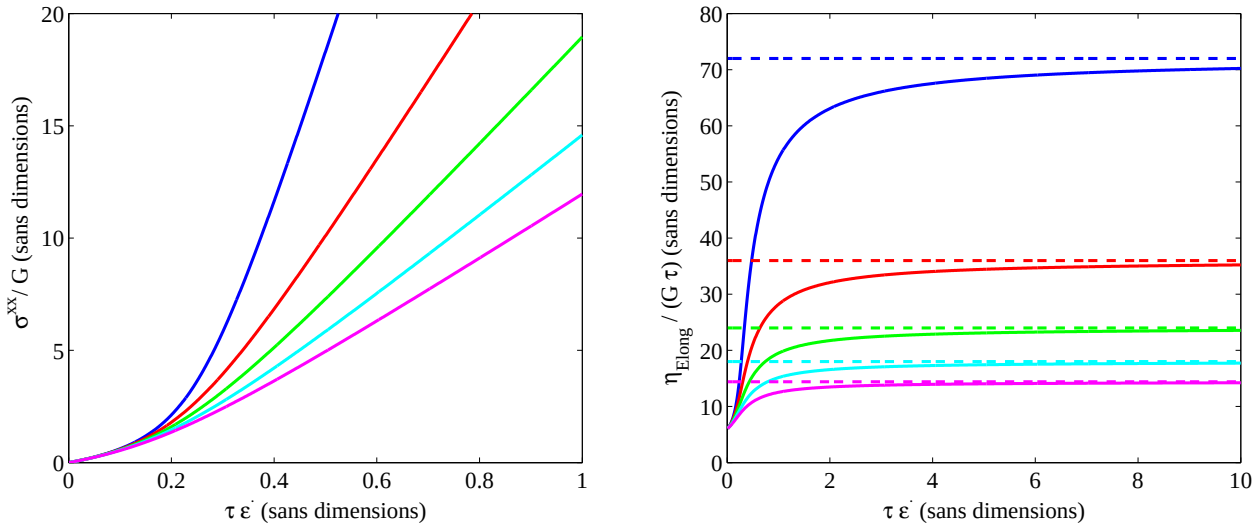


FIGURE 6.8 – A gauche : contrainte élongationnelle σ^{xx} en fonction du taux d'élongation pour le modèle (6.10) obtenu grâce à (6.11). A droite : Viscosité élongationnelle définie par (6.13) en fonction du taux d'élongation.

cette courbe sont instables, et le fluide est séparé en deux parties, les valeurs $(\dot{\gamma}, \sigma^{xy})$ se répartissant de part et d'autre de cette zone en tout point de l'écoulement. Cette séparation entre deux phases amène la formation d'un plateau $\sigma^{xy,*}$ sur la contrainte. On verra au chapitre 8 que si on regarde l'évolution de σ prédite par le modèle (6.3) seul, alors la valeur de $\sigma^{xy,*}$ peut dépendre de la condition initiale. Ce comportement est assez gênant car, lorsque l'on souhaite confronter les prédictions issues du modèle (6.3) avec les données issues des expériences, on ne connaît ni la condition initiale, ni l' "histoire" de l'écoulement observé. Cette hystérèse sur le modèle de Johnson-Segalman a été largement étudiée dans [1] pour des cas d'écoulements de Couette.

L'approche proposée dans [43] pour résoudre ce problème consiste à rajouter dans l'équation (6.3) un terme diffusif qui va permettre au système de sélectionner un plateau de contrainte indépendant de la condition initiale. Initialement proposée dans [23], cette approche se justifie par le fait qu'au voisinage de la zone de séparation entre deux bandes de cisaillement, les effets non-locaux négligés jusqu'ici deviennent alors non-négligeables. On obtient finalement le modèle de Johnson-Segalman diffusif :

$$\hat{\sigma}_p + V \cdot \nabla \sigma_p + \frac{1}{\tau} \sigma_p = 2GD + \mathcal{D} \Delta \sigma_p, \quad (6.14)$$

où $\mathcal{D}$ ($m^2.s^{-1}$) est un coefficient de diffusion à déterminer. En rassemblant (6.14) et le modèle non-linéaire (6.10), on obtient alors le modèle qui sera adopté dans la suite :

$$\hat{\sigma}_p + V \cdot \nabla \sigma_p + \frac{1}{\tau} \sigma_p + \frac{\kappa}{G\tau} \sigma_p^2 = 2GD + \mathcal{D} \Delta \sigma_p. \quad (6.15)$$

6.3 Le modèle complet

On a vu à la section 6.2.1 un modèle permettant de décrire la contrainte interne du fluide que l'on considère, en fonction des gradients de vitesse ∇V . Afin de fermer ce modèle il est nécessaire d'écrire une loi de conservation de la quantité de mouvement. Comme on a pu le voir dans le chapitre

introductif, lorsque l'on s'intéresse, comme ici, à des écoulements micro-fluidiques, on fait appel à l'équation de Stokes pour décrire la conservation de la quantité de mouvement :

$$\nabla \cdot \sigma = \nabla P, \quad (6.16)$$

On étudie en particulier des liquides incompressibles, on a donc aussi :

$$\nabla \cdot V = 0. \quad (6.17)$$

En rassemblant (6.1) et (6.16) on obtient :

$$\nabla \cdot (2\eta D[V]) + \nabla \cdot \sigma_p = \nabla P. \quad (6.18)$$

Dans cette partie du document, on étudie des écoulements mono-fluides, la viscosité η est donc constante. De plus, sachant que l'écoulement est incompressible, on peut réduire (6.18) à :

$$\eta \Delta V + \nabla \cdot \sigma_p = \nabla P. \quad (6.19)$$

En rassemblant (6.19), (6.17) et (6.15) on obtient le modèle complet suivant :

$$\begin{cases} \eta \Delta V + \nabla \cdot \sigma_p = \nabla P, & (6.20a) \\ \nabla \cdot V = 0, & (6.20b) \\ \dot{\sigma}_p + V \cdot \nabla \sigma_p + \frac{1}{\tau} \sigma_p + \frac{\kappa}{G\tau} \sigma_p^2 = 2G D[V] + \mathcal{D} \Delta \sigma_p. & (6.20c) \end{cases}$$

6.3.1 Version adimensionnée du modèle

Dans le chapitre 7, on utilisera une version adimensionnée du modèle (6.20a-6.20c). On propose les adimensionnements suivants :

- On adimensionne l'espace sur la largeur caractéristique du canal :

$$(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}) = \frac{(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})}{h}, \quad (6.21)$$

- Le temps est adimensionné sur le temps caractéristique de relaxation du fluide :

$$\tilde{t} = \frac{t}{\tau}, \quad (6.22)$$

- L'échelle caractéristique de vitesse est alors déterminée à l'aide de h et τ :

$$\tilde{V} = \frac{\tau}{h} V, \quad (6.23)$$

- Enfin on adimensionne les contraintes σ_p et P grâce au module élastique :

$$\tilde{\sigma}_p = \frac{\sigma_p}{G}, \quad (6.24)$$

$$\tilde{P} = \frac{P}{G}. \quad (6.25)$$

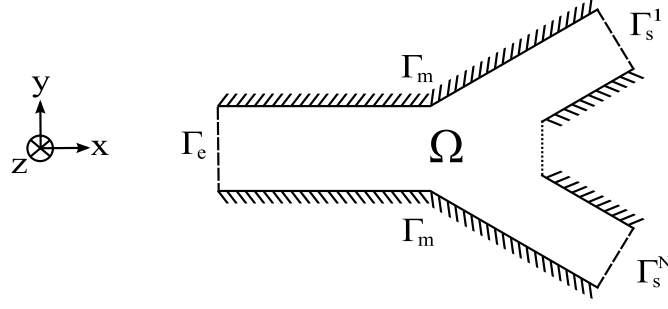


FIGURE 6.9 – Représentation schématique du type de domaine considéré pour le modèle complet (6.20a - 6.20c)

En appliquant ces adimensionnements au modèle (6.20a - 6.20c), on obtient :

$$\begin{cases} \alpha \tilde{\Delta} \tilde{V} + \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\sigma}_p = \tilde{\nabla} \tilde{P}, & (6.26a) \\ \tilde{\nabla} \cdot \tilde{V} = 0, & (6.26b) \\ \tilde{\sigma}_p + V \cdot \nabla \sigma_p + \tilde{\sigma}_p + \kappa \tilde{\sigma}_p^2 = 2 \tilde{D}[\tilde{V}] + \beta \tilde{\Delta} \tilde{\sigma}_p. & (6.26c) \end{cases}$$

ou les coefficients α, β , sont donnés par :

$$\alpha = \frac{\eta}{G \tau}, \quad (6.27)$$

$$\beta = \frac{\mathcal{D} \tau}{h^2}. \quad (6.28)$$

Cette version adimensionnée du modèle possède l'avantage de contenir moins de paramètres que le modèle (6.20a - 6.20c). Des conditions aux limites sont nécessaires pour V et σ_p afin de fermer définitivement le modèle.

6.4 Conditions aux limites

Commençons par décrire le type de géométrie auquel nous aurons à faire par la suite. On distinguera trois types de bords pour le domaine (voir Fig. 6.9) : l'entrée du canal, notée Γ_e ; les sorties du canal, notées Γ_s^i avec $i = 1 \dots N$; et enfin, les murs latéraux, notés Γ_m . La plus grosse difficulté ici est de déterminer des conditions appropriées à l'entrée et à la sortie du canal, en effet dans toutes les simulations numériques qui seront présentées par la suite, le domaine Ω ne représente qu'une infime partie du dispositif micro-fluidique réel étudié, et par conséquent, le choix des conditions d'injection et de sortie aura un impact majeur ici.

Pour l'entrée, on souhaite être capable d'imposer un gradient de pression. Cependant avec la formulation (6.20a - 6.20c) on ne peut donner de conditions aux limites que sur les vitesses. Moyennant quelques hypothèses (écoulement établi, stationnaire, parallèle) il est toutefois possible d'écrire une version réduite du modèle qui contienne comme paramètre le gradient de pression à imposer δP_e , et qui permette de donner un profil de vitesse $V^*(\delta P_e)$ et d'extra-contrainte $\sigma_p^*(\delta P_e)$ correspondant à l'entrée. Ce modèle réduit sera décrit entièrement à la section 6.5.1. On a donc à l'entrée une condition de Dirichlet :

$$V|_{\Gamma_e} = V^*(\delta P_e), \quad (6.29)$$

$$\sigma_p|_{\Gamma_e} = \sigma_p^*(\delta P_e). \quad (6.30)$$

Pour les sorties on envisage deux possibilités : d'une part, une condition de sortie similaire à celle d'entrée pour chaque sortie Γ_s^i , issue du modèle réduit décrit au paragraphe précédent, et d'autre part une condition de Neumann construite sur l'hypothèse d'un écoulement établi à la sortie. La difficulté de la première approche consiste à trouver des gradients de pression δP_s^i à entrer dans le modèle réduit, qui soient à priori compatibles, c'est à dire, qui assurent que la somme des débits de sortie soit égal au débit d'entrée dans le canal. Sachant que pour le fluide qui nous intéresse il n'y a pas de relation linéaire entre le gradient de pression et le débit, on ne peut pas remettre ces gradients de pression à l'échelle de manière simple. Un algorithme de recherche de δP_s^i compatibles sera présenté au chapitre 9 afin de résoudre ce problème. Il est à noter que, bien que l'algorithme en question donne une solution unique, la combinaison des δP_s^i compatibles possibles n'est pas unique. Cette méthode de recherche de gradients de pression compatibles introduit en fait un certain nombre d'hypothèses dont la validité sera discutée. A la sortie, on a donc soit la condition de Dirichlet :

$$V|_{\Gamma_s^i} = V^*(\delta P_s^i), \quad (6.31)$$

$$\sigma_p|_{\Gamma_s^i} = \sigma_p^*(\delta P_s^i), \quad (6.32)$$

soit la condition de Neumann :

$$\partial_{\vec{n}} V|_{\Gamma_s^i} = 0, \quad (6.33)$$

$$\partial_{\vec{n}} \sigma_p|_{\Gamma_s^i} = 0. \quad (6.34)$$

Pour les bords latéraux (murs du canal), on écrira la condition d'adhérence pour les vitesses :

$$V|_{\Gamma_m} = 0. \quad (6.35)$$

Pour la contrainte on distinguera deux cas : d'une part une condition de Dirichlet calculée sur le modèle (6.15) avec $\mathcal{D} = 0$ (modèle local) et d'autre part une condition de Neumann. Dans le premier cas, on a :

$$\sigma_p|_{\Gamma_m} = \sigma_p^{\text{loc}}, \quad (6.36)$$

où σ_p^{loc} est le résultat du calcul sur le modèle local prenant en compte $\nabla V|_{\Gamma_m}$. Dans le deuxième cas on a la condition de Neumann :

$$\partial_{\vec{n}} \sigma_p|_{\Gamma_m} = 0, \quad (6.37)$$

Ces deux conditions correspondent à des hypothèses différentes sur la nature de la surface des murs du canal.

6.5 Modèles réduits

Dans cette section nous détaillons l'écriture et les différentes hypothèses nous permettant d'aboutir à des modèles réduits à partir du modèle (6.20a - 6.20c), qui nous serviront d'une part à étudier la rhéologie produite par le modèle de Johnson-Segalman dans un contexte simple d'écoulement cisailé, et d'autre part à bénéficier de conditions d'entrée robustes pour l'étude du modèle dans des géométries complexes. On considère ici un canal droit, où x désignera la composante longitudinale de ce canal, et où (y, z) seront les composantes transverses.

6.5.1 Modèle "Poiseuille" 2D

Dans cette section on fait les hypothèses suivantes sur l'écoulement :

– L'écoulement est parallèle, c'est à dire :

$$v = 0, \quad (6.38)$$

$$w = 0. \quad (6.39)$$

– L'écoulement est établi, c'est à dire invariant dans la direction du canal :

$$\partial_x u = 0, \quad (6.40)$$

$$\partial_x \sigma_p = 0. \quad (6.41)$$

En faisant ces hypothèses, la condition d'incompressibilité est automatiquement vérifiée, les conditions d'entrée et de sortie disparaissent pour laisser la place à un paramètre δP qui représente le gradient de pression auquel on soumet le fluide. On obtient alors le modèle suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta \Delta_{yz} u + \partial_y \sigma_p^{xy} + \partial_z \sigma_p^{xz} = \delta P, \end{array} \right. \quad (6.42a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\sigma}_p + \frac{1}{\tau} \sigma_p + \frac{\kappa}{G\tau} \sigma_p^2 = 2G (\partial_y u (\delta_2^1 + \delta_1^2) + 2G \partial_z u (\delta_3^1 + \delta_1^3)) + \mathcal{D} \Delta_{yz} \sigma_p, \end{array} \right. \quad (6.42b)$$

où δ_j^i représente une matrice dont les composantes sont nulles sauf pour $i = j$ (symbole de Kronecker). On note que la partie convective dans l'équation (6.20c) a disparue ici, car la seule direction dans laquelle est transportée la contrainte σ_p est également la direction dans laquelle elle est invariante par hypothèse. Les conditions aux limites à considérer sur ce modèle sont celles que l'on a écrites à la section 6.4 pour les murs du canal Γ_m . Ce modèle convient bien à l'étude d'écoulements de fluides dans des canaux droits. L'état stationnaire sur le système (6.42a-6.42b) permettra de calculer les profils d'entrée $V^*(\delta P)$ et $\sigma_p^*(\delta P)$ mentionnés à la section 6.4. La version adimensionnée du modèle (6.42a-6.42b) s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha \Delta_{yz} u + \partial_y \sigma_p^{xy} + \partial_z \sigma_p^{xz} = \Pi, \end{array} \right. \quad (6.43a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\sigma}_p + \sigma_p + \kappa \sigma_p^2 = 2 (\partial_y u (\delta_2^1 + \delta_1^2) + 2 \partial_z u (\delta_3^1 + \delta_1^3)) + \beta \Delta_{yz} \sigma_p. \end{array} \right. \quad (6.43b)$$

où le gradient de pression adimensionné Π est défini par :

$$\Pi = \frac{h}{G} \delta P. \quad (6.44)$$

Les conditions aux limites s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{l} V|_{\Gamma} = 0, \\ \sigma_p|_{\Gamma} = \sigma_p^{\text{loc}}, \end{array} \right.$$

ou bien :

$$\left\{ \begin{array}{l} V|_{\Gamma} = 0, \\ \partial_{\vec{n}} \sigma_p|_{\Gamma} = 0, \end{array} \right.$$

6.5.2 Modèle "Poiseuille" 1D

Dans cette section, on reprend les hypothèses effectués à la section 6.5.1 en y ajoutant une hypothèse d'invariance supplémentaire. On choisit une direction "grande" z et on fait l'hypothèse que l'écoulement est invariant dans cette direction :

$$\partial_z u = 0, \partial_z \sigma_p = 0. \quad (6.45)$$

En reprenant (6.42b) on obtient alors :

$$\eta \partial_{yy}^2 u + \partial_y \sigma_p^{xy} = \delta P, \quad (6.46)$$

Par commodité on choisit alors d'écrire le modèle directement sur la variable $\dot{\gamma} = \partial_y u$. L'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit alors :

$$\partial_y (\eta \dot{\gamma} + \sigma_p^{xy}) = \delta P, \quad (6.47)$$

en intégrant cette équation suivant y on a :

$$2 \eta \dot{\gamma} + \sigma_p^{xy} = \delta P y + cst, \quad (6.48)$$

grâce à la symétrie : $\dot{\gamma}(y = -l) = -\dot{\gamma}(y = l)$ on trouve $cst = 0$. Le modèle 1D s'écrit finalement :

$$\begin{cases} 2 \eta \dot{\gamma} + \sigma_p^{xy} = \delta P y, & (6.49a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{\sigma}_p + \frac{1}{\tau} \sigma_p + \frac{\kappa}{G \tau} \sigma_p^2 = 2 G \dot{\gamma} (\delta_2^1 + \delta_1^2) + \mathcal{D} \partial_{yy}^2 \sigma_p. & (6.49b) \end{cases}$$

On verra par la suite que le fait de pouvoir écrire l'équation directement sur $\dot{\gamma}$ se révélera très pratique pour l'étude du modèle. De la même manière que précédemment, les conditions aux limites à adjoindre au modèle (6.49a-6.49b) sont celles décrites à la section 6.4 pour les murs Γ_m . La version adimensionnée du modèle (6.49a-6.49b) s'écrit :

$$\begin{cases} \alpha \dot{\gamma} + \sigma_p^{xy} = \Pi y, & (6.50a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{\sigma}_p + \sigma_p + \kappa \sigma_p^2 = 2 \dot{\gamma} (\delta_2^1 + \delta_1^2) + \beta \partial_{yy}^2 \sigma_p. & (6.50b) \end{cases}$$

Les conditions aux limites s'écrivent :

$$\sigma_p|_{\Gamma} = \sigma_p^{\text{loc}},$$

ou bien :

$$\partial_x \sigma_p|_{\Gamma} = 0.$$

Ce dernier modèle, si l'on omet la diffusion, est un système d'équations différentielles non-linéaires. Il contient plus d'informations que le modèle local, et permet, comme on le verra au chapitre 8 d'obtenir l'évitement dynamique de certaines valeurs du taux de cisaillement conduisant à la formation de bandes de cisaillement dans l'écoulement.

Le chapitre suivant traite des méthodes numériques nécessaires pour effectuer des prédictions sur le modèle (6.20a-6.20c). Le chapitre ne traite pas de la discrétisation des sous-modèles (6.43a-6.43b) et (6.49a-6.50a) exposés ci-dessus, car celle-ci découle naturellement de la discrétisation du modèle complet. Pour le détail des méthodes numériques employées pour traiter les problèmes (6.43a-6.43b) et (6.49a-6.50a), nous renvoyons le lecteur à l'annexe D de ce document.

Chapitre 7

Méthodes numériques

Ce chapitre est consacré au détail des méthodes numériques utilisées afin d'étudier le comportement du modèle d'écoulements de micelles géantes introduit au chapitre précédent. Nous nous concentrons ici sur la discrétisation modèle 3D complet (6.26a - 6.26c). La discrétisation des modèles réduits 2D (6.43a - 6.43b) et 1D (6.50a - 6.50b) découle de celle présentée ici, elle est par ailleurs détaillée en Annexe D. Dans la suite de ce chapitre, nous écrivons tout d'abord la discrétisation en temps et les différentes étapes intervenant dans la résolution du système général. Ensuite sont exposées les méthodes numériques impliquées dans la discrétisation en espace des équations de ce système. Comme au chapitre 3, l'implémentation de ces différentes méthodes numériques est à chaque fois validée par un cas-test simple. Enfin, quelques problèmes de stabilité numérique sur le modèle discrétisé sont exposés à la fin de ce chapitre.

On étudie dans ce chapitre le modèle (6.26a - 6.26c) dans sa version adimensionnée :

$$\begin{cases} 2\alpha \Delta V + \nabla \cdot \sigma_p = \nabla P, & (7.1a) \\ \nabla \cdot V = 0, & (7.1b) \\ \partial_t \sigma_p - M_a(\sigma_p) + V \cdot \nabla \sigma_p + \sigma_p + \kappa \sigma_p^2 = 2D[V] + \beta \Delta \sigma_p, & (7.1c) \end{cases}$$

où $M_a(\sigma_p)$ contient l'ensemble des termes de dérivée objective définis dans le chapitre précédent par :

$$M_a(\sigma_p) = (\Omega \sigma_p - \sigma_p \Omega) + a(D \sigma_p + \sigma_p D).$$

M_a est une application linéaire de l'ensemble des matrices symétriques réelles $\mathcal{S}_3(\mathbb{R})$ à valeurs dans $\mathcal{S}_3(\mathbb{R})$. Adoptons la notation de Voigt :

$$\begin{pmatrix} \sigma_p^{xx} & \sigma_p^{xy} & \sigma_p^{xz} \\ \sigma_p^{xy} & \sigma_p^{yy} & \sigma_p^{yz} \\ \sigma_p^{xz} & \sigma_p^{yz} & \sigma_p^{zz} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \sigma_p^{xx} \\ \sigma_p^{yy} \\ \sigma_p^{zz} \\ \sigma_p^{xy} \\ \sigma_p^{xz} \\ \sigma_p^{yz} \end{pmatrix}.$$

L'application M_a est alors représentée par une matrice de taille 6×6 , dont nous détaillons l'expression en Annexe C.

7.1 Discrétisation en temps

La variable temporelle est subdivisée en pas de temps t^n discrets définis par :

$$t^n = n \delta t, \quad \text{avec : } n \in \mathbb{N},$$

où δt représente le pas de temps. Les différentes variables du problème V , P , et σ_p évaluées au temps t^n sont notées :

$$\begin{aligned} V^n(x, y, z) &\sim V(t^n, x, y, z), \\ P^n(x, y, z) &\sim P(t^n, x, y, z), \\ \sigma_p^n(x, y, z) &\sim \sigma_p(t^n, x, y, z). \end{aligned}$$

Les équations (7.1a- 7.1b) sont stationnaires, on peut alors considérer la discrétisation en temps suivante :

$$\begin{cases} 2\alpha \Delta V^n + \nabla \cdot \sigma_p^n = \nabla P^n, \\ \nabla \cdot V^n = 0. \end{cases} \quad \begin{matrix} (7.2a) \\ (7.2b) \end{matrix}$$

L'équation (7.1c) est résolue en deux temps, l'un prenant en compte tous les termes non-locaux (convection, diffusion) et l'autre, tous les termes "locaux" (termes de dérivée objective, relaxation, terme non linéaire et terme source). On sépare donc la résolution de l'équation (7.1c) en la résolution de deux problèmes via un "splitting" :

- on résout d'abord l'équation suivante en chaque point du domaine Ω :

$$\partial_t \sigma_p - M_a(\sigma_p) + \sigma_p + \kappa \sigma_p^2 = 2D[V], \quad (7.3)$$

- puis on résout les 6 équation de convection-diffusion (les 6 composantes du tenseur) dans Ω :

$$\partial_t \sigma_p + V \cdot \nabla \sigma_p = \beta \Delta \sigma_p. \quad (7.4)$$

Les équations (7.3-7.4) contiennent une dérivée en temps qui sera approchée grâce une méthode de différences finies :

$$\begin{aligned} \partial_t \sigma_p(t^n) &\sim \frac{\sigma_p^{n+1/2} - \sigma_p^n}{\delta t}, \\ \partial_t \sigma_p(t^{n+1/2}) &\sim \frac{\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^{n+1/2}}{\delta t}, \end{aligned}$$

La première équation du splitting (7.3) prendra en compte les termes de dérivée objective et de relaxation de façon semi-implicite, et le terme non-linéaire de manière explicite. La discrétisation en temps de l'équation (7.3) s'écrit :

$$\frac{\sigma_p^{n+1/2} - \sigma_p^n}{\delta t} - M_a^n \frac{\sigma_p^n + \sigma_p^{n+1/2}}{2} + \frac{\sigma_p^n + \sigma_p^{n+1/2}}{2} + \kappa (\sigma_p^n)^2 = 2D[V^n]. \quad (7.5)$$

La deuxième équation prendra en compte le transport de manière explicite et la diffusion de manière implicite :

$$\frac{\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^{n+1/2}}{\delta t} + V^n \cdot \nabla \sigma_p^{n+1/2} = \beta \Delta \sigma_p^{n+1}. \quad (7.6)$$

Le calcul en temps se déroule de la manière suivante (on admet que la pression P^n assurant l'incompressibilité est connue) : connaissant σ_p^n , on peut calculer $\nabla \cdot \sigma_p^n$ et résoudre le système (7.2a-7.2b) pour trouver V^n . Connaissant alors V^n on peut calculer ∇V^n apparaissant dans l'étape de résolution (7.5) qui nous amène à calculer $\sigma_p^{n+1/2}$. Enfin on calcule σ_p^{n+1} en résolvant l'équation (7.6).

La résolution des étapes (7.2a- 7.2b) et (7.6) du système nécessite la discrétisation de différents opérateurs spatiaux. Dans la section suivante on détaille les méthodes numériques intervenant dans cette discrétisation en espace.

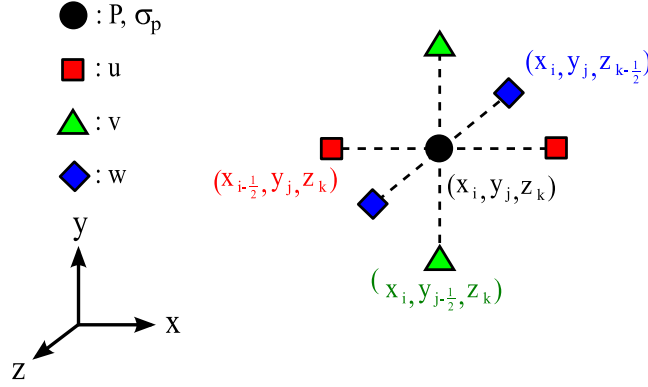


FIGURE 7.1 – Placement des différentes variables sur une grille décalée pour la discrétisation des équations (7.1a - 7.1a).

7.2 Discrétisation en espace

Passons à présent à la discrétisation du modèle complet 3D (7.1a-7.1c). De la même manière que précédemment, on discrétise l'espace en définissant le maillage cartésien suivant :

$$\begin{aligned} x_i &= i \delta x, & i &= 1 \dots N_x, \\ y_j &= j \delta y, & j &= 1 \dots N_y, \\ z_k &= k \delta z, & k &= 1 \dots N_z, \end{aligned}$$

où δx , δy et δz représentent les pas d'espace et N_x , N_y , N_z représentent la résolution spatiale du maillage. Dans la suite de ce chapitre, les différentes variables du problème sont évalués à différents noeuds autour de (x_i, y_j, z_k) :

$$\begin{aligned} u_{ijk} &\sim u(x_{i-1/2}, y_j, z_k), \\ v_{ijk} &\sim v(x_i, y_{j-1/2}, z_k), \\ w_{ijk} &\sim w(x_i, y_j, z_{k-1/2}), \\ P_{ijk} &\sim P(x_i, y_j, z_k), \\ \sigma_{p,ijk} &\sim \sigma_p(x_i, y_j, z_k). \end{aligned}$$

Ce placement de variables pour (u, v, w, P) correspond à un maillage dit MAC (Marker And Cell, voir Fig. 7.1) et permet une discrétisation au second ordre du modèle de Stokes incompressible. On introduit également les mailles M_1 , M_2 et M_3 centrées sur les points $(x_{i-1/2}, y_j, z_k)$, $(x_i, y_{j-1/2}, z_k)$ et $(x_i, y_j, z_{k-1/2})$ (voir Fig. 7.2). Ces mailles serviront à la discrétisation composante par composante de l'équation de conservation de la quantité de mouvement (7.1a). Pour la suite on suppose que la contrainte σ_p dans l'équation (7.1a) est connue, et on notera $F = -\nabla \cdot \sigma_p$. On cherche tout d'abord à discrétiser en espace une équation du type :

$$\begin{cases} 2\alpha \Delta V = \nabla P + F, & (7.7a) \\ \nabla \cdot V = 0. & (7.7b) \end{cases}$$

7.2.1 Traitement de l'incompressibilité

La résolution du système (7.7a-7.7b) est une tâche difficile, en particulier à cause de la contrainte d'incompressibilité (7.7b). La formulation (7.7a-7.7b) ne permet pas une résolution directe de l'équation, il faut donc changer de formulation.

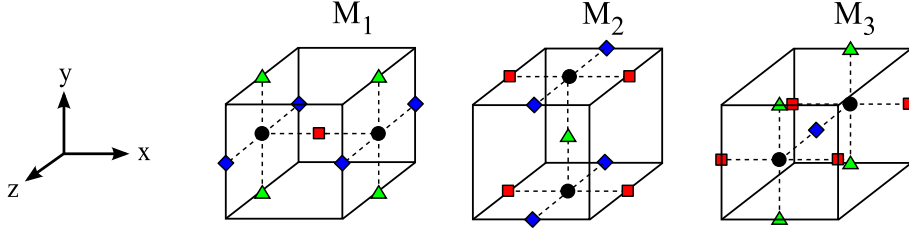


FIGURE 7.2 – Différentes mailles considérées pour discrétiser les trois composantes de (7.1a).

Certaines méthodes, dites de "compressibilité artificielle" [15] expriment la solution de (7.7a-7.7b) comme l'état stationnaire d'un autre problème faisant intervenir une dérivée sur un pseudo-temps r :

$$2\alpha \Delta V^r = \nabla P^r + F, \quad (7.8)$$

$$P^{r+1} = P^r - \delta r \nabla \cdot V^r. \quad (7.9)$$

à chaque itération on calcule la vitesse V^r et on met à jour la pression à P^{r+1} grâce à $\nabla \cdot V^r$. La correction de pression ainsi effectuée à chaque pas de temps assure la convergence de la méthode vers un état stationnaire pour P , c'est à dire $\|P^{r+1} - P^r\| = 0$, ce qui implique $\|\nabla \cdot V^r\| = 0$. D'autres méthodes issues de l'optimisation sous contraintes permettent une résolution plus rapide du problème (7.7a-7.7b), ce sont les méthodes de "Lagrangien augmenté".

Le problème (7.7a-7.7b) peut également être mis sous la forme d'un problème de recherche de point selle sur une fonctionnelle $\mathcal{L}$, lequel peut être résolu grâce à une méthode itérative appelée méthode d'Uzawa [58]. Cette formulation implique l'ajout dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement d'un terme en $\nabla(\nabla \cdot)$. L'algorithme d'Uzawa s'écrit alors :

$$2\alpha \Delta V^{r+1} + \delta r \nabla(\nabla \cdot V^{r+1}) = \nabla P^r + F, \quad (7.10)$$

$$P^{r+1} = P^r - \delta r \nabla \cdot V^{r+1}. \quad (7.11)$$

Cette méthode ressemble fortement à la méthode (7.8-7.9) mis à part le terme en $\nabla(\nabla \cdot)$. On peut voir cet algorithme comme une version "implicite" de la méthode de compressibilité artificielle. C'est cet algorithme que l'on utilisera par la suite pour résoudre le couplage vitesses-pressions dans le système (7.7a-7.7b). Le pas de pseudo-temps δr sera réglé sur le coefficient de "viscosité" α et ajusté pour une convergence aussi rapide que possible.

7.2.2 Discrétisation du problème de Stokes

Dans la section précédente on a décrit une méthode itérative de résolution du couplage vitesse-pression qui nécessite d'être capable de calculer la vitesse V^{r+1} avec l'équation (7.7a), et connaissant une pression P^r . Cette résolution passe par la construction d'un système linéaire obtenu après discrétisation des opérateurs Δ et $\nabla(\nabla \cdot)$ dans l'équation (7.10).

7.2.2.1 Discrétisation des équations

L'équation (7.10) peut être ré-écrite sur les trois composantes d'espace comme :

$$\begin{cases} 2\alpha \Delta u - \delta r \partial_x(\nabla \cdot V) = F_x + \partial_x P, & (7.12a) \\ 2\alpha \Delta v - \delta r \partial_y(\nabla \cdot V) = F_y + \partial_y P, & (7.12b) \\ 2\alpha \Delta w - \delta r \partial_z(\nabla \cdot V) = F_z + \partial_z P. & (7.12c) \end{cases}$$

La première composante (7.12a) est évaluée dans la maille M_1 (maille centrée sur le noeud portant u_{ijk} , voir Fig. 7.2). De la même manière, les deuxièmes et troisièmes composantes (7.12b) et (7.12c) sont évaluées respectivement sur les mailles M_2 et M_3 (mailles centrées sur les noeuds portant respectivement v_{ijk} et w_{ijk} , voir Fig. 7.2). Dans la suite on ne détaille que la discrétisation de la première équation (7.12a), le traitement réservé aux deux autres équations étant identique.

Commençons par expliciter la discrétisation du terme en Δu . On reprend la discrétisation du Laplacien exposée au chapitre 3 dans le cas particulier d'un coefficient constant :

$$\Delta u(x_{i-1/2}, y_j, z_k) \sim \frac{u_{i+1,jk} - 2u_{ijk} + u_{i-1,jk}}{\delta x^2} + \frac{u_{i,j+1,k} - 2u_{ijk} + u_{i,j-1,k}}{\delta y^2} + \frac{u_{ij,k+1} - 2u_{ijk} + u_{ij,k-1}}{\delta z^2}. \quad (7.13)$$

Discretisons à présent le terme $\partial_x(\nabla \cdot)$. Le placement de variables décrit précédemment permet une discrétisation de la divergence des vitesses aux noeuds (x_i, y_j, z_k) (noeuds portant la pression P_{ijk}) :

$$\nabla \cdot V(x_i, y_j, z_k) \sim \frac{u_{i+1,jk} - u_{ijk}}{\delta x} + \frac{v_{i,j+1,k} - v_{ijk}}{\delta y} + \frac{w_{ij,k+1} - w_{ijk}}{\delta z}. \quad (7.14)$$

Les différentes composantes du gradient de cette divergence sont évaluées par différences finies naturellement aux noeuds $(x_{i-1/2}, y_j, z_k)$, $(x_i, y_{j-1/2}, z_k)$ et $(x_i, y_j, z_{k-1/2})$, (noeuds portant les trois composantes des vitesses). La première composante $\partial_x(\nabla \cdot V)$ est donc approchée par :

$$\begin{aligned} \partial_x(\nabla \cdot V)(x_{i-1/2}, y_j, z_k) &\sim \frac{\nabla \cdot V(x_i, y_j, z_k) - \nabla \cdot V(x_{i-1}, y_j, z_k)}{\delta x} \\ &\sim \frac{1}{\delta x} \left(\frac{u_{i+1,jk} - u_{ijk}}{\delta x} + \frac{v_{i,j+1,k} - v_{ijk}}{\delta y} + \frac{w_{ij,k+1} - w_{ijk}}{\delta z} \right. \\ &\quad \left. - \frac{u_{ijk} - u_{i-1,jk}}{\delta x} - \frac{v_{ijk} - v_{i,j-1,k}}{\delta y} - \frac{w_{ijk} - w_{ij,k-1}}{\delta z} \right). \end{aligned} \quad (7.15)$$

Le gradient de pression est approché au noeud $(x_{i-1/2}, y_j, z_k)$, également par différences finies :

$$\partial_x P(x_{i-1/2}, y_j, z_k) \sim \frac{P_{ijk} - P_{i-1,jk}}{\delta x}. \quad (7.16)$$

Enfin on suppose que l'on connaît F_x au centre de la maille M_1 :

$$F_x(x_{i-1/2}, y_j, z_k) = F_{x,ijk}. \quad (7.17)$$

En rassemblant (7.14-7.17), et en multipliant par $\delta x \delta y \delta z$, on obtient le système :

$$\begin{aligned} -u_{ijk} \left[(2\delta r + 4\alpha) \frac{\delta y \delta z}{\delta x} + 4\alpha \left(\frac{\delta x \delta z}{\delta y} + \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right) \right] &- u_{i+1,jk} \left[(2\alpha + \delta r) \frac{\delta y \delta z}{\delta x} \right] - u_{i-1,jk} \left[(2\alpha + \delta r) \frac{\delta y \delta z}{\delta x} \right] \\ &+ u_{i,j+1,k} \left[2\alpha \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right] + u_{i,j-1,k} \left[2\alpha \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right] + u_{ij,k+1} \left[2\alpha \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right] + u_{ij,k-1} \left[2\alpha \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right] \\ &- 2\delta r \delta z v_{ijk} + \delta r \delta z v_{i,j-1,k} + \delta r \delta z v_{i,j+1,k} - 2\delta r \delta y w_{ijk} + \delta r \delta y w_{ij,k-1} + \delta r \delta y w_{ij,k+1} \\ &= \delta x \delta y \delta z F_{x,ijk} + \delta y \delta z (P_{ijk} - P_{i-1,jk}). \end{aligned} \quad (7.18)$$

Suivant le même principe, les autres composantes (7.12b) et (7.12c) de l'équation de conservation de la quantité de mouvement sont discrétisées par :

$$\begin{aligned}
& -v_{ijk} \left[(2\delta r + 4\alpha) \frac{\delta x \delta z}{\delta y} + 4\alpha \left(\frac{\delta y \delta z}{\delta x} + \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right) \right] - v_{i,j+1,k} \left[(2\alpha + \delta r) \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right] - v_{i,j-1,k} \left[(2\alpha + \delta r) \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right] \\
& + v_{i+1,j,k} \left[2\alpha \frac{\delta y \delta z}{\delta x} \right] + v_{i-1,j,k} \left[2\alpha \frac{\delta y \delta z}{\delta x} \right] + v_{ij,k+1} \left[2\alpha \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right] + v_{ij,k-1} \left[2\alpha \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right] \\
& - 2\delta r \delta z u_{ijk} + \delta r \delta z u_{i-1,j,k} + \delta r \delta z u_{i+1,j,k} - 2\delta r \delta x w_{ijk} + \delta r \delta x w_{ij,k-1} + \delta r \delta x w_{ij,k+1} \\
& = \delta x \delta y \delta z F_{y,ijk} + \delta x \delta z (P_{ijk} - P_{i,j-1,k}), \quad (7.19)
\end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned}
& -w_{ijk} \left[(2\delta r + 4\alpha) \frac{\delta x \delta y}{\delta z} + 4\alpha \left(\frac{\delta y \delta z}{\delta x} + \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right) \right] - w_{ij,k+1} \left[(2\alpha + \delta r) \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right] - w_{ij,k-1} \left[(2\alpha + \delta r) \frac{\delta x \delta y}{\delta z} \right] \\
& + w_{i,j+1,k} \left[2\alpha \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right] + w_{i,j-1,k} \left[2\alpha \frac{\delta x \delta z}{\delta y} \right] + w_{i+1,j,k} \left[2\alpha \frac{\delta y \delta z}{\delta x} \right] + w_{i-1,j,k} \left[2\alpha \frac{\delta y \delta z}{\delta x} \right] \\
& - 2\delta r \delta x v_{ijk} + \delta r \delta x v_{i,j-1,k} + \delta r \delta x v_{i,j+1,k} - 2\delta r \delta y u_{ijk} + \delta r \delta y u_{ij,k-1} + \delta r \delta y u_{ij,k+1} \\
& = \delta x \delta y \delta z F_{z,ijk} + \delta x \delta y (P_{ijk} - P_{ij,k-1}). \quad (7.20)
\end{aligned}$$

Le système linéaire formé des équations (7.18-7.20) écrites pour tous les points (i, j, k) du domaine forme un système linéaire symétrique dont la résolution se fera grâce à une méthode de gradient conjugué.

7.2.2.2 Conditions aux limites

Dans le chapitre 6 on a vu que l'on envisageait deux types de conditions aux limites : une condition de Dirichlet et une condition de Neumann. Comme au chapitre 3, on ne traite ici que le cas du bord droit Γ_x^+ du domaine défini par :

$$\Gamma_x^+ = \{(x, y, z) \in \Omega \mid x = N_x \delta x\}.$$

Si d'une part on considère sur Γ_x^+ la condition de Dirichlet :

$$V|_{\Gamma_x^+} = V^*,$$

alors il suffit de reprendre la discrétisation (7.18-7.20) en remplaçant : $u_{i+1,j,k}$ par u_{jk}^* , $v_{i+1,j,k}$ par v_{jk}^* , et $w_{i+1,j,k}$ par w_{jk}^* . Si d'autre part on considère la condition de Neumann :

$$\partial_n V|_{\Gamma_x^+} = 0,$$

alors il faut ré-écrire (7.18-7.20) en supprimant les contributions $u_{i+1,j,k} - u_{ijk}$, $v_{i+1,j,k} - v_{ijk}$ et $w_{i+1,j,k} - w_{ijk}$, correspondant aux gradients de chacune des composantes de la vitesses suivant la normale à Γ_x^+ .

7.2.2.3 Validation du code

Dans cette section on détaille les résultats d'un cas-test de validation sur la méthode de résolution du problème de Stokes décrite à la Section 7.2.2. On considère le système (7.7a-7.7b) dans un domaine $\Omega = [-1; 1] \times [-1; 1] \times [-1; 1]$. Les conditions aux limites choisies ici sont des conditions de Dirichlet homogènes :

$$V|_{\partial\Omega} = 0.$$

On choisit également le terme source F de la manière suivante :

$$F(x, y, z) = \begin{pmatrix} \pi^2 \sin(\pi y) \sin(\pi z) (3 \cos(\pi x) + 2) \\ -\frac{1}{2} \pi^2 \sin(\pi x) \sin(\pi z) (3 \cos(\pi y) + 2) \\ -\frac{1}{2} \pi^2 \sin(\pi y) \sin(\pi x) (3 \cos(\pi z) + 2) \end{pmatrix},$$

La solution analytique du système (7.7a-7.7b) s'écrit alors :

$$\begin{aligned} u_{\text{exact}}(x, y, z) &= (1 + \cos(\pi x)) \sin(\pi y) \sin(\pi z), \\ v_{\text{exact}}(x, y, z) &= -\frac{1}{2} (1 + \cos(\pi y)) \sin(\pi x) \sin(\pi z), \\ w_{\text{exact}}(x, y, z) &= -\frac{1}{2} (1 + \cos(\pi z)) \sin(\pi y) \sin(\pi x), \\ P_{\text{exact}}(x, y, z) &= 0. \end{aligned}$$

Le champ V_{exact} est bien à divergence nulle. Le tableau 7.3 résume des tests effectués dans ce cas-là. On voit que l'ordre de la méthode est proche de 2, comme on l'attend du schéma MAC décrit dans la section précédente.

Résolution	Erreur (L^2)	Ordre
$16 \times 16 \times 16$	$2.056e^{-2}$	-
$32 \times 32 \times 32$	$6.718e^{-3}$	1.6
$64 \times 64 \times 64$	$2.062e^{-3}$	1.7
$128 \times 128 \times 128$	$5.384e^{-4}$	1.9

FIGURE 7.3 – Précision de la méthode numérique pour le problème de Stokes incompressible.

7.2.3 Calcul de $\nabla \cdot \sigma_p$

Même si il est calculé explicitement, le terme $\nabla \cdot \sigma_p$ apparaissant dans (7.1a) doit tout de même être évalué aux centres des mailles M_1 , M_2 et M_3 . On notera ici $\sigma := \sigma_p$ pour alléger les écritures. Développons à présent $\nabla \cdot \sigma$ sur les trois composantes d'espace :

$$\nabla \cdot \sigma = \begin{pmatrix} \partial_x \sigma^{xx} + \partial_y \sigma^{xy} + \partial_z \sigma^{xz} \\ \partial_x \sigma^{xy} + \partial_y \sigma^{yy} + \partial_z \sigma^{yz} \\ \partial_x \sigma^{xz} + \partial_y \sigma^{yz} + \partial_z \sigma^{zz} \end{pmatrix}. \quad (7.21)$$

En suivant la discrétisation de l'équation de conservation de la quantité de mouvement décrite à la section 7.2.2, il est nécessaire d'approcher la première composante de $\nabla \cdot \sigma$ en $(x_{i-1/2}, y_j, z_k)$, la deuxième composante en $(x_i, y_{j-1/2}, z_k)$ et enfin la troisième composante en $(x_i, y_j, z_{k-1/2})$. Notons enfin que toutes les composantes de σ sont connues aux noeuds (x_i, y_j, z_k) . Dans (7.21), trois des dérivées qui apparaissent peuvent être approchées directement aux bons noeuds du maillage par différences finies :

$$\begin{aligned} \partial_x \sigma^{xx}(x_{i-1/2}, y_j, z_k) &\sim \frac{\sigma_{ijk}^{xx} - \sigma_{i-1,j,k}^{xx}}{\delta x}, \\ \partial_y \sigma^{yy}(x_i, y_{j-1/2}, z_k) &\sim \frac{\sigma_{ijk}^{yy} - \sigma_{i,j-1,k}^{yy}}{\delta y}, \\ \partial_z \sigma^{zz}(x_i, y_j, z_{k-1/2}) &\sim \frac{\sigma_{ijk}^{zz} - \sigma_{i,j,k-1}^{zz}}{\delta z}. \end{aligned}$$

Les autres dérivées se discrétisent naturellement sur les arêtes des mailles M_1 , M_2 et M_3 (voir Fig. 7.2), et non pas au milieu de ces mailles. Il est donc à chaque fois nécessaire d'interpoler σ en différents points afin de pouvoir évaluer ses dérivées correctement aux noeuds souhaités. On détaille ici l'exemple du calcul de $\partial_y \sigma^{xy}$ au centre de la maille M_1 . On notera la valeur de σ interpolée en $(x_{i-1/2}, y_j, z_k)$ par :

$$\sigma^{xy}(x_{i-1/2}, y_{j+1/2}, z_k) \sim \overline{\sigma^{xy}}_{ijk} = \frac{\sigma_{ijk}^{xy} + \sigma_{i-1,jk}^{xy} + \sigma_{i,j+1,k}^{xy} + \sigma_{i-1,j+1,k}^{xy}}{4}.$$

Dès lors, il est possible d'approcher $\partial_y \sigma^{xy}$ en $(x_{i-1/2}, y_j, z_k)$ avec :

$$\partial_y \sigma^{xy}(x_{i-1/2}, y_j, z_k) \sim \frac{\overline{\sigma^{xy}}_{ijk} - \overline{\sigma^{xy}}_{i,j-1,k}}{\delta y} = \frac{\sigma_{i,j+1,k}^{xy} + \sigma_{i-1,j+1,k}^{xy} - \sigma_{i,j-1,k}^{xy} - \sigma_{i-1,j-1,k}^{xy}}{4 \delta y},$$

en suivant la même approche, on obtient :

$$\partial_z \sigma^{xz}(x_{i-1/2}, y_j, z_k) \sim \frac{\sigma_{ij,k+1}^{xz} + \sigma_{i-1,j,k+1}^{xz} - \sigma_{ij,k-1}^{xz} - \sigma_{i-1,j,k-1}^{xz}}{4 \delta z}.$$

De la même manière on a :

$$\begin{aligned} \partial_x \sigma^{xy}(x_i, y_{j-1/2}, z_k) &\sim \frac{\sigma_{i+1,jk}^{xy} + \sigma_{i+1,j-1,k}^{xy} - \sigma_{i-1,jk}^{xy} - \sigma_{i-1,j-1,k}^{xy}}{4 \delta x}, \\ \partial_z \sigma^{yz}(x_i, y_{j-1/2}, z_k) &\sim \frac{\sigma_{ij,k+1}^{yz} + \sigma_{i,j-1,k+1}^{yz} - \sigma_{ij,k-1}^{yz} - \sigma_{i,j-1,k-1}^{yz}}{4 \delta z}, \end{aligned}$$

et enfin :

$$\begin{aligned} \partial_x \sigma^{xz}(x_i, y_j, z_{k-1/2}) &\sim \frac{\sigma_{i+1,jk}^{xz} + \sigma_{i+1,j,k-1}^{xz} - \sigma_{i-1,jk}^{xz} - \sigma_{i-1,j,k-1}^{xz}}{4 \delta x}, \\ \partial_y \sigma^{yz}(x_i, y_j, z_{k-1/2}) &\sim \frac{\sigma_{i,j+1,k}^{yz} + \sigma_{i,j+1,k-1}^{yz} - \sigma_{i,j-1,k}^{yz} - \sigma_{i,j-1,k-1}^{yz}}{4 \delta y}. \end{aligned}$$

Remarquons enfin que cette méthode de calcul de $\nabla \cdot \sigma$ induit un découplage entre la valeur des dérivées calculées en un point et la valeur de cette même dérivée sur les points voisins. Si l'on considère l'exemple de l'approximation de $\partial_y \sigma^{xy}$, la valeur approchée de cette dérivée obtenue en $(x_i, y_{j-1/2}, z_k)$ ne dépend pas des mêmes valeurs de σ que l'approximation de cette même dérivée évaluée en $(x_i, y_{j+1/2}, z_k)$. Ceci est dû au fait que l'on utilise ici des dérivées centrées. On verra par la suite que ce traitement de $\nabla \cdot \sigma$ peut entraîner des oscillations d'origine numérique sur la contrainte dans certaines situations.

7.2.4 Traitement de la loi de comportement

La loi de comportement (7.1c) est traitée en deux étapes comme on l'a décrit dans la section 7.1. La deuxième étape nécessite la discrétisation en espace de 6 équations de convection-diffusion correspondant à l'équation (7.6) appliquée à chacune des composantes du tenseur d'extra-contrainte σ_p . Le traitement numérique accordé ici à ces problèmes de convection-diffusion est identique à celui décrit dans le Chapitre 3 pour le problème du suivi d'un mélange. La première étape du splitting, quand à elle, consiste en la résolution en chaque point du maillage d'un problème local (pas de dérivées en espace pour σ_p), couplant les différentes composantes de σ_p . Bien que locale, cette étape nécessite le calcul de ∇V aux noeuds où est évaluée la variable σ_p (noeuds (x_i, y_j, z_k)). Ce terme est nécessaire à au calcul de la matrice M_a et du terme source incluant $D[V]$ dans l'équation (7.5).

7.2.4.1 Calcul de ∇V

Tout d'abord, développons le terme ∇V :

$$\nabla V = \begin{pmatrix} \partial_x u & \partial_y u & \partial_z u \\ \partial_x v & \partial_y v & \partial_z v \\ \partial_x w & \partial_y w & \partial_z w \end{pmatrix}. \quad (7.22)$$

On souhaite approcher ce terme en (x_i, y_j, z_k) (noeuds de σ_p). Or, les vitesses u , v et w sont connues respectivement en $(x_{i-1/2}, y_j, z_k)$, $(x_i, y_{j-1/2}, z_k)$ et $(x_i, y_j, z_{k-1/2})$. Les termes diagonaux de (7.22) peuvent donc être approchés directement par différences finies aux points (x_i, y_j, z_k) :

$$\begin{aligned} \partial_x u(x_i, y_j, z_k) &= \frac{u_{i+1,j,k} - u_{ijk}}{\delta x}, \\ \partial_y v(x_i, y_j, z_k) &= \frac{v_{i,j+1,k} - v_{ijk}}{\delta y}, \\ \partial_z w(x_i, y_j, z_k) &= \frac{w_{ij,k+1} - w_{ijk}}{\delta z}. \end{aligned}$$

Les autres termes nécessitent le calcul de moyennes sur u , v et w afin d'être évalués aux bon points. On détaille ici l'approximation de $\partial_y u$. Ce problème est similaire à celui rencontré à la section 7.1b pour le calcul de $\nabla \cdot \sigma$. En fait, on discrétise ici l'opérateur transposé de celui traité dans la section 7.1b. On procède donc de la même manière en introduisant :

$$u(x_i, y_{j+1/2}, z_k) \sim \bar{u}_{ijk} = \frac{u_{ijk} + u_{i+1,j,k} + u_{i,j+1,k} + u_{i+1,j+1,k}}{4},$$

la dérivée en y est donc approchée par :

$$\partial_y u(x_i, y_j, z_k) \sim \frac{\bar{u}_{ijk} - \bar{u}_{i,j-1,k}}{\delta y} = \frac{u_{i,j+1,k} + u_{i+1,j+1,k} - u_{i,j-1,k} - u_{i+1,j-1,k}}{4\delta y}.$$

Exactement de la même façon on obtient :

$$\begin{aligned} \partial_z u(x_i, y_j, z_k) &\sim \frac{u_{ij,k+1} + u_{i+1,j,k+1} - u_{ij,k-1} - u_{i+1,j,k-1}}{4\delta z}, \\ \partial_x v(x_i, y_j, z_k) &\sim \frac{v_{i+1,j,k} + v_{i+1,j+1,k} - v_{i-1,j,k} - v_{i-1,j+1,k}}{4\delta x}, \\ \partial_z v(x_i, y_j, z_k) &\sim \frac{v_{ij,k+1} + v_{i,j+1,k+1} - v_{ij,k-1} - v_{i,j+1,k-1}}{4\delta z}, \\ \partial_x w(x_i, y_j, z_k) &\sim \frac{w_{i+1,j,k} + w_{i+1,j,k+1} - w_{i-1,j,k} - w_{i-1,j,k+1}}{4\delta x}, \\ \partial_y w(x_i, y_j, z_k) &\sim \frac{w_{i,j+1,k} + w_{i,j+1,k+1} - w_{i,j-1,k} - w_{i,j-1,k+1}}{4\delta y}. \end{aligned}$$

7.3 Domaines à géométrie complexe, méthode de pénalisation

On a vu au chapitre 6 que la géométrie des canaux que l'on souhaite étudier n'est pas toujours simple. Bien que les murs soient droits, on peut vouloir étudier des écoulements dans un domaine qui ne soit pas rectangulaire, comme par exemple des jonctions micro-fluidiques. La méthode de discrétisation décrite au dessus, ne permet, à priori, que de traiter le cas où le domaine est rectangulaire. Les méthodes de pénalisation [48] permettent de prendre en compte des conditions aux limites plus complexes à l'intérieur d'un domaine de calcul rectangulaire. Ces méthodes nécessitent l'ajout de

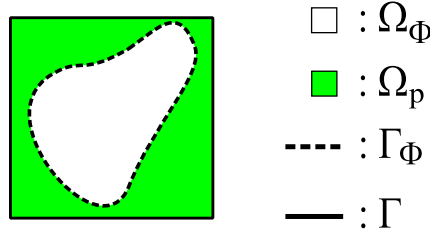


FIGURE 7.4 – Différents domaines en jeu dans les méthodes de pénalisation décrites dans ce chapitre.

termes dans les équations, et engendrent une augmentation de la taille mémoire nécessaire au calcul, car le domaine de calcul complet Ω doit contenir à la fois le domaine "physique" Ω_Φ et le domaine "pénalisé" Ω_p . On décrira ici brièvement le principe de la méthode de pénalisation pour le problème elliptique scalaire discrétisé au chapitre 3. Ce problème nécessite l'implémentation de conditions de Dirichlet inhomogènes ou de Neumann homogènes sur le bord du domaine physique Γ_m .

7.3.1 Principe

Pour la suite on introduira les notations suivantes (voir Fig. 7.4) : Ω_Φ représentera le domaine physique, Ω_p le domaine pénalisé, $\Omega = \Omega_\Phi \cup \Omega_p$ le domaine de calcul, Γ_ϕ la frontière du domaine Ω_Φ et Γ la frontière du domaine Ω . La formulation de la méthode présentée dans [3] permet de traiter de manière générale des problèmes du type :

$$a S - \nabla \cdot (K \nabla S) = f, \quad \text{dans : } \Omega_\Phi, \quad (7.23)$$

et avec pour conditions aux limites soit :

$$S|_{\Gamma_\Phi} = S^*, \quad (7.24)$$

soit :

$$\partial_{\vec{n}} S|_{\Gamma_\Phi} = 0. \quad (7.25)$$

La méthode consiste à reformuler le problème dans Ω de la manière suivante :

$$a^* S - \nabla \cdot (K^* \nabla S) = f^*, \quad \text{dans : } \Omega$$

avec comme conditions aux limites :

$$S|_{\Gamma} = 0.$$

Les valeurs a^* , K^* et f^* dans le domaine "pénalisé" Ω_p vont dépendre de la condition que l'on souhaite imposer sur le bord Γ_Φ , immergé dans Ω . Si l'on souhaite imposer sur Γ_Φ la condition de Dirichlet 7.24 il faut :

$$\begin{aligned} a^* &= a + \frac{1}{c} \mathbf{1}_{\Omega_p}, \\ K^* &= K, \\ f^* &= f + \frac{1}{c} S^* \mathbf{1}_{\Omega_p}, \end{aligned}$$

où c est un paramètre arbitrairement petit devant 1. Dans la pratique, on dimensionne c sur les valeurs diagonales de la matrice M associée au système linéaire construit après discrétisation des équations :

$$c = 10^{-15} \max(\text{diag}(M)). \quad (7.26)$$

Si l'on souhaite imposer la condition de Neumann (7.25) il faut :

$$\begin{aligned} a^* &= a(1 - \mathbf{1}_{\Omega_p}), \\ K^* &= K(\mathbf{1}_{\Omega_\Phi} + c\mathbf{1}_{\Omega_p}), \\ f^* &= f(1 - \mathbf{1}_{\Omega_p}). \end{aligned}$$

Cette méthode possède l'avantage de ne pas nécessiter de modification de la discrétisation de l'équation (7.23), seuls les coefficients a , K et f étant modifiés pour assurer la prise en compte des conditions aux limites (7.22) et (7.24).

7.3.2 Validation du code

Dans cette section on valide le code que l'on a écrit à partir de la discrétisation de l'équation (7.23) et de la méthode de pénalisation décrite ci-dessus.

7.3.2.1 Problème elliptique scalaire : condition de Dirichlet

On considère le cas test correspondant à la résolution d'une équation de Laplace dans un domaine circulaire :

$$\Delta S = f, \quad \text{dans : } \Omega_\Phi = \{(x, y) \in [-1.5, 1.5] \times [-1.5, 1.5] \mid x^2 + y^2 < 1\},$$

On choisit comme terme source :

$$f(x, y) = -4.$$

On impose sur Γ_ϕ :

$$S|_{\Gamma_\Phi} = 0.$$

La solution exacte du problème (7.23) s'écrit alors :

$$S_{\text{exact}}(x, y) = 1 - x^2 - y^2,$$

et le gradient de la solution exacte s'écrit :

$$\nabla S_{\text{exact}}(x, y) = \begin{pmatrix} -2x \\ -2y \end{pmatrix}.$$

Le tableau 7.1b résume les erreurs commises par la méthode numérique sur la solution et sur le gradient de la solution. Toutes les erreurs sont calculées uniquement dans le domaine "physique" Ω_Φ . On voit sur le tableau 7.1b que la méthode est globalement d'ordre 1 pour la solution et d'un ordre compris entre 1/2 et 1 pour le gradient. La pénalisation engendre une perte de précision sur la méthode numérique, qui elle, est d'ordre 2.

Résolution	Erreur solution (L^2)	Ordre	Erreur gradient (L^2)	Ordre
32×32	$4.096e^{-2}$	-	$2.919e^{-2}$	-
64×64	$2.283e^{-2}$	0.8	$1.410e^{-2}$	1
128×128	$1.009e^{-2}$	1.1	$1.112e^{-2}$	0.3
256×256	$5.804e^{-3}$	0.8	$6.384e^{-3}$	0.8

FIGURE 7.5 – Précision de la méthode numérique pour la discrétisation de l'équation de Laplace avec pénalisation sur un cercle.

Ces résultats de perte de précision sont connus pour la méthode de pénalisation "classique", et on peut trouver d'autres tests dans [3], [51]. Des méthodes récentes [27] de bords immergés pourraient donner des résultats plus performants, cependant, la géométrie des domaines que l'on traitera par la suite sera bien moins complexe (murs rectilignes) que celle que l'on a testée ici.

7.3.2.2 Problème elliptique scalaire : condition de Neumann

Dans cette section on détaille un cas-test de problème elliptique avec une condition de Neumann homogène :

$$S - \delta S = f, \quad \text{dans : } \Omega_\Phi = \{(x, y) \in [-1.5, 1.5] \times [-1.5, 1.5] \mid x^2 + y^2 < r_0\},$$

en prenant comme terme source :

$$f(x, y) = \left(\frac{r^2}{r_0^2} - 1\right)^2 - 8 \left(2 \frac{r^2}{r_0^2} - 1\right)$$

où $r^2 = x^2 + y^2$, et comme condition aux limites :

$$\partial_{\vec{n}} S|_{\Gamma_\Phi} = 0.$$

La solution exacte de ce problème s'écrit alors :

$$S_{\text{exact}}(x, y) = \left(\frac{r^2}{r_0^2} - 1\right)^2,$$

et le gradient :

$$\nabla S_{\text{exact}}(x, y) = \begin{pmatrix} 4 \frac{1}{r_0^2} \left(\frac{r^2}{r_0^2} - 1\right) x \\ 4 \frac{1}{r_0^2} \left(\frac{r^2}{r_0^2} - 1\right) y \end{pmatrix}.$$

Le tableau 7.6 résume les tests effectués pour $r_0^2 = \pi/3$. On constate encore une fois une perte de précision liée à la pénalisation. Les résultats semblent toutefois ici meilleurs que ceux montrés sur la pénalisation d'une condition de Dirichlet. D'autres cas tests pourraient être effectués afin de confirmer ou non ce fait, toutefois le but ici était de montrer la convergence de la méthode implémentée dans le code.

Résolution	Erreur solution (L^2)	Ordre	Erreur gradient (L^2)	Ordre
32×32	$3.309e^{-3}$	-	$6.462e^{-3}$	-
64×64	$1.423e^{-3}$	1.2	$3.262e^{-3}$	1
128×128	$5.252e^{-4}$	1.4	$1.098e^{-3}$	1.6
256×256	$2.603e^{-4}$	1	$3.809e^{-4}$	1.5

FIGURE 7.6 – Précision de la méthode numérique pour le problème (7.23) avec pénalisation Neumann sur un cercle.

7.4 Problèmes de stabilité

Dans cette section nous traitons de deux questions de stabilité numérique. La première section concerne une condition nécessaire de stabilité sur le pas de temps due au couplage explicite entre l'équation de conservation de la quantité de mouvement et la loi de comportement. La deuxième partie traite des oscillations d'origine numérique que l'on a constaté sur la contrainte lors de simulations sur le modèle "Poiseuille" 2D dès lors qu'une discontinuité sur la contrainte apparaît.

7.4.1 Condition de stabilité en temps

On considère dans cette section une version simplifiée du modèle (7.1a-7.1c) :

$$\begin{cases} \alpha \Delta V + \nabla \cdot \sigma_p = \nabla P, & (7.27a) \\ \nabla \cdot V = 0, & (7.27b) \\ \partial_t \sigma_p + \sigma_p = D[V]. & (7.27c) \end{cases}$$

Discretisons en temps ce modèle en utilisant la même approche qu'à la section 7.1. On obtient :

$$\begin{cases} \alpha \Delta V^n + \nabla \cdot \sigma_p^n = \nabla P^n, \\ \nabla \cdot V^n = 0, \\ \sigma_p^{n+1} = \sigma_p^n - \delta t (\sigma_p^n - D[V^n]). \end{cases}$$

Pour la suite on ne traite que de la stabilité du schéma semi-discretisé en temps. On pourra généraliser ce qui suit si les opérateurs en espace discrets vérifient un certain nombre de propriétés élémentaires de transposition. Enfin, on ne traite pas de la stabilité directement sur σ_p , mais sur la variable X représentant l'accroissement en temps de la contrainte σ_p . Il est défini par :

$$X = \sigma_p - D[V], \quad (7.29)$$

la stabilité sur X étant une condition nécessaire à la stabilité du système. Reformulons alors le système semi-discretisé en temps :

$$\begin{cases} \alpha \Delta V^n + \nabla \cdot \sigma_p^n = \nabla P^n, & (7.30a) \\ \nabla \cdot V^n = 0, & (7.30b) \\ \sigma_p^{n+1} = \sigma_p^n - \delta t (X^n), & (7.30c) \\ X^n = \sigma_p^n - D[V^n]. & (7.30d) \end{cases}$$

On montre la proposition suivante (pour la suite $\|\cdot\|$ représente la norme L^2 et $\langle \cdot, \cdot \rangle$ le produit scalaire L^2) :

Proposition 1. *Si :*

$$\delta t < \frac{1}{2}, \quad \text{et} \quad \delta t < \frac{\alpha^2}{2}, \quad (7.31)$$

alors $\|X^n\|$ est borné indépendamment du temps.

Afin de montrer ce résultat, il est nécessaire de démontrer deux inégalités. La première consiste à donner une borne du taux d'accroissement en temps du tenseur des taux de déformations en fonction du taux d'accroissement de la contrainte.

Lemme 2. *On a pour tout $n \geq 0$ l'inégalité suivante :*

$$\|\nabla V^{n+1} - \nabla V^n\|^2 \leq \frac{1}{\alpha^2} \|\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n\|^2. \quad (7.32)$$

Démonstration. On obtient cette inégalité en soustrayant l'équation (7.30a) évaluée en $n + 1$ avec la même équation évaluée en n :

$$\alpha \Delta(V^{n+1} - V^n) + \nabla \cdot (\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n) = \nabla(P^{n+1} - P^n), \quad (7.33)$$

On multiplie à présent (7.33) par $V^{n+1} - V^n$ et on intègre le tout sur Ω :

$$\alpha \langle \Delta(V^{n+1} - V^n), V^{n+1} - V^n \rangle + \langle \nabla \cdot (\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n), V^{n+1} - V^n \rangle = \langle P^{n+1} - P^n, V^{n+1} - V^n \rangle,$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ représente le produit scalaire dans L^2 . En effectuant des intégrations par parties on obtient :

$$\begin{aligned} -\alpha \|\nabla V^{n+1} - \nabla V^n\|^2 - \langle \sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n, D[V^{n+1}] - D[V^n] \rangle + \int_{\partial\Omega} (V^{n+1} - V^n) \cdot (\nabla(V^{n+1} - V^n) + \sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n) \vec{n} \, d\Gamma \\ = \int_{\partial\Omega} (P^{n+1} - P^n) (V^{n+1} - V^n) \cdot \vec{n} \, d\Gamma - \langle P^{n+1} - P^n, \nabla \cdot V^{n+1} - \nabla \cdot V^n \rangle. \end{aligned} \quad (7.34)$$

D'une part l'écoulement est incompressible, ce qui implique $\nabla \cdot V^{n+1} = \nabla \cdot V^n = 0$. D'autre part les conditions aux limites sont considérées ici constantes au cours du temps, ce qui implique $(V^{n+1} - V^n)|_\Gamma = 0$. L'équation (7.34) peut donc être réécrite :

$$\begin{aligned} \alpha \|\nabla V^{n+1} - \nabla V^n\|^2 &= -\langle \sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n, D[V^{n+1}] - D[V^n] \rangle \\ &= -\frac{1}{2} (\langle \sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n, \nabla V^{n+1} + (\nabla V^{n+1})^t - (\nabla V^n + (\nabla V^n)^t) \rangle) \\ &= -\frac{1}{2} (\langle \sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n, \nabla V^{n+1} - \nabla V^n \rangle + \langle \sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n, (\nabla V^{n+1} - \nabla V^n)^t \rangle) \\ &= -\langle \sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n, \nabla V^{n+1} - \nabla V^n \rangle, \end{aligned} \quad (7.35)$$

On obtient donc :

$$\alpha \|\nabla V^{n+1} - \nabla V^n\|^2 = |\langle \sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n, \nabla V^{n+1} - \nabla V^n \rangle|.$$

D'après l'inégalité de Young on a :

$$|\langle \sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n, \nabla V^{n+1} - \nabla V^n \rangle| \leq \frac{\alpha}{2} \|\nabla V^{n+1} - \nabla V^n\|^2 + \frac{1}{2\alpha} \|\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n\|^2. \quad (7.36)$$

D'où

$$\begin{aligned} \alpha \|\nabla V^{n+1} - \nabla V^n\|^2 &\leq \frac{\alpha}{2} \|\nabla V^{n+1} - \nabla V^n\|^2 + \frac{1}{2\alpha} \|\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n\|^2, \\ \frac{\alpha}{2} \|\nabla V^{n+1} - \nabla V^n\|^2 &\leq \frac{1}{2\alpha} \|\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n\|^2, \\ \|\nabla V^{n+1} - \nabla V^n\|^2 &\leq \frac{1}{\alpha^2} \|\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n\|^2. \end{aligned}$$

□

Une autre inégalité très utile consiste à donner un signe au produit scalaire entre l'accroissement des taux de la déformation et l'accroissement de la contrainte.

Lemme 3. On a également, pour tout $n \geq 0$:

$$\langle \sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n, \nabla V^{n+1} - \nabla V^n \rangle < 0. \quad (7.37)$$

Démonstration. Cette inégalité se démontre à partir de (7.35) :

$$\langle \sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n, \nabla V^{n+1} - \nabla V^n \rangle = -\alpha \|\nabla V^{n+1} - \nabla V^n\|^2 \leq 0. \quad (7.38)$$

□

Passons à présent à la démonstration de la proposition 1.

Démonstration. On commence par reformuler les équations (7.30c) et (7.30d) afin d'obtenir le schéma en temps directement sur X . En ajoutant de part et d'autre de l'équation (7.30c) le terme $(D[V^{n+1}] - D[V^n])$, on obtient :

$$\sigma_p^{n+1} - D[V^{n+1}] = \sigma_p^n - D[V^n] - \delta t X^n - (D[V^{n+1}] - D[V^n]).$$

Par définition de X , on a alors :

$$X^{n+1} = X^n - \delta t X^n - (D[V^{n+1}] - D[V^n]). \quad (7.39)$$

D'autre part on a grâce à (7.30d) :

$$X^n = -\frac{\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n}{\delta t}. \quad (7.40)$$

Effectuons le produit scalaire de l'équation (7.39) par X^{n+1} :

$$\langle X^{n+1} - X^n, X^{n+1} \rangle = -\delta t \langle X^n, X^{n+1} \rangle - \langle D[V^{n+1}] - D[V^n], X^{n+1} \rangle. \quad (7.41)$$

On ajoute et on soustrait le terme $\langle D[V^{n+1}] - D[V^n], X^n \rangle$ au second membre de (7.41) :

$$\begin{aligned} \langle X^{n+1} - X^n, X^{n+1} \rangle &= -\delta t \langle X^n, X^{n+1} \rangle - \langle D[V^{n+1}] - D[V^n], X^{n+1} - X^n \rangle \\ &\quad - \langle D[V^{n+1}] - D[V^n], X^n \rangle. \end{aligned}$$

Grâce à (7.40) on a :

$$\begin{aligned} \langle X^{n+1} - X^n, X^{n+1} \rangle &= -\delta t \langle X^n, X^{n+1} \rangle - \langle D[V^{n+1}] - D[V^n], X^{n+1} - X^n \rangle \\ &\quad + \frac{1}{\delta t} \langle D[V^{n+1}] - D[V^n], \sigma_p^{n+1} - \sigma_p^n \rangle. \end{aligned}$$

L'inégalité (7.37) permet alors d'écrire :

$$\langle X^{n+1} - X^n, X^{n+1} \rangle \leq -\delta t \langle X^n, X^{n+1} \rangle - \langle D[V^{n+1}] - D[V^n], X^{n+1} - X^n \rangle. \quad (7.42)$$

D'une part :

$$\langle X^{n+1} - X^n, X^{n+1} \rangle = \frac{1}{2} (\|X^{n+1}\|^2 - \|X^n\|^2) + \frac{1}{2} \|X^{n+1} - X^n\|^2. \quad (7.43)$$

D'autre part, d'après l'inégalité de Young :

$$\begin{aligned} -\langle D[V^{n+1}] - D[V^n], X^{n+1} - X^n \rangle &\leq |\langle D[V^{n+1}] - D[V^n], X^{n+1} - X^n \rangle| \\ &\leq \|D[V^{n+1}] - D[V^n]\|^2 + \frac{1}{4} \|X^{n+1} - X^n\|^2. \end{aligned} \quad (7.44)$$

Grâce aux équations (7.43) et (7.44) on obtient :

$$\frac{1}{2} (\|X^{n+1}\|^2 - \|X^n\|^2) \leq -\delta t \langle X^n, X^{n+1} \rangle + \|D[V^{n+1}] - D[V^n]\|^2 - \frac{1}{4} \|X^{n+1} - X^n\|^2. \quad (7.45)$$

Par hypothèse on a $\delta t \leq \frac{1}{2}$ donc $-\frac{1}{4} \leq -\frac{\delta t}{2}$. l'inégalité (7.45) devient :

$$\frac{1}{2} (\|X^{n+1}\|^2 - \|X^n\|^2) \leq -\delta t \langle X^n, X^{n+1} \rangle + \|D[V^{n+1}] - D[V^n]\|^2 - \frac{\delta t}{2} \|X^{n+1} - X^n\|^2.$$

Grâce aux équations (7.32) et (7.40), on obtient :

$$\frac{1}{2} (\|X^{n+1}\|^2 - \|X^n\|^2) \leq -\delta t \langle X^n, X^{n+1} \rangle + \frac{\delta t^2}{\alpha^2} \|X^n\|^2 - \frac{\delta t}{2} \|X^{n+1} - X^n\|^2.$$

Par hypothèse on a aussi part $\delta t \leq \frac{\alpha^2}{2}$ donc $\frac{\delta t^2}{\alpha^2} \leq \frac{\delta t}{2}$. Ce qui donne :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} (\|X^{n+1}\|^2 - \|X^n\|^2) &\leq -\delta t \langle X^n, X^{n+1} \rangle + \frac{\delta t}{2} \|X^n\|^2 - \frac{\delta t}{2} \|X^{n+1} - X^n\|^2 \\ &\leq -\frac{\delta t}{2} (2 \langle X^n, X^{n+1} \rangle - \|X^n\|^2 + \|X^{n+1} - X^n\|^2) \\ &\leq -\frac{\delta t}{2} (2 \langle X^n, X^{n+1} \rangle - \|X^n\|^2 + \|X^{n+1}\|^2 + \|X^n\|^2 - 2 \langle X^n, X^{n+1} \rangle) \\ &\leq -\frac{\delta t}{2} \|X^{n+1}\|^2 \\ &\leq 0, \end{aligned}$$

et donc finalement le résultat attendu :

$$\|X^{n+1}\| \leq \|X^n\|.$$

□

Notons que la condition de stabilité démontrée ici c'est pas une condition suffisante de stabilité du système (7.27a- 7.27c) mais une condition nécessaire. Cette condition émerge directement du couplage explicite entre la loi de comportement (7.27c) et l'équation de conservation de la quantité de mouvement (7.27c). Si on considère le modèle complet (7.1a- 7.1c) , la démonstration est apparaît beaucoup plus compliquée du fait de l'ajout des termes de dérivée objective. Ce problème n'est à notre connaissance pas encore résolu.

7.4.2 Bruit numérique pour $\beta = 0$

On étudie ici le modèle 2D "Poiseuille" (6.43a- 6.43b) (voir la discrétisation en annexe D) :

$$\begin{cases} \alpha \Delta_{yz} u + \partial_y \sigma_p^{xy} + \partial_z \sigma_p^{xz} = \Pi, \\ \hat{\sigma}_p + \sigma_p + \kappa \sigma_p^2 = 2 (\partial_y u (\delta_2^1 + \delta_1^2) + 2 \partial_z u (\delta_3^1 + \delta_1^3)) + \beta \Delta_{yz} \sigma_p. \end{cases}$$

On fixe les paramètres suivants :

$$\alpha = 0.013, \quad (7.47)$$

$$a = 0.9, \quad (7.48)$$

$$\Pi = 9. \quad (7.49)$$

On prend comme donnée initiale $\sigma_p = 0$ pour tous les calculs montrés ici. La Fig. 7.8 montre les résultats des simulations numériques effectuées avec $\beta = 0$, et pour différentes résolutions :

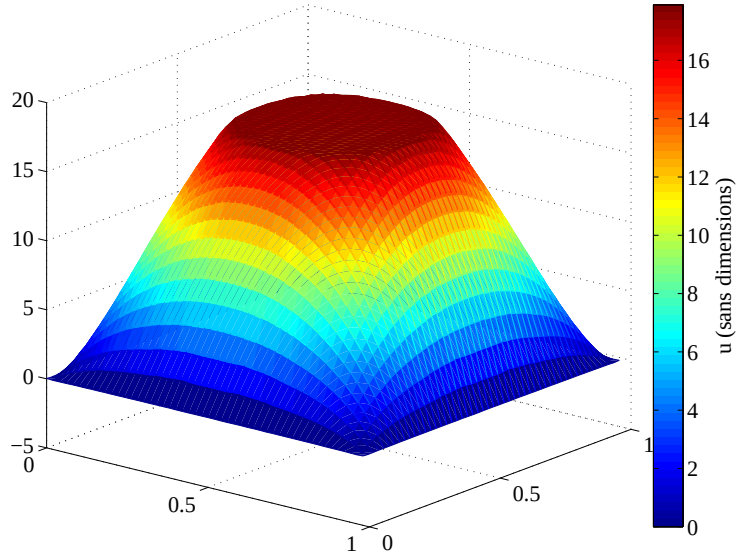


FIGURE 7.7 – Profil de vitesses $u(y, z)$ obtenu grâce à une simulation numérique sur le modèle Poiseuille 2D sans diffusion ($\beta = 0$). Résolution du maillage : $N_y \times N_z = 50 \times 50$.

$N_x \times N_y = [50 \times 50, 100 \times 100, 150 \times 150]$. On peut constater sur la Fig. 7.7 que les composantes σ_p^{xy} et σ_p^{xz} de l'extra-contrainte présentent des oscillations dont les caractéristiques dépendent du maillage. Ces oscillations sont donc d'origine numérique. Il est remarquable que le profil de vitesses ne semble pas vraiment affecté par ces oscillations (Fig. 7.7). Toutefois il est nécessaire de corriger ce problème pour la suite car ces oscillations affectent grandement les profils cisaillement/contrainte (courbes d'écoulement) et conduisent à des comportements non-physiques (viscosités apparentes négatives sur la courbe d'écoulement).

La solution envisagée ici est l'ajout systématique d'un terme de diffusion avec un coefficient de diffusion β^* dont la valeur tend vers 0 lorsque les pas d'espace δx et δy trendent vers 0 (pour garder la consistance du schéma numérique pour $\beta = 0$). On envisage ici deux valeurs pour β :

$$\begin{aligned} \beta^* &= \min(\delta x, \delta y)^2, \\ \beta^* &= \min(\delta x, \delta y)^{3/2}. \end{aligned} \quad (7.50)$$

On reprend les paramètres précédents et on effectue des simulations numériques pour ces deux valeurs de β^* . Les Fig. 7.9 et 7.10 montrent les résultats sur la contrainte de ces simulations. On voit que si β^* est trop petit ($\beta^* = \min(\delta x, \delta y)^2$), les oscillations sur la contrainte ne disparaissent pas tout à fait. Si au contraire β^* est suffisamment grand, des oscillations observées précédemment sont totalement gommées. Il est tout de même nécessaire de faire attention à ne pas choisir un β^* trop important, car la diffusion peut avoir des effets non-négligeables à proximité de la zone de séparation entre la phase fluide et le bouchon visqueux formé au centre du canal (zone de discontinuité sur l'extra-contrainte σ_p). On verra en fait au chapitre 8 que la diffusion est tout de même nécessaire dans le modèle pour avoir une description de l'écoulement qui soit indépendante de la condition initiale.

Par la suite lorsque l'on étudiera le modèle avec un terme de diffusion, il sera important de s'assurer que la valeur du coefficient de diffusion réel β ne soit pas plus petite que la valeur du coefficient de diffusion artificiel β^* . On envisagera par la suite des valeurs de β de l'ordre de 10^{-3} , ce qui implique qu'il faut des résolutions supérieures à $N_x \times N_y = 50 \times 50$ pour avoir $\beta^* < \beta$, avec $\beta^* = \min(\delta x, \delta y)^{3/2}$.

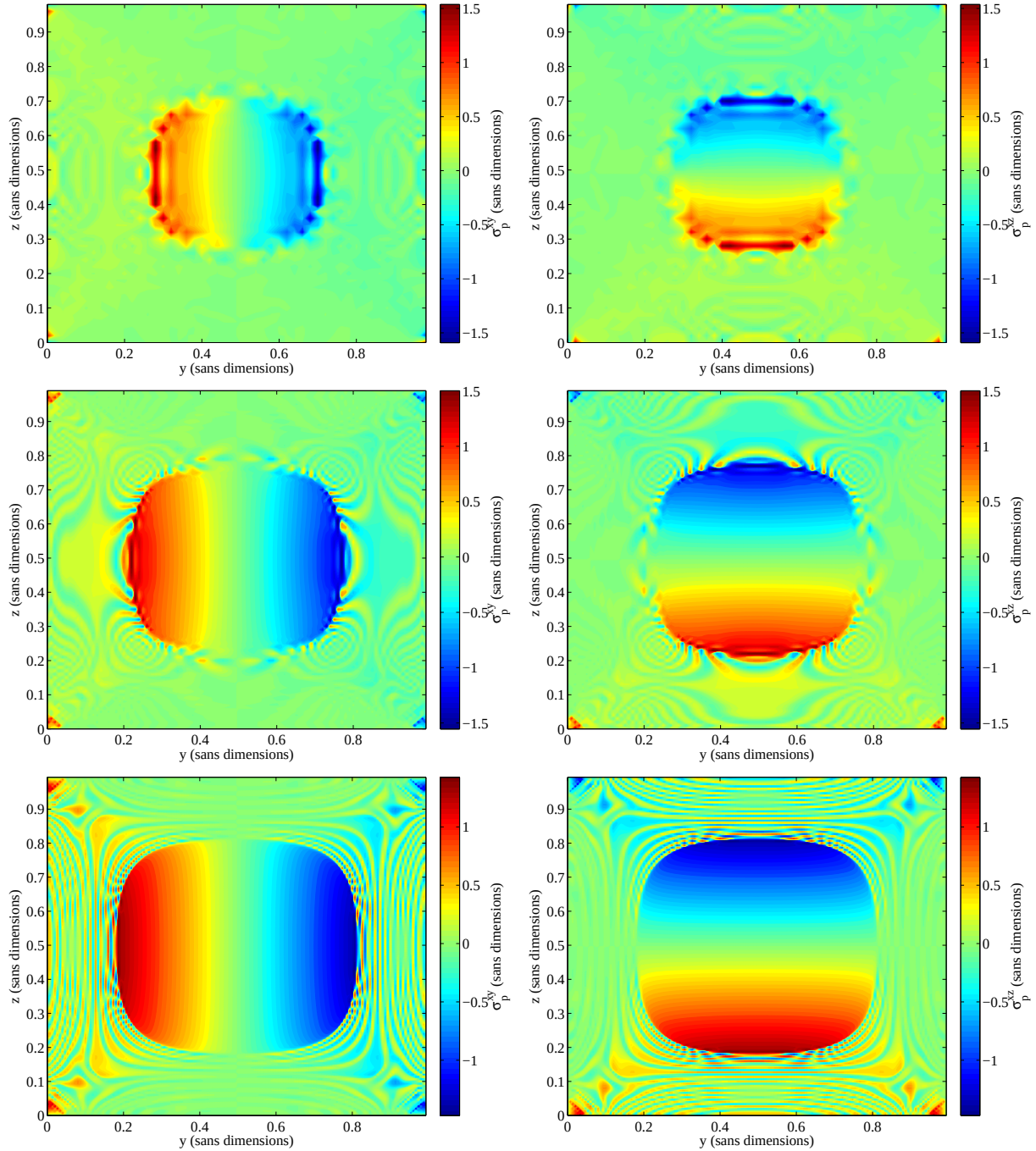


FIGURE 7.8 – Cartes des deux composantes $\sigma_p^{xy}(y, z)$ (à gauche) et $\sigma_p^{xz}(y, z)$ (à droite) de l'extra-contrainte obtenues à l'état stationnaire sur des simulations numériques sur le modèle Poiseuille 2D sans diffusion ($\beta = 0$). De haut en bas : $N_y \times N_z = [50 \times 50, 100 \times 100, 150 \times 150]$.

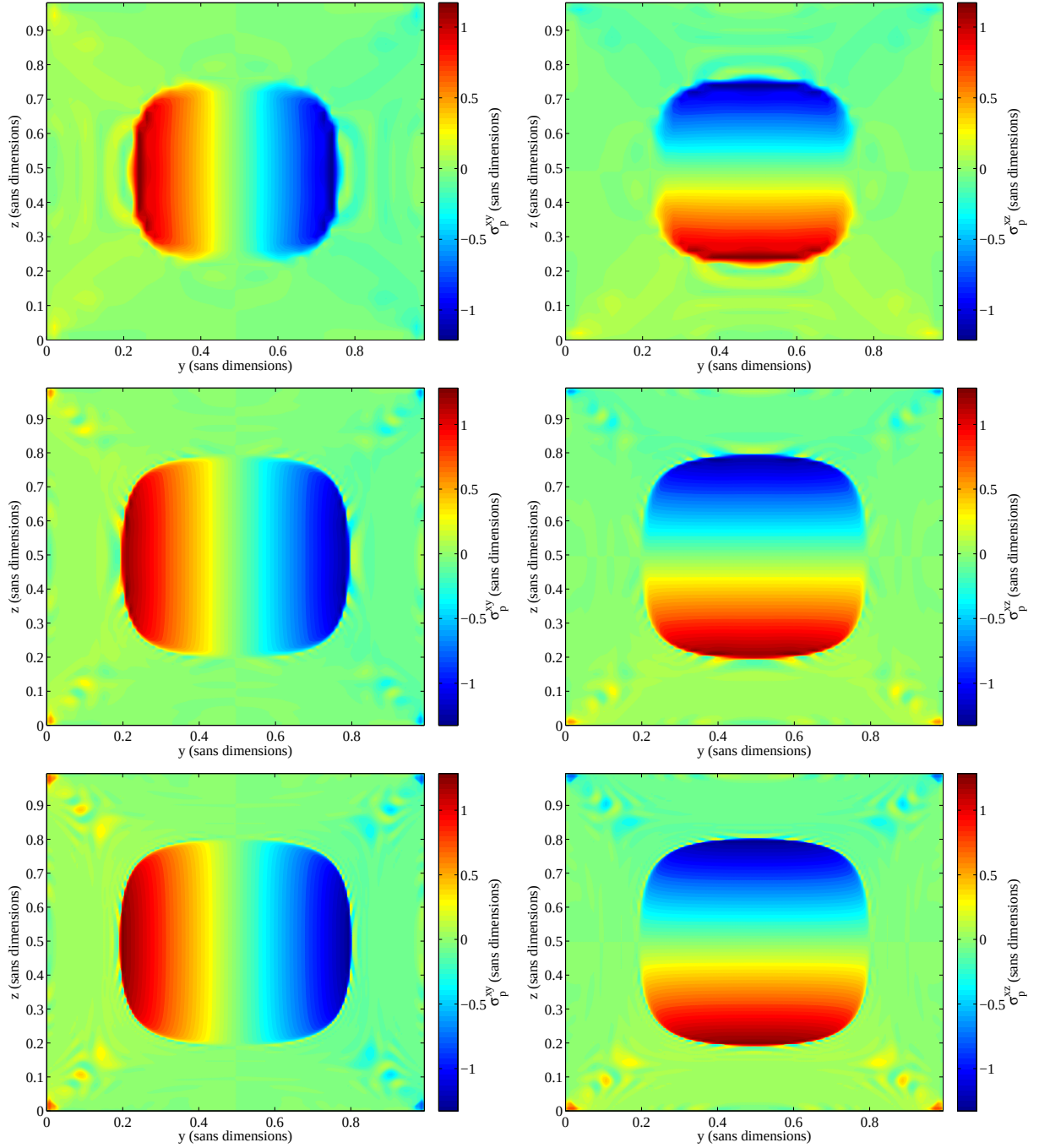


FIGURE 7.9 – Cartes des deux composantes $\sigma_p^{xy}(y, z)$ (à gauche) et $\sigma_p^{xz}(y, z)$ (à droite) de l'extra-contraainte obtenues à l'état stationnaire sur des simulations numériques sur le modèle Poiseuille 2D avec diffusion ($\beta^* = \min(\delta x, \delta y)^2$). De haut en bas : $N_y \times N_z = [50 \times 50 \ 100 \times 100 \ 150 \times 150]$.

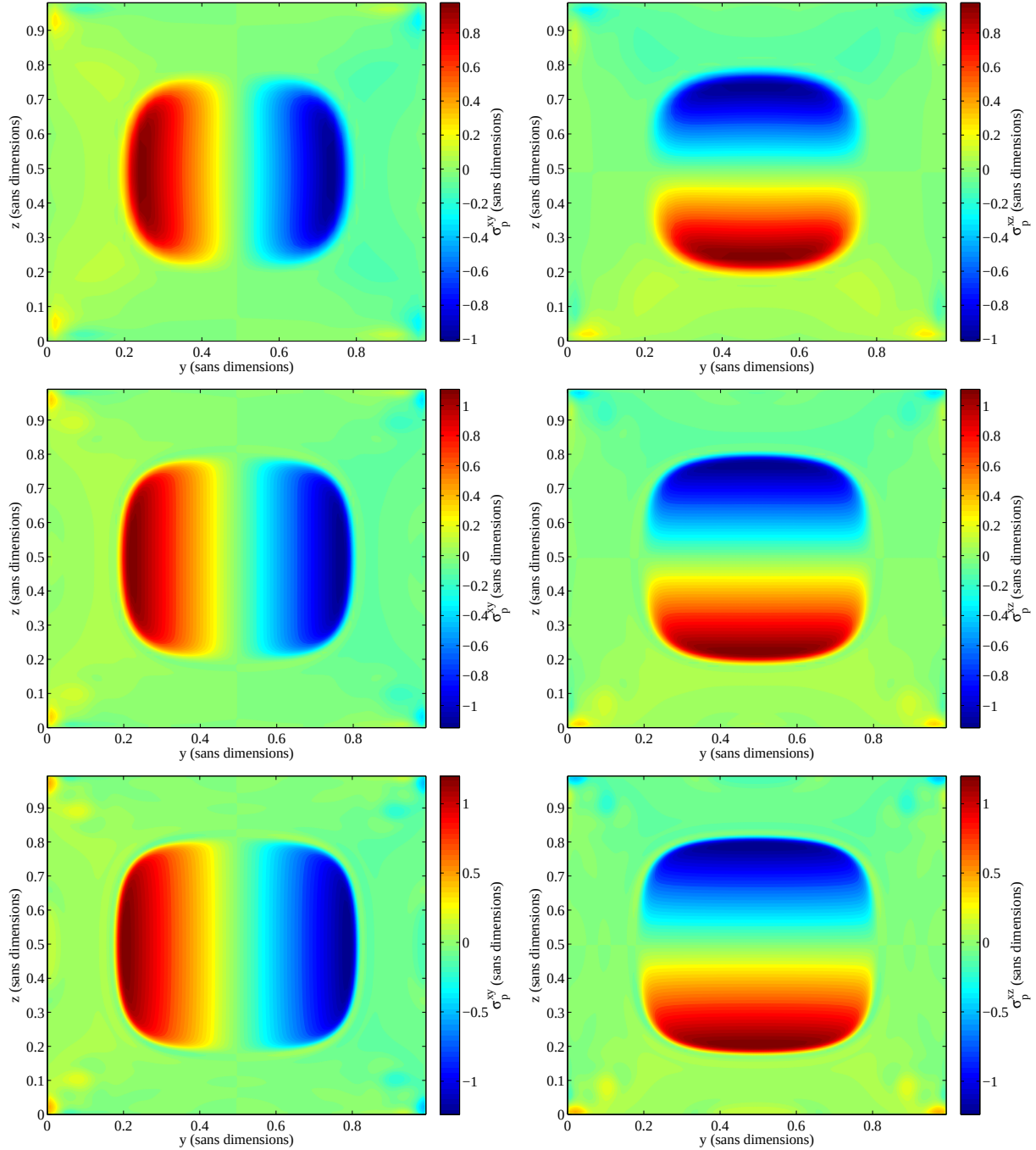


FIGURE 7.10 – Cartes des deux composantes $\sigma_p^{xy}(y, z)$ (à gauche) et $\sigma_p^{xz}(y, z)$ (à droite) de l'extra-conainte obtenues à l'état stationnaire sur des simulations numériques sur le modèle Poiseuille 2D avec diffusion ($\beta^* = \min(\delta x, \delta y)^{3/2}$). De haut en bas : $N_y \times N_z = [50 \times 50 \ 100 \times 100 \ 150 \times 150]$.

Chapitre 8

Bandes de cisaillement dans un canal droit

Dans ce chapitre on détaille l'étude numérique du modèle d'écoulements de micelles géantes décrit au chapitre 6 dans le cas particulier d'une géométrie de micro-canal droit de type "canyon" (voir Fig. 8.2). Ce travail a été fait en collaboration avec Chloé Masselon et Annie Colin du L.O.F., qui ont mené des expériences sur des écoulements de solutions de micelles géantes dans des micro-canaux fins, pour différents types de surfaces (verre, PDMS, surfaces lisses et rugueuses). Ces expériences ont montré l'importance des effets de surface sur l'écoulement dans cette situation particulière, ainsi que la perte de notion de "courbe d'écoulement" dans certains cas. On appelle courbe d'écoulement le profil entre taux de cisaillement ($\dot{\gamma}$) et contrainte de cisaillement σ^{xy} dans le fluide (voir Fig. 8.1). Lorsque cette courbe est bien définie, elle ne dépend à priori que de la nature du fluide étudié (Newtonien, rhéo-fluifiant, rhéo-épaississant, fluide à seuil, etc...) et non pas des conditions expérimentales. Dans les expériences sus-mentionnées, la forme de la courbe d'écoulement mesurée dépend non-seulement de la vitesse maximale imposée dans le canal par gradient de pression, mais aussi de la nature de la surface utilisée pour fabriquer les micro-canaux. C'est pour cette raison que l'on parle dans ces conditions de perte de notion de courbe d'écoulement d'écoulement. Le but de ce chapitre est de parvenir à montrer que ce type de comportement peut être obtenu grâce au modèle de Johnson-Segalman diffusif.

Ce chapitre est organisé de la manière suivante. Tout d'abord on décrira brièvement les hypothèses faites pour parvenir à l'utilisation du modèle réduit Poiseuille 1D. On montrera ensuite le phénomène de formations de bandes de cisaillement à travers une série de simulations sur ce modèle. La suite du chapitre est consacrée à l'étude du rôle exact de la diffusion ajoutée dans le modèle. On illustrera d'abord la nécessité de ce terme de diffusion ajouté dans la loi de comportement comme sélecteur d'un plateau de contrainte indépendant de la donnée initiale lors de la formation des bandes de cisaillement. Enfin, nous examinerons la sensibilité de l'écoulement à cette diffusion ainsi qu'aux conditions aux limites choisies.

8.1 Description du problème

On se propose ici d'étudier un écoulement dans une géométrie droite de type "canyon" (voir Fig. 8.2). Dans ce type de géométrie, le rapport entre la largeur l et la hauteur h du canal est petit. On fait d'ores et déjà l'hypothèse d'un écoulement établi et unidirectionnel, c'est à dire :

$$V(x, y, z) = \begin{pmatrix} u(y, z) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8.1)$$

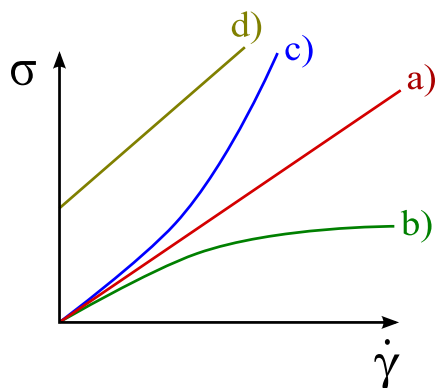


FIGURE 8.1 – Illustration de la notion de courbe d'écoulement. On montre différentes natures de fluides : a) fluide Newtonien (eau, air, huile ...), b) fluide rhéo-fluidifiant (peintures, micelles géantes, sang ...), c) fluide rhéo-épaississant (suspensions concentrées), d) fluide à seuil (mousses, émulsions, neige ...) .

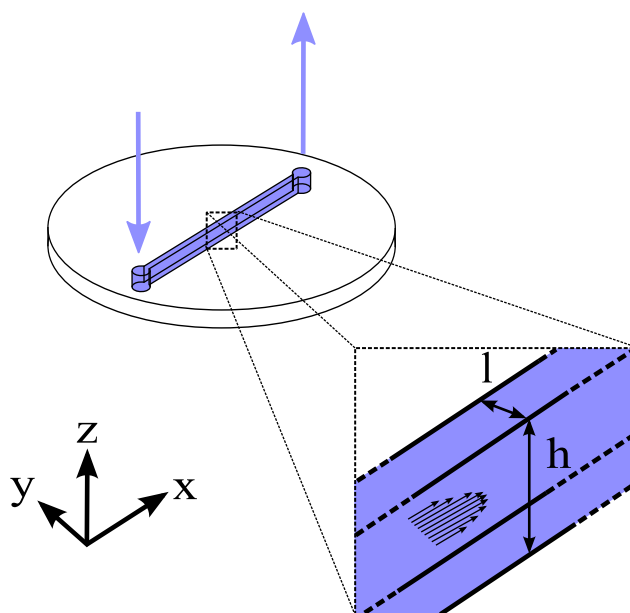


FIGURE 8.2 – Vue schématique du dispositif expérimental utilisé au L.O.F. pour étudier les effets non-locaux dans les écoulement de micelles géantes.

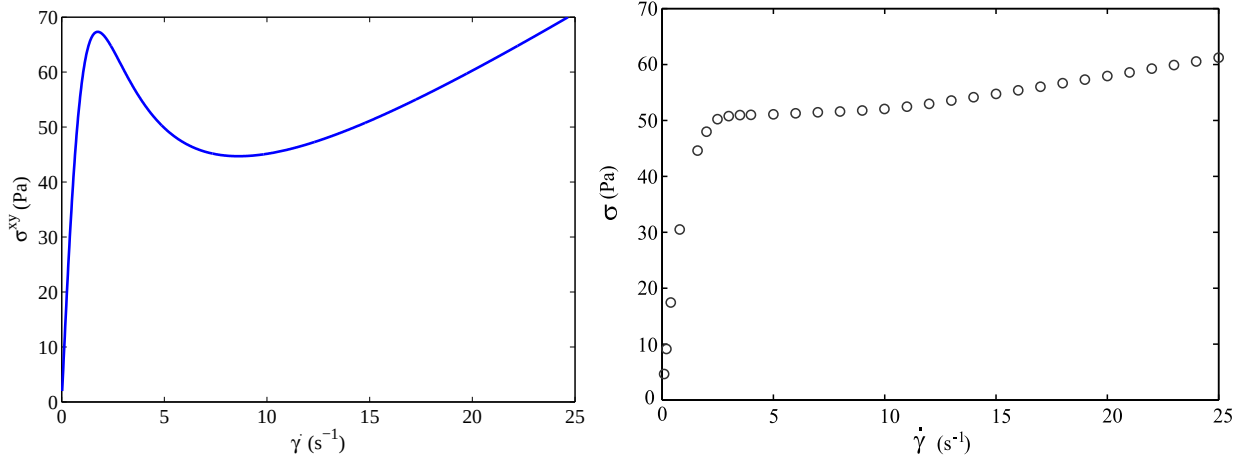


FIGURE 8.3 – A gauche : courbe d’écoulement de référence du modèle de Johnson-Segalman pour les paramètres (8.4-8.7). A droite : courbe d’écoulement expérimentale obtenue par Chloé Masselon sur une solution de CPCl-Sal 6% (figure extraite de [41]).

On a vu au chapitre 6 que les modèles du type ”Poiseuille” (6.42a-6.42b) et (6.49a-6.49b), construits sur l’hypothèse (8.1), conviennent bien à la description d’écoulements dans des canaux droits. Le grand rapport d’aspect transverse du canal nous amène à penser que les variations de vitesse et de contrainte les plus importantes se font dans la direction y (voir Fig. 8.2). En fait, dans les expériences, ce type de géométrie est non seulement utilisé pour maximiser les effets de surface, mais aussi pour simplifier la description de l’hydrodynamique. Du fait que les variations de vitesse et de contrainte dans la direction y sont grandes devant celles intervenant dans la direction z , on négligera ces dernières, ce qui nous amène à l’utilisation du modèle Poiseuille 1D (6.49a-6.49b). On rappelle l’expression de ce modèle (on oublie ici la non-linéarité quadratique ajoutée dans la section 6.2.4 du chapitre 6, la composante d’élongation de l’écoulement étant ici nulle) :

$$\begin{cases} 2\eta\dot{\gamma} + \sigma_p^{xy} = \delta P y, & (8.2a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \hat{\sigma}_p + \frac{1}{\tau}\sigma_p = 2G\dot{\gamma}(\delta_2^1 + \delta_1^2) + \mathcal{D}\partial_{yy}^2\sigma_p. & (8.2b) \end{cases}$$

Par la suite on appellera ”courbe d’écoulement” du modèle (8.2a-8.2b) pour un jeu de paramètres $(\eta, G, \tau, a, \mathcal{D})$ et de conditions aux limites, la courbe $\sigma^{xy}(\dot{\gamma})$ (censée être unique) obtenue à l’état stationnaire en examinant en chaque point du canal le taux de cisaillement $\dot{\gamma}$ et la contrainte de cisaillement σ^{xy} correspondante. On appellera ”courbe d’écoulement de référence” pour un jeu de paramètres (η, G, τ, a) la courbe $\sigma_{\text{ref}}^{xy}(\dot{\gamma})$ obtenue en écrivant l’état stationnaire sur l’équation (8.2b) pour $\dot{\gamma}$ fixé, c’est à dire sans couplage avec la loi de conservation de la quantité de mouvement (8.2a). Dans notre cas, elle est définie par (voir calcul en Annexe B.) :

$$\sigma_{\text{ref}}^{xy}(\dot{\gamma}) = 2\eta\dot{\gamma} + 2G\tau \frac{\dot{\gamma}}{1 + 4\tau^2(1 - a^2)\dot{\gamma}^2}. \quad (8.3)$$

Afin de disposer de paramètres réalistes, on détermine les coefficients (η, G, τ, a) par comparaison entre le profil (8.3) et la courbe d’écoulement issue des mesures effectuées au L.O.F. par Chloé Masselon sur une solution de CPCl-Sal 6%, avec un rhéomètre cône-plan sablé (Fig. 8.3). En accord avec la Fig. 8.3,

on choisira les paramètres suivants :

$$\eta = 2.5 \text{ Pa.s} , \quad (8.4)$$

$$G = 110 \text{ Pa} , \quad (8.5)$$

$$\tau = 0.7 \text{ s} , \quad (8.6)$$

$$a = 0.9 . \quad (8.7)$$

On considère également une largeur de canal de $200 \mu\text{m}$ conformément aux caractéristiques des micro-canaux utilisés dans les expériences.

8.2 Formation de bandes de cisaillement

Dans la section qui suit on montre brièvement le mécanisme de séparation en deux phases qui conduit à la formation de bandes de cisaillement dans l'écoulement. A partir des méthodes numériques décrites en Annexe C permettant de traiter le système (8.2a-8.2b), on effectue plusieurs simulations, pour différents gradients de pression δP imposés, avec les paramètres (8.4-8.7) choisis précédemment et dans le cas particulier $\mathcal{D} = 0$. Remarquons, qu'il est possible ici de traiter le cas $\mathcal{D} = 0$ sans souffrir des oscillations d'origine numériques décrits à la fin du chapitre 7, car le modèle (8.2a-8.2b) s'écrit directement sur le taux cisaillement, et ne nécessite pas l'utilisation des dérivées centrées à l'origine de ce problème. La résolution spatiale choisie ici est $N_y = 200$. Enfin, on partira de la donnée initiale $\sigma_p = 0$.

La Fig. 8.4 montre l'évolution en temps du système pour (de haut en bas) :

$$\delta P = [330, 660, 990] \text{ mB}/(6 \text{ cm}) .$$

Les figures de gauche montrent l'évolution en temps du profil transverse des taux de cisaillement $|\dot{\gamma}|(y)$. On voit que si le gradient de pression imposé est suffisamment fort ($\delta P > 500 \text{ mB}/(6 \text{ cm})$), alors des bandes de cisaillement fort se forment près des bords du canal (les bandes claires), tout en laissant une bande très faiblement cisailée au centre du canal (la bande sombre). Le fluide est alors séparé en deux phases : une phase très fluide près des murs et un bouchon très visqueux au centre du canal.

Cette séparation du fluide en plusieurs phases est encore plus nette si l'on examine les figures de droite. Ces dernières représentent l'évolution en temps des points $(\dot{\gamma}_i, \sigma_i^{xy})$ avec $i = 1 \dots N_y$. Comme on s'y attend, ces points évoluent autour de la courbe d'écoulement de référence (Figure. 8.3, à gauche) et, à l'état stationnaire tous les points $(\dot{\gamma}_i, \sigma_i^{xy})$ se trouvent sur cette courbe d'écoulement. Si le gradient de pression imposé dépasse un certain seuil, la courbe d'écoulement obtenue à l'état stationnaire se divise en deux parties dont les pentes sont très différentes. La partie de la courbe dont la pente est la plus grande correspond à la phase très visqueuse du fluide située au centre du canal (le bouchon), et la partie dont la pente est plus faible correspond à la phase très fluide présente au voisinage des bords du canal. Enfin constate sur ces courbes d'écoulement qu'une de gamme de valeurs du taux de cisaillement est systématiquement évitée, marquant une interface très nette entre les deux phases du fluide générées par l'écoulement. Cet ensemble de valeurs de $\dot{\gamma}$ évitées dynamiquement contient en particulier la zone de pente négative sur la courbe d'écoulement de référence (Figure. 8.3, à gauche).

8.3 Nécessité du terme de diffusion

On a introduit au chapitre 6 un terme de diffusion dans la loi de comportement. Dans la section qui suit on montre que ce terme a une importance vitale dans la cohérence du modèle complet. Comme

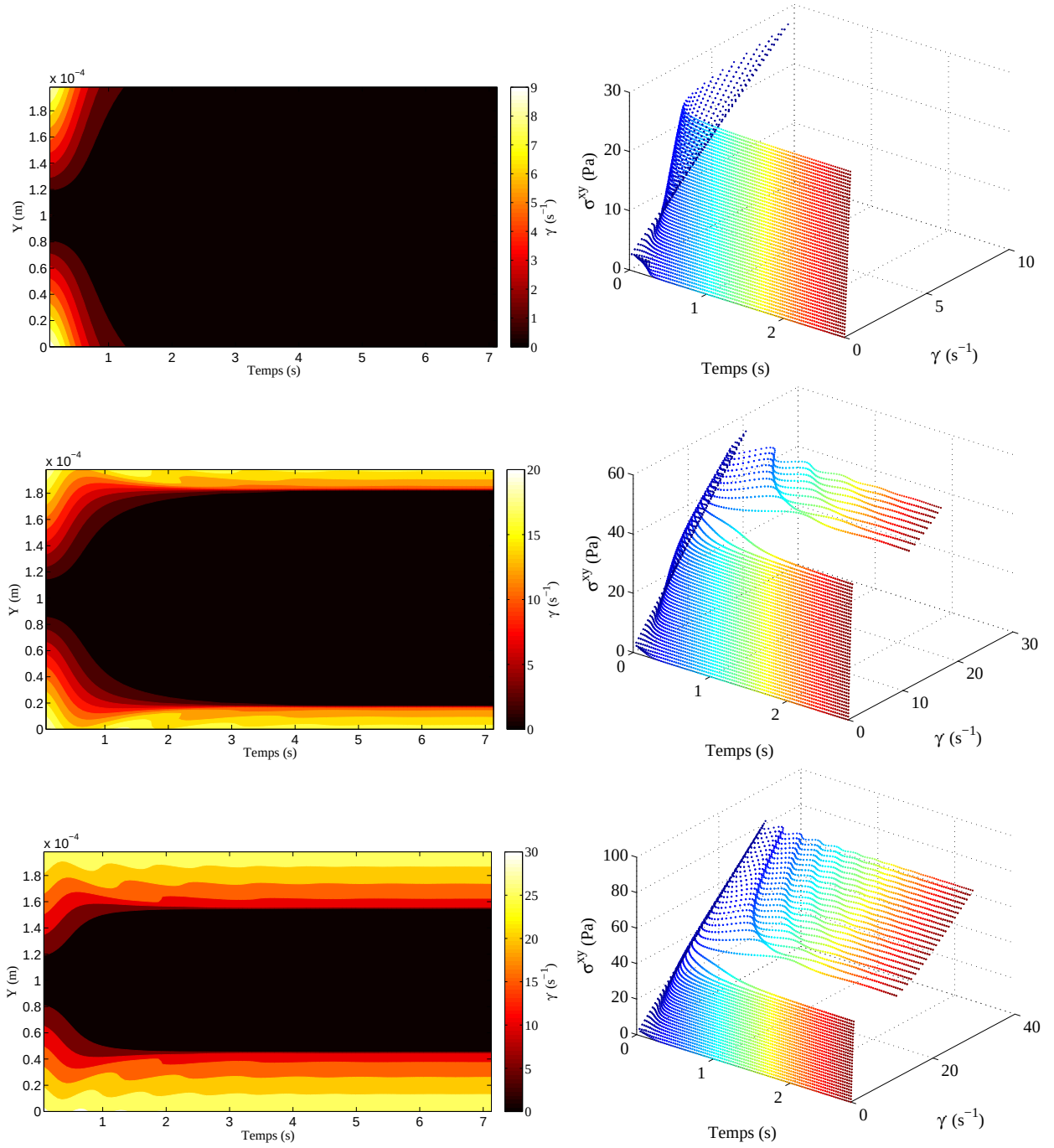


FIGURE 8.4 – Evolution en temps du système (8.2a- 8.2b) avec les paramètres (8.4- 8.7) et les valeurs suivantes du gradient de pression $\delta P = [330, 660, 990] \text{ mB}/(6 \text{ cm})$. A gauche : évolution en temps du profil de taux de cisaillement $|\dot{\gamma}|(y)$. A droite : évolution en temps des points $(\dot{\gamma}_i, \sigma_i^{xy})$, avec $i = 1 \dots N_y$, vers l'état stationnaire, où ils forment une courbe d'écoulement.

on vient de le voir, si le gradient de pression exercé sur le fluide dans le canal est suffisamment fort, le fluide se sépare en deux phases. Sur la courbe d'écoulement, cette séparation de phase se traduit par l'évitement d'une gamme de taux de cisaillements. Cet évitement implique alors la formation d'un plateau sur la contrainte entre les deux parties séparées de la courbe d'écoulement (voir Fig. 8.4). La valeur de ce plateau a une importance cruciale car elle permet de déterminer le seuil de contrainte au delà duquel le fluide change de comportement (du comportement visco-élastique au comportement fluide). Comme dans de nombreux modèles décrivant une séparation de phase, le modèle de Johnson-Segalman sans diffusion possède une hystérèse. En effet, la hauteur du plateau de contrainte caractérisant le changement de phase dépend de l'histoire de l'écoulement, autrement dit, de la condition initiale. Ce comportement est problématique, car on ne sait rien *a priori* des conditions initiales sur la contrainte dans les expériences. Il est donc nécessaire de disposer d'un modèle donnant des résultats à l'état stationnaire qui soient indépendants de la condition initiale. Dans la suite illustrons ce comportement d'hystérèse par des simulations numériques, puis nous montrons que la diffusion ajoutée dans le modèle, même très petite, permet d'obtenir une description de la transition de phase qui soit indépendante de la condition initiale.

On reprend les paramètres physiques et les paramètres numériques décrits à la section précédente et on choisit une valeur du gradient de pression imposé dans le canal : $\delta P = 1320 \text{ mB}/(6 \text{ cm})$. On considère deux types de conditions initiales sur la contrainte :

– la condition initiale "haute" :

$$\begin{aligned}\sigma_p^{xx}(y, t = 0) &= \begin{cases} 11e^2.6 \text{ Pa} & \text{si : } y < l/2 \\ -11e^2 \text{ Pa} & \text{si : } y > l/2 \end{cases} , \\ \sigma_p^{yy}(y, t = 0) &= \begin{cases} -57.8 \text{ Pa} & \text{si : } y < l/2 \\ 57.8 \text{ Pa} & \text{si : } y > l/2 \end{cases} , \\ \sigma_p^{xy}(y, t = 0) &= \begin{cases} 11.5 \text{ Pa} & \text{si : } y < l/2 \\ -11.5 \text{ Pa} & \text{si : } y > l/2 \end{cases} ,\end{aligned}$$

– la condition initiale "basse" :

$$\begin{aligned}\sigma_p^{xx}(y, t = 0) &= 0 \text{ Pa} , \\ \sigma_p^{yy}(y, t = 0) &= 0 \text{ Pa} , \\ \sigma_p^{xy}(y, t = 0) &= 0 \text{ Pa} .\end{aligned}$$

Ces deux conditions sont choisies de manière à produire un écoulement initial très différent entre les deux cas. La Fig. 8.5 montre l'évolution en temps des profils $(\dot{\gamma}, \sigma^{xy})(t)$ pour la condition initiale "haute" (en bleu, $\circ$) et pour la condition initiale "basse" (en rouge, $+$). On constate qu'à l'état stationnaire, la hauteur de plateau de contrainte obtenu (en tirets) est différente dans les deux cas. On en conclut que si l'on n'a pas de diffusion dans la loi de comportement (8.2b), la hauteur du plateau de contrainte dépend de la condition initiale. Considérons à présent le même cas, mais avec un coefficient de diffusion ($\mathcal{D} = 8e^{-11} \text{ m}^2.\text{s}^{-1}$). La Fig. 8.6 représente les résultats des simulations numériques effectuées dans les mêmes conditions que celles présentées ci-dessus, mais avec une diffusion non nulle. On s'aperçoit alors que l'état stationnaire est le même pour les deux conditions initiales, et que la zone de transition entre les deux phases du fluide est moins nette (les valeurs du taux de cisaillement qui étaient jusqu'alors évitées ne le sont plus). Le plateau de contrainte obtenu est alors indépendant de la condition initiale. On conclut de cette étude que la diffusion ajoutée dans la loi de comportement est en fait un élément indispensable à une description cohérente de l'écoulement.

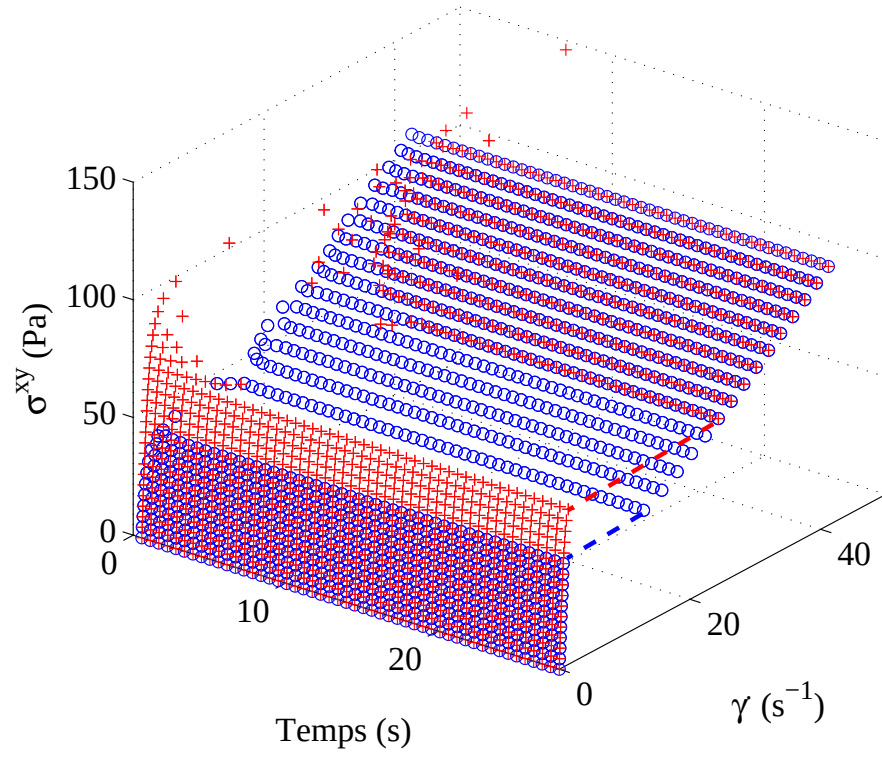


FIGURE 8.5 – Simulations numériques sur le modèle (8.2a-8.2b) avec les paramètres (8.4-8.7) et $\delta P = 1320 \text{ mB}/(6 \text{ cm})$. Evolution en temps des points de la courbe d'écoulement $(\dot{\gamma}_i, \sigma_i^{xy})$. En bleu, $\circ$: condition initiale "haute" ; en rouge, $+$: condition initiale "basse" ; en tirets : plateaux de contrainte obtenus à l'état stationnaire.

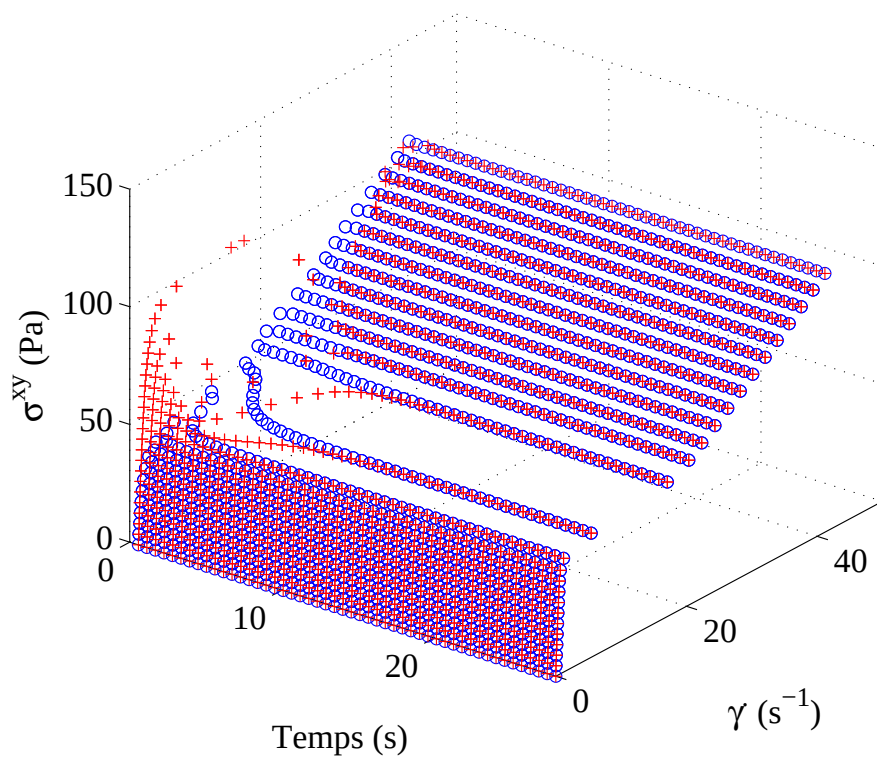


FIGURE 8.6 – Simulations numériques sur le modèle (8.2a- 8.2b) avec une diffusion de $\mathcal{D} = 8e^{-11}m^2.s^{-1}$, pour les paramètres (8.4-8.7) et $\delta P = 1320 mB/(6 cm)$. Evolution en temps des points de la courbe d'écoulement $(\dot{\gamma}_i, \sigma_i^{xy})$. En bleu, $\circ$: condition initiale "haute"; en rouge, $+$: condition initiale "basse".

8.4 Influence des effets non-locaux sur l'écoulement

On a vu à la section précédente que les termes de diffusion sur la contrainte sont nécessaires à la sélection d'un plateau de contrainte qui soit indépendante de la condition initiale. Récemment, des expériences menées au L.O.F. par Chloé Masselon et Annie Colin, ont mis au jour des effets non-locaux impliquant la perte de notion de courbe écoulement, c'est à dire que la relation $\sigma^{xy}(\dot{\gamma})$, bien qu'indépendante de la condition initiale, pouvait dépendre du gradient de pression imposé dans le canal. On montre dans cette section par des simulations numériques que le modèle de Johnson-Segalman avec diffusion est capable de produire ce type de comportement suivant les conditions aux limites que l'on choisit sur σ_p .

Dans la suite on reprend les paramètres (8.4-8.7), et on choisit comme condition initiale $\sigma_p = 0$. On effectue alors des simulations numériques pour les valeurs suivantes de $\mathcal{D}$ et δP :

$$\mathcal{D} = [8, 16, 80] m^2.s^{-1}, \quad (8.8)$$

$$\delta P = [330, 495, 660, 825, 990, 1155, 1320] mB/(6 cm). \quad (8.9)$$

On considèrera également deux types de conditions aux limites :

- une condition de Neumann homogène :

$$\partial_{\bar{n}} \sigma_p|_{\Gamma_m} = 0, \quad (8.10)$$

- une condition de Dirichlet non-homogène :

$$\sigma_p|_{\Gamma_m} = \sigma_p^*(\dot{\gamma}|_{\Gamma_m}), \quad (8.11)$$

où $\sigma_p^*(\dot{\gamma})$ représente le résultat du modèle local ($\mathcal{D} = 0$).

Tous les résultats présentés ici représente l'état stationnaire du système. Les Fig. 8.7 et 8.8 résument les résultats des simulations effectuées dans les conditions décrites ci-dessus pour des conditions aux limites de Neumann et de Dirichlet sur σ_p . A gauche on présente les courbes d'écoulement obtenues en tracant $(\sigma^{xy}, \dot{\gamma})$ à l'état stationnaire. On s'aperçoit qu'à mesure que $\mathcal{D}$ augmente, le profil $\sigma^{xy}(\dot{\gamma})$ dépend de plus en plus du gradient de pression δP imposé. Conformément aux expériences on a donc une perte de la notion de courbe d'écoulement à mesure que l'on augmente les effets non-locaux sur la contrainte (dans les expériences on augmente les effets non locaux en diminuant la largeur du canal, ici on les augmente en faisant varier le coefficient de diffusion $\mathcal{D}$). Le comportement qui semble le plus cohérent avec les données expérimentales semble être celui obtenu avec la condition de Dirichlet (Fig. 8.8) car la hauteur du "plateau" de contrainte augmente à mesure que l'on augmente δP .

8.5 Conclusion et perspectives

Cette étude a porté sur un modèle réduit pour les écoulements de micelles géantes introduit dans le chapitre 6. Ce modèle est valide dans un contexte favorable à l'étude de la formation de bandes de cisaillement. Ce contexte consiste en un écoulement dans une géométrie fine de type "canyon" (voir Fig. 8.2).

Tout d'abord nous avons montré par des simulations numériques la capacité du modèle de Johnson-Segalman à reproduire le phénomène de séparation du fluide en plusieurs phases. Cette séparation de phase est provoquée dans le modèle par un évitement dynamique d'une gamme de taux de cisaillements contenant l'ensemble des points pour lesquels la courbe d'écoulement de référence (Fig. 8.3, à gauche)

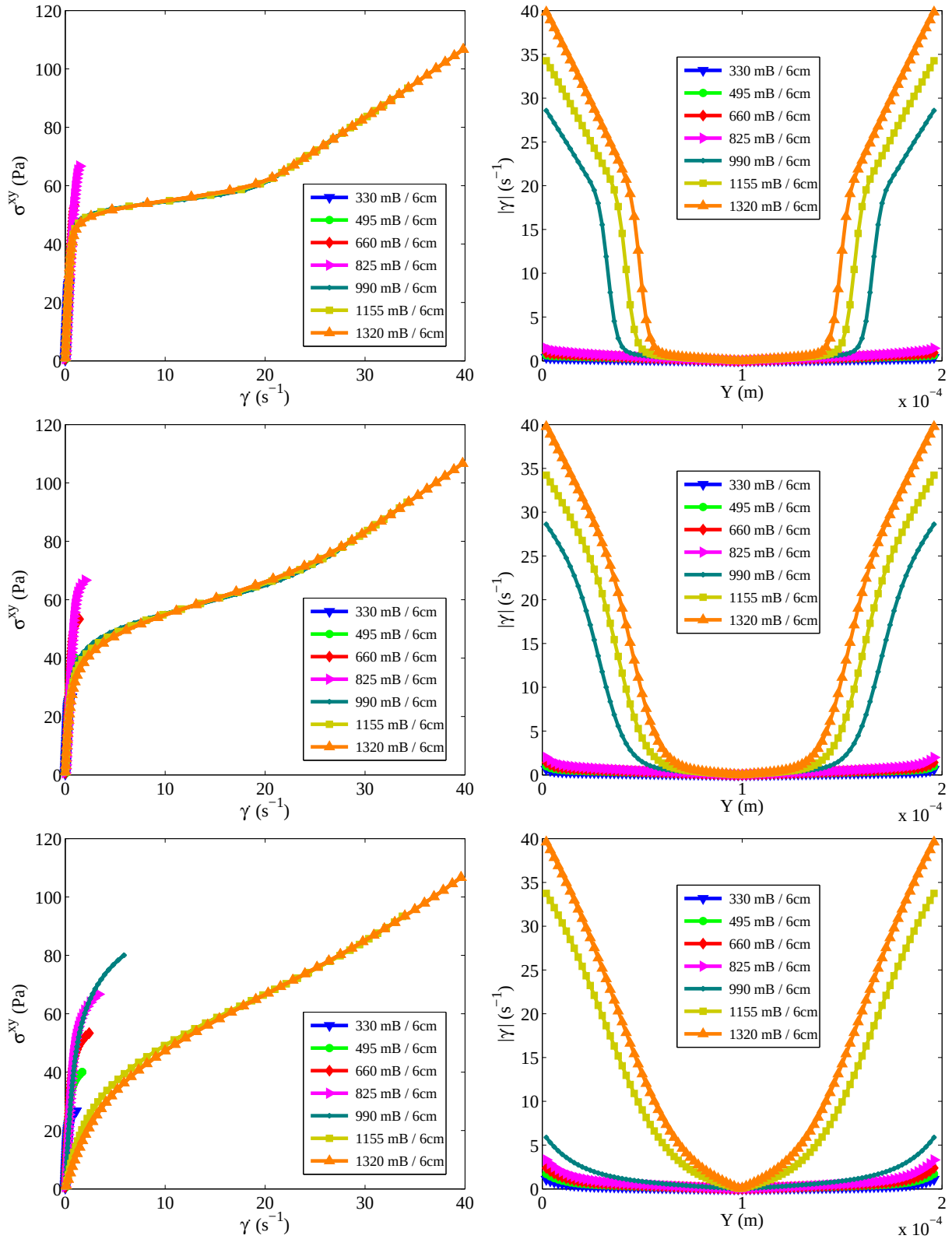


FIGURE 8.7 – Résultats à l'état stationnaire des simulations numériques effectuées sur le modèle (8.2a- 8.2b) avec les paramètres (8.4- 8.7), et (de haut en bas) $\mathcal{D} = [8, 16, 80] m^2.s^{-1}$, pour une condition aux limites de Neumann sur σ_p . A gauche : courbes d'écoulement. A droite : profil transverse de cisaillement $|\dot{\gamma}|$.

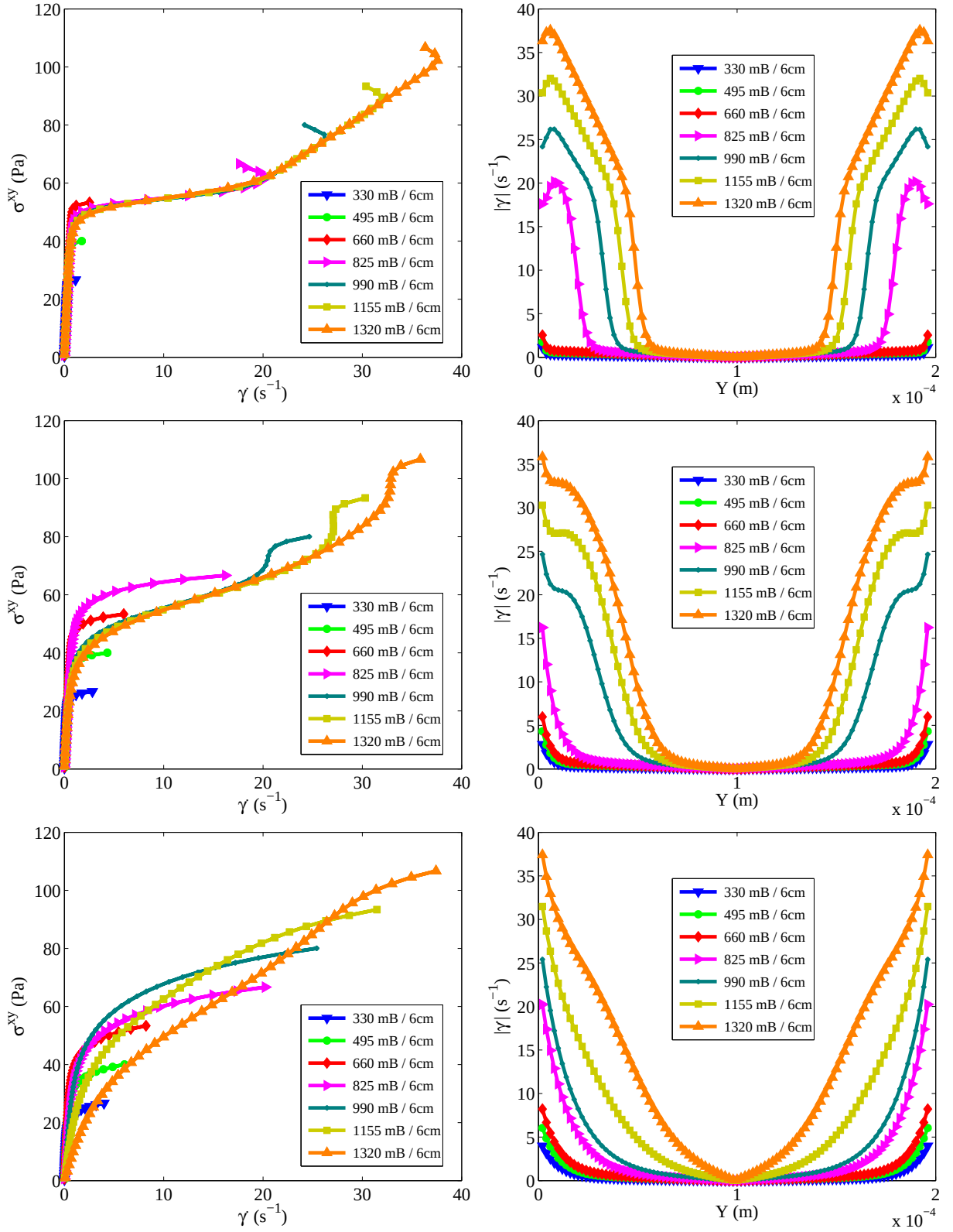


FIGURE 8.8 – Résultats à l'état stationnaire des simulations numériques effectuées sur le modèle (8.2a- 8.2b) avec les paramètres (8.4- 8.7), et (de haut en bas) $\mathcal{D} = [8, 16, 80] m^2.s^{-1}$, pour une condition aux limites de Dirichlet sur σ_p . A gauche courbes d'écoulement. A droite : profil transverse de cisaillement $|\dot{\gamma}|$.

du modèle de Johnson-Segalman possède une pente négative. Par ailleurs, nous avons vu que l'ajout d'un terme de diffusion dans la loi de comportement était indispensable pour obtenir une description de cette séparation de phase qui soit indépendante de l'état initial de sur contrainte.

Enfin, cette étude nous a permis de rendre compte du fait que, suivant l'importance du terme de diffusion et suivant les conditions aux limites choisies, la courbe d'écoulement obtenue à l'état stationnaire pouvait dépendre du gradient de pression δP imposé dans le canal. Ce phénomène, observé récemment [41], a été imputé à des effets non locaux sur la contrainte. La justification donnée dans [41] a consisté en une comparaison entre les résultats issus des observations et des prédictions effectuées grâce au modèle phénoménologique (non-tensoriel) de Dhont [21]. Cette étude a donc permis d'avoir un regard complémentaire sur ces effets non-locaux à travers le modèle (tensoriel) de Johnson-Segalman, dans lequel la diffusion est un élément indispensable à la cohérence des prédictions. La comparaison que nous avons donnée ici est qualitative, et ce travail reste avant tout exploratoire, la question des conditions aux limites à adjoindre au modèle étant toujours une question ouverte. Ces dernières devraient dépendre de l'état de la surface (nature chimique, rugosité) du canal. Il est probablement nécessaire d'écrire un modèle de rhéologie de surface à part entière pour obtenir une description de ces effets non-locaux à proximité du canal qui soit vraiment satisfaisante.

Chapitre 9

Ecoulements dans des jonctions micro-fluidiques

Ce chapitre est consacré à l'étude de quelques écoulements de micelles géantes dans une géométrie correspondant à une jonction micro-fluidique. Les applications visées ici concernent des techniques récentes de récupération secondaire du pétrole, lesquelles mettent en jeu l'injection d'une solution de micelles géantes dans un milieu poreux. Ces roches poreuses pouvant d'une certaine manière être vues comme un réseau de micro-canaux, les outils micro-fluidiques se sont imposés comme milieu poreux "modèle". Dans un tel réseau, l'un des éléments de base est la jonction micro-fluidique (voir Fig. 9.1). Ces jonctions re-distribuent l'écoulement en fonction de la résistance hydraulique qu'opposent chacune des ces branches de sortie. Ce problème de re-distribution peut être assez complexe lorsque l'on traite des écoulements de micelles géantes, et plus généralement, pour les fluides non-Newtoniens.

Dans la suite, on considère deux approches : d'une part une approche faisant intervenir un certain nombre d'hypothèses de réductions sur la répartition de la pression dans la jonction, et d'autre part une approche impliquant des simulations directes du modèle décrit au chapitre 6 avec les méthodes décrites au chapitre 7. La première méthode présentée permet d'entrevoir le phénomène de "bouchage" de la jonction propre aux écoulements de micelles géantes, mais se révèle néanmoins insatisfaisante, les hypothèses réductrices effectuées avec cette approche étant invalides. Avant de comparer les prédictions effectuées avec la première approche avec les simulations directes, on justifie par des simulations numériques la nécessité de l'ajout d'une non-linéarité quadratique dans le modèle introduite à le

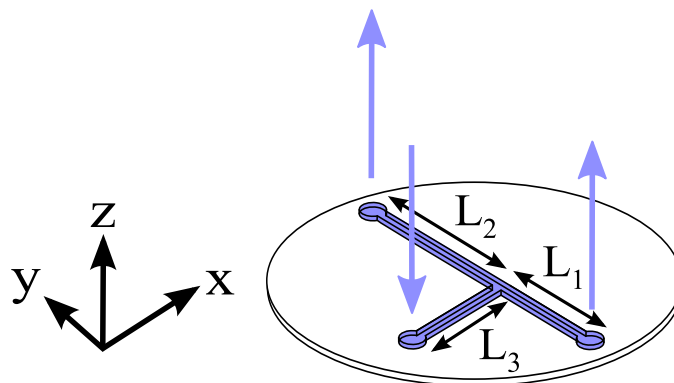


FIGURE 9.1 – Schéma de principe du type de dispositif micro-fluidique étudié dans ce chapitre

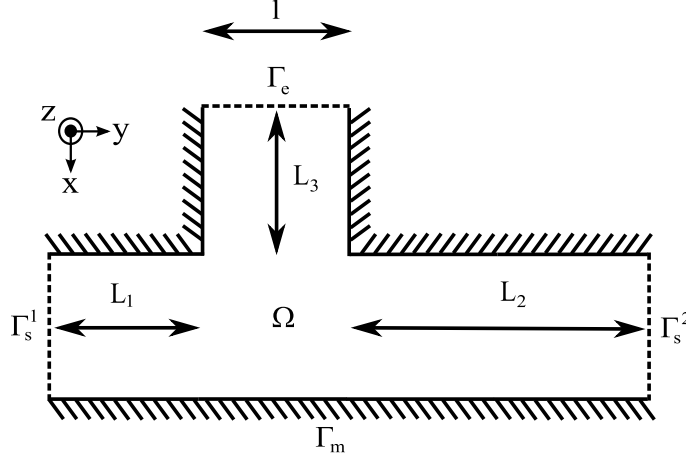


FIGURE 9.2 – Géométrie du domaine et notations

section 6.2.4 du chapitre 6 pour notre cas de figure. Les simulations numériques directes effectuées par la suite permettent de caractériser l'effet de la géométrie 3D sur les résultats, et ce dans plusieurs cas : tout d'abord dans le cas d'une jonction fortement asymétrique, puis dans le cas d'une jonction faiblement asymétrique, et enfin nous montrons les phénomènes étranges obtenus lors d'écoulements dans une jonction parfaitement symétrique.

9.1 Description du problème

On considère dans cette étude une jonction micro-fluidique en forme de "T" (voir Fig. 9.2). On note respectivement L_1 , L_2 et L_3 les longueurs des branches de sortie et d'entrée de la jonction. On note également l la section transverse des canaux et h la hauteur, ces derniers seront fixés pour toute la suite de cette étude :

$$L_3 = 1 \text{ mm},$$

$$l = 1 \text{ mm},$$

$$h = 1 \text{ mm}.$$

Les longueurs des branches de sortie L_1 et L_2 , quand à elles, varieront. L'intérieur du domaine sera noté Ω et les bords seront notés : Γ_e pour l'entrée, Γ_s^1 et Γ_s^2 pour les sorties et enfin Γ_m pour les murs du canal. On reprend le modèle 3D complet introduit au chapitre 6 :

$$\begin{cases} \eta \Delta V + \nabla \cdot \sigma_p = \nabla P, & (9.1a) \\ \nabla \cdot V = 0, & (9.1b) \\ \hat{\sigma}_p + V \cdot \nabla \sigma_p + \frac{1}{\tau} \sigma_p + \frac{\kappa}{G\tau} \sigma_p^2 = 2GD[V] + \mathcal{D}\Delta\sigma_p. & (9.1c) \end{cases}$$

On choisira les paramètres suivants pour le système (9.1a-9.1c) dans tout le reste du chapitre :

$$\eta = 1 \text{ Pa.s}, \quad (9.2)$$

$$G = 150 \text{ Pa}, \quad (9.3)$$

$$\tau = 0.5 \text{ s}, \quad (9.4)$$

$$\kappa = 0.3, \quad (9.5)$$

$$\mathcal{D} = 1.0e^{-10} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}, \quad (9.6)$$

et on définira les débits d'entrée Q_e et de sortie Q_{s1} et Q_{s2} par :

$$Q_e = \int_{\Gamma_e} u \, d\Gamma_e, \quad (9.7)$$

$$Q_{s1} = - \int_{\Gamma_s^1} v \, d\Gamma_s^1, \quad (9.8)$$

$$Q_{s2} = \int_{\Gamma_s^2} v \, d\Gamma_s^2. \quad (9.9)$$

Le fluide étudié ici étant incompressible, on aura toujours $Q_e = Q_{s1} + Q_{s2}$. On notera également les gradients de pression d'entrée et de sortie par δP_e , δP_{s1} et δP_{s2} . Le but dans ce chapitre est d'être capable de relier Q_e à Q_{s1} et Q_{s2} . Les deux approches exposées par la suite différeront dans la relation qui permet de relier les pressions d'entrée et de sortie.

9.2 Première approche : algorithme de recherche des débits

On propose tout d'abord une approche permettant de trouver, en connaissant les pressions d'entrée dans la jonction Q_e une paire de débits de sortie Q_{s1} et Q_{s2} assurant $Q_e = Q_{s1} + Q_{s2}$. Notons qu'il existe une infinité de débits de sortie assurant cette condition. L'approche qui suit permet d'en sélectionner une seule, via un argument physique sur la répartition des pressions dans la jonction.

9.2.1 Principe

L'approche introduite dans cette partie du chapitre des basée sur l'argument physique suivant : lorsque l'on traite d'un écoulement de fluide incompressible dans une conduite droite, la pression évolue linéairement dans la direction longitudinale de cette conduite. Le principe de la méthode introduite ici consiste à appliquer cette hypothèse aux trois branches de la jonction étudiée, et de considérer la pression constante au niveau de la jonction. De cette manière, si l'on définit par P_{s1} la pression à la sortie Γ_s^1 , P_{s2} la pression à la sortie Γ_s^2 et P_j la pression supposée constante à la jonction, alors, l'hypothèse de linéarité de la pression dans les branches de sortie permet de définir les gradients de pression à travers Γ_s^1 et Γ_s^2 par :

$$\delta P_{s1} \sim \frac{P_{s1} - P_j}{L_1}, \quad (9.10)$$

$$\delta P_{s2} \sim \frac{P_{s2} - P_j}{L_2}. \quad (9.11)$$

On suppose que les pressions aux deux sorties du dispositif on la même valeur : $P_{s1} = P_{s2} = 0$ (sortie à la pression atmosphérique). On suppose également que la relation entre débit et gradient de pression $Q(\delta P)$ à travers une conduite droite est connue (on verra dans la section suivante de quelle manière obtenir cette relation). Le problème peut alors être posé de la manière suivante : trouver P_j (et donc δP_{s1} et δP_{s2} grâce à (9.10-9.11)) tel que :

$$Q_{s1}(\delta P_{s1}) + Q_{s2}(\delta P_{s2}) = Q_e,$$

où Q_e est connu. Du fait que la relation entre débit et gradient de pressions n'est pas linéaire, la solution de ce problème d'est pas triviale, et, afin de le résoudre, on introduit l'algorithme suivant :

0. Initialiser P_j^0

1. P_j^n des connue ,
2. On calcule δP_{s1} et δP_{s2} à partir de P_j^n via les relations (9.10-9.11) ,
3. On calcule les débits correspondants Q_{s1}^n, Q_{s2}^n via la méthode décrite à la section 9.1 ,
4. On corrige la pression intermédiaire avec : $P_j^{n+1} = P_j^n + \delta r \frac{Q_e - (Q_{s1}^n + Q_{s2}^n)}{\max(Q_e, Q_{s1}^n + Q_{s2}^n)}$,
5. on itère en revenant à 1.

Cet algorithme est basé sur une correction de la pression intermédiaire P_j en fonction de l'excédent ou bien du déficit de débit à chaque itération. Cet excédent/déficit est défini par :

$$Q_e - (Q_{s1}^n + Q_{s2}^n) .$$

Lorsque cet algorithme a convergé on a bien : $Q_e = (Q_{s1}^n + Q_{s2}^n)$. La pression intermédiaire P_j obtenue permet alors dévaluer les gradients de pression δP_{s1} et δP_{s2} et enfin Q_{s1} et Q_{s2} . Le pas δr doit être réglé suffisamment petit pour assurer la convergence de l'algorithme. Cet algorithme se rapproche des méthodes de compressibilité artificielle pour Stokes, appliqué ici à un problème beaucoup plus simple. Dans la section suivante on montre de quelle manière on établit la relation entre débit et gradient de pression pour un écoulement dans un canal droit à section rectangulaire.

9.2.2 Relation débit/pression pour un fluide non-Newtonien

Dans cette section on détaille la méthode employée pour calculer un débit correspondant à un gradient de pression pour un écoulement de micelles géantes. Le modèle Poiseuille 2D (6.42a-6.42b) dérivé du modèle complet (9.1a-9.1c), dans le cas particulier d'une conduite droite permet d'obtenir un profil de vitesses en fonction du gradient de pression δP imposé dans cette conduite :

$$\begin{cases} \eta \Delta_{yz} u + \partial_y \sigma_p^{xy} + \partial_z \sigma_p^{xz} = \delta P , & (9.12a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{\sigma}_p + \frac{1}{\tau} \sigma_p + \frac{\kappa}{G \tau} \sigma_p^2 = 2 G \left(\partial_y u (\delta_2^1 + \delta_1^2) + \partial_z u (\delta_3^1 + \delta_1^3) \right) + \mathcal{D} \Delta_{yz} \sigma_p . & (9.12b) \end{cases}$$

Une fois que le profil de vitesses $u(y, z)$ est connu, il suffit d'employer la formule (9.7) pour obtenir le débit correspondant.

La Fig. 9.3, à droite, montre des coupes en $z = h/2$ de profils de vitesses obtenus par simulation numérique sur le modèle (9.12a- 9.12b) avec les paramètres (9.2- 9.6) , pour plusieurs gradients de pression imposés (la résolution du maillage choisie pour ces calculs est $N_x \times N_y = 50 \times 50$). On constate sur la Fig. 9.3, à droite, un saut dans l'ordre de grandeur des vitesses au delà d'une certaine valeur seuil pour le gradient de pression imposé. Au delà de ce seuil, il y a formation de bandes de cisaillement, et il se forme au centre du canal un bouchon visqueux, ce qui engendre ce type de profils de Poiseuille "coupé". Ce phénomène très courant pour les écoulements de micelles géantes est appelé "spurt effect" ou "effet de jaillissement". La conséquence directe sur les débits (voir Fig. 9.3, à gauche) est un saut dans la relation débit/gradient de pression.

Bien que la méthode permettant de relier le débit au gradient de pression décrite ci-dessus soit issue d'un modèle 2D (donc assez rapide à traiter numériquement) il est nécessaire à chaque fois d'atteindre la convergence du calcul, ce qui peut prendre un certain temps. Pour cette raison il n'est pas envisageable de faire appel à une simulation sur le modèle (9.12a- 9.12b) à chaque itération de l'algorithme décrit précédemment. On établira donc une table $(\delta P, Q)$ à partir de la méthode décrite ci-dessus, valable pour un jeu de paramètres rhéologiques, qui, une fois interpolée, servira directement dans l'algorithme décrit à la section 9.2.1.

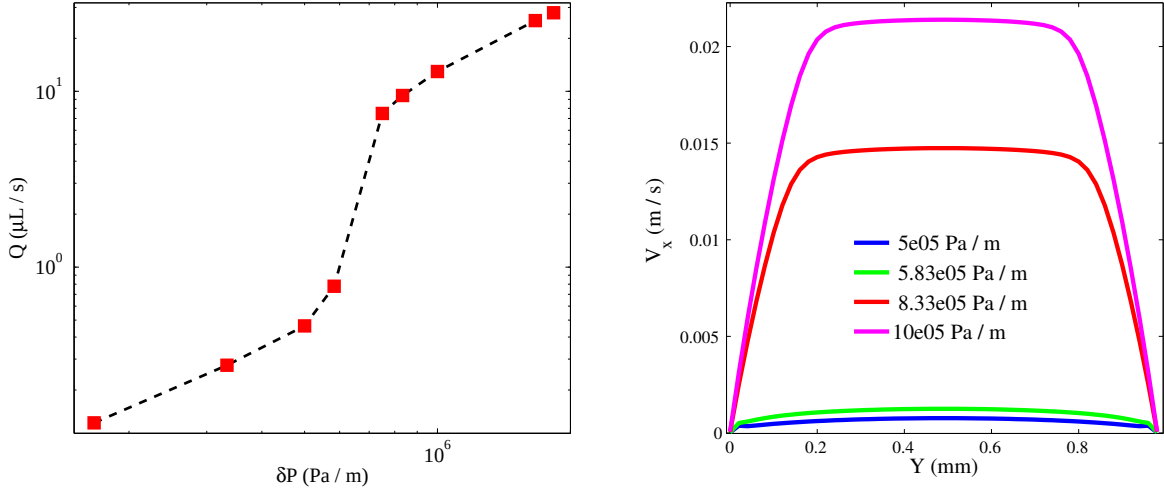


FIGURE 9.3 – A gauche : relation entre débit et gradient de pressions obtenu par simulation numérique sur le modèle Poiseuille 2D (9.12a-9.12b) (échelle logarithmique). A droite : quelques profils de vitesses correspondants (coupe en $z = h/2$).

9.2.3 Résultats, phénomène de bouchage

On applique ici l'algorithme exposé à la section 9.2.1 avec la méthode de calcul de débits décrite à la section 9.2.2. On se considère la gamme suivante de débits d'entrée :

$$Q_e \in [0.1, 110] \mu\text{L.s}^{-1}, \quad (9.13)$$

et les longueurs suivantes pour les branches de sortie :

$$\begin{aligned} L_1 &= 1 \text{ mm}, \\ L_2 &= 2 \text{ mm}. \end{aligned}$$

Pour chacun des débits d'entrée (9.13), on s'intéresse au rapport Q_{s1}/Q_{s2} des débits de sortie obtenus après convergence de l'algorithme. On constate, sur la Fig. 9.4 que ce rapport de débits de sortie présente une bosse très importante pour une gamme précise de débits d'entrée. Cette bosse est fortement liée à l'effet de jaillissement décrit à la section précédente. Etant donné que l'une des branches de sortie de la jonction en T est plus longue que l'autre, les pressions aux deux sorties étaient les mêmes, le gradient de pression sera toujours plus faible dans la branche la plus courte que dans la branche la plus longue. Or, on a vu à la section précédente que l'on avait un saut de débit au delà d'un certain gradient de pression critique δP^* . Etant donné que l'on a toujours $\delta P_{s2} < \delta P_{s1}$, il existe une situation où : $\delta P_{s2} < \delta P^* < \delta P_{s1}$. Dans ce type de situation le débit à travers la sortie Γ_s^2 est bien plus faible que le débit à travers la sortie Γ_s^1 . L'une des deux branches est "bouchée" et le fluide injecté s'écoule préférentiellement dans l'autre branche. Ce phénomène de bouchage est propre aux écoulements de micelles géantes, car dans les cas des écoulements de fluides Newtoniens, la relation linéaire entre débit et gradient de pression implique : $Q_{s1}/Q_{s2} = L_2/L_1$.

9.2.4 Les insuffisances de cette approche

L'approche que nous avons développée dans cette section nous a permis de constater le phénomène de bouchage lié à la nature non-Newtonienne du fluide étudié. Cependant, étant basée sur une ap-

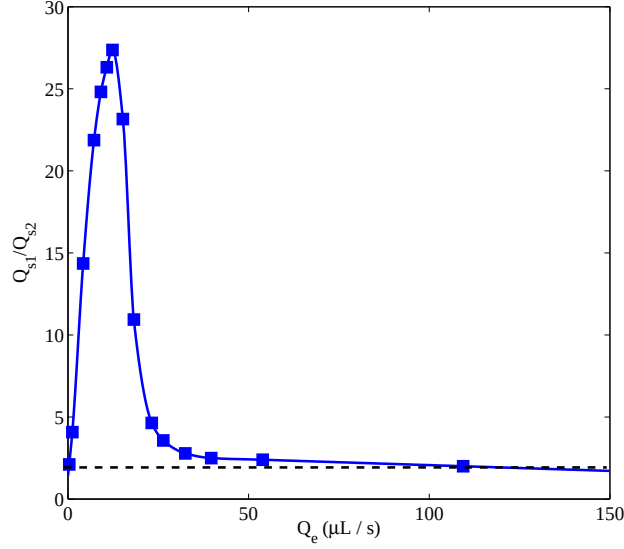


FIGURE 9.4 – Rapports de débits Q_{s1}/Q_{s2} en fonction du débit d'entrée Q_e obtenus après plusieurs calculs effectués sur l'algorithme présenté à la section 9.2.1. En pointillés, résultat attendu sur un fluide Newtonien.

proximation de pression linéaire dans chaque branche, ce modèle réduit ne permet pas de reproduire tous les mécanismes en jeu dans l'écoulement, en particulier ceux intervenant à la jonction elle-même à partir de laquelle s'effectue la redistribution des débits. Examinons à présent la validité de l'approche décrite ci-dessus en nous servant des résultats qu'elle donne comme conditions d'entrée et de sortie pour une simulation numérique 3D directe sur le modèle (9.1a-9.1c) dans une géométrie de T.

Les paramètres rhéologiques utilisés sont ceux décrits en (9.2-9.6). Les conditions aux limites utilisées sont les suivantes (voir Fig. 9.2) :

- Sur les murs Γ_m , on impose la condition d'adhérence pour les vitesses : $V|_{\Gamma_m} = 0$, et une condition de Neumann pour l'extra-contrainte : $\partial_{\vec{n}}\sigma_p|_{\Gamma_m} = 0$.
- A l'entrée Γ_e , une condition de Dirichlet sur V et σ_p correspondant aux profils obtenus grâce au modèle (9.12a-9.12b) pour $Q_e = 56.4 \mu\text{L.s}^{-1}$.
- Aux sorties Γ_s^1 et Γ_s^2 , également des conditions de Dirichlet sur V et σ_p correspondant aux profils obtenus grâce au modèle (9.12a-9.12b) pour $Q_{s1} = 37 \mu\text{L.s}^{-1}$ et $Q_{s2} = 19.4 \mu\text{L.s}^{-1}$. Ces débits sont les débits de sortie prédits par l'algorithme présenté à la section 9.2.1 pour $Q_e = 56.4 \mu\text{L.s}^{-1}$.

La géométrie complexe de Γ_m est prise en compte grâce aux méthodes de pénalisation introduites dans le chapitre 7. Enfin, la résolution du maillage pour ce calcul est : $N_x \times N_y \times N_z = 100 \times 200 \times 50$.

La Fig. 9.5 montre une coupe à mi-hauteur de l'écoulement simulé dans les conditions présentées ci-dessus. Sur la figure de droite, où est représenté le champ de pression, on constate que les pressions aux sorties Γ_s^1 et Γ_s^2 semblent très différentes. Ceci entre en contradiction avec l'hypothèse formulée dans la construction de l'algorithme de recherche de débits, à savoir : $P_{s1} = P_{s2}$. De plus, l'observation du champ de vitesse laisse supposer que l'on est en présence d'un écoulement bien plus complexe qu'un simple écoulement de type Poiseuille dans chaque branche comme on l'a supposé ici (présence d'une

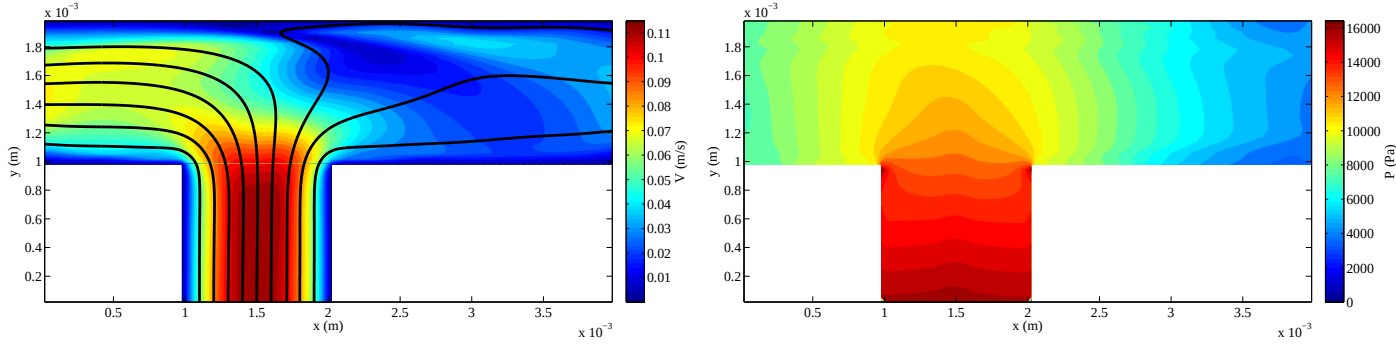


FIGURE 9.5 – Simulation d’un écoulement de micelles géantes dans une jonction en T. Conditions aux limites sur les vitesses obtenues via l’algorithme proposé à la section 9.2.1 pour $Q_e = 56.4 \mu L.s^{-1}$. A gauche : coupe en $z = h/2$ du champ de vitesses et lignes de courant partant de l’entrée. A droite : coupe en $z = h/2$ du champ de pressions.

re-circulation, hétérogénéités dans la direction longitudinale pour la branche longue). Pour ces raisons, l’approche développée dans cette section se révèle insuffisante pour obtenir des prédictions de débits de sortie réalistes, le rôle de la jonction étant plus important qu’attendu.

9.3 Deuxième approche : simulations directes

Le but poursuivi dans cette section est, comme précédemment, d’arriver à pouvoir prédire les valeurs de débits de sortie d’une jonction micro-fluidique pour une solution de micelles géantes, étant donné un débit d’entrée. Contrairement à ce qui a été fait précédemment, on ne fait ici aucune hypothèse réductrice sur le modèle (9.1a-9.1c). Il s’agit de traiter directement le modèle en utilisant la méthode numérique décrite au chapitre 7. La grande différence avec ce qui a été fait dans la section 9.2.4 réside dans l’utilisation de condition de Neumann pour les vitesses en sortie. Ces conditions se traduisent d’un point de vue physique par une hypothèse d’écoulement établi en aval des sorties Γ_s^1 et Γ_s^2 . L’avantage de l’utilisation de telles conditions de sortie est que l’on ne “force” pas les débits dans chacune des deux branches, on laisse donc l’écoulement s’établir tout seul. Cependant, il est nécessaire de placer ces bords suffisamment loin en aval de la jonction afin que l’hypothèse d’écoulement établi soit valide. Avant d’exploiter véritablement les simulations numériques, on illustre la nécessité d’ajouter une non-linéarité quadratique dans le modèle, comme on l’a vu à la section 6.2.4 du chapitre 6.

9.3.1 Nécessité de la non-linéarité quadratique dans le modèle

On considère ici un écoulement dans une jonction en “T” avec exactement les mêmes paramètres de simulation que ceux décrits à la section 9.2.4 excepté que l’on aura deux valeurs possibles du coefficient κ (sans dimensions) apparaissant dans la loi de comportement (9.1c), réglant l’importance de la non-linéarité quadratique ajoutée dans le modèle. Deux simulations sont effectuées exactement dans les mêmes conditions, l’une avec la non-linéarité quadratique ($\kappa = 0.3$), l’autre sans la non-linéarité quadratique ($\kappa = 0$).

La Fig. 9.6 montre les résultats sur les vitesses à un certain temps t^n des deux simulations numériques effectuées avec les paramètres décrits ci-dessus. On constate que dans le cas où l’on n’a pas ajouté de non-linéarité dans le modèle ($\kappa = 0$), on obtient des résultats aberrants dus uniquement

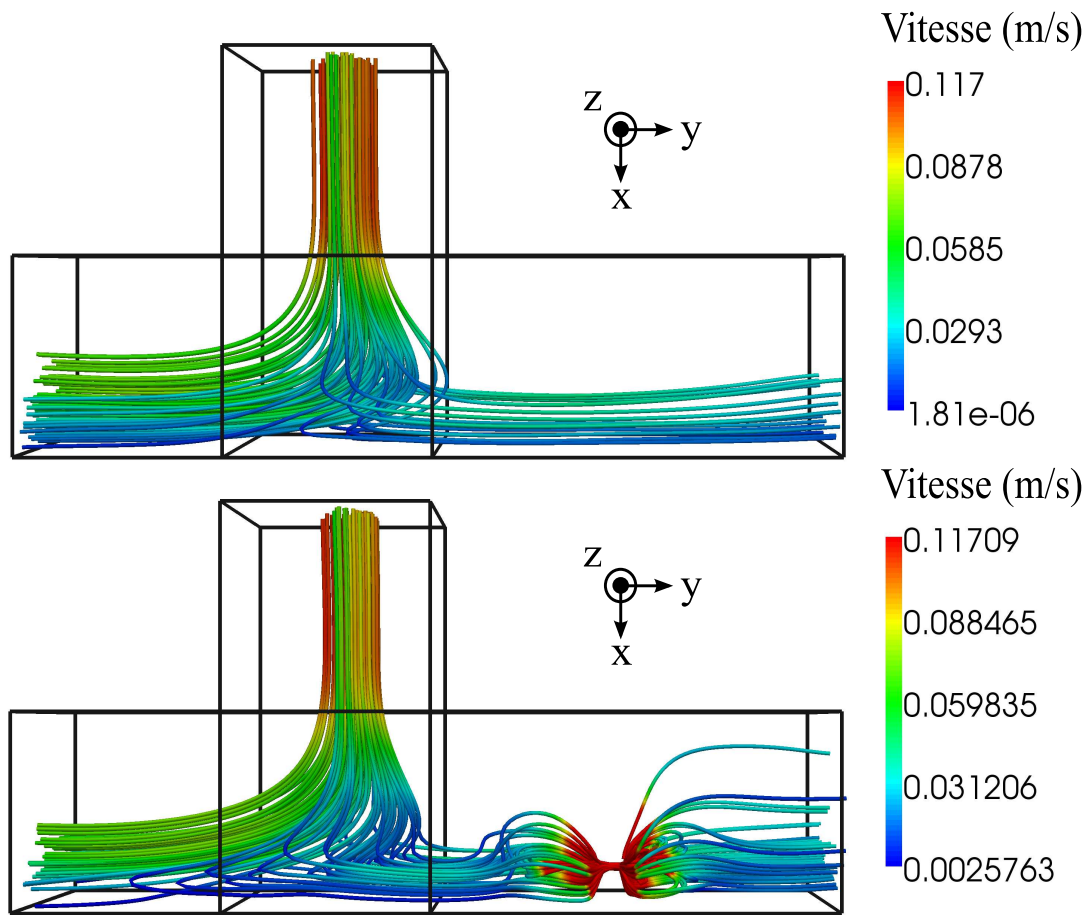


FIGURE 9.6 – Lignes de courant calculées sur les vitesses obtenues par simulations numériques sur le modèle (9.1a-9.1c) pour deux valeurs de κ . En haut : $\kappa = 0.3$. En bas $\kappa = 0$.

à l'augmentation progressive de la contrainte dans le canal en un point. Lorsqu'au contraire, on ajoute une non-linéarité, les vitesses n'explorent pas. Cette étude illustre dans un véritable contexte d'écoulement que, comme on l'a remarqué au chapitre 6, le modèle de Johnson-Segalman possède un comportement instable lorsque l'écoulement possède une composante d'élongation suffisamment grande. Dans le cas particulier d'un écoulement dans une jonction micro-fluidique, l'élongation est donc suffisamment importante pour nécessiter l'ajout d'une non-linéarité dans la loi de comportement.

9.3.2 Jonctions asymétriques : $\frac{L_2}{L_1} = 2$

Pour les simulation numériques qui vont suivre, on se place exactement dans les mêmes conditions que celles décrites dans la section 9.2.4. La seule différence réside dans les conditions aux limites choisies pour les vitesses. On considère ici des conditions de Neumann en sortie :

$$\partial_y V|_{\Gamma_s^1} = \partial_y V|_{\Gamma_s^2} = 0, \quad (9.14)$$

On fixe, par ailleurs, plusieurs débits d'entrée :

$$Q_e = [25.28, 33, 49.66, 57.18, 72.04, 146.66, 293.54] \mu L.s^{-1}, \quad (9.15)$$

Pour chacun de ces débits d'entrée on effectue une simulation numérique avec la résolution suivante pour le maillage : $N_x \times N_y \times N_z = 100 \times 200 \times 50$.

La Fig. 9.7 présente quelques résultats de simulations numériques sur le modèle (9.1a-9.1c), dans les conditions décrites au dessus, obtenus à l'état stationnaire. On constate, sur chaque simulation présentée, que la pression présente le comportement souhaité, c'est à dire qu'elle est au même niveau aux deux sorties Γ_s^1 et Γ_s^2 . L'utilisation des conditions de sortie (9.14) semblent donc convenir à ce type d'étude. Les simulations montrent également la tendance du fluide à passer préférentiellement par la branche de sortie la plus courte, ce qui est un comportement attendu pour n'importe quel type de fluide. Toutefois cet effet est ici très exagéré, et dans certains cas (par exemple $Q_e = 25.28 \mu L.s^{-1}$), seule une fraction infime du fluide passe par la branche de sortie la plus longue. Intéressons nous à présent, comme à la section 9.2.3, aux rapports de débits de sortie obtenus par simulation directe.

La Fig. 9.8 montre les rapports de débits Q_{s1}/Q_{s2} obtenus par simulation directe pour les différentes valeurs (9.16) de Q_e . On constate sur cette figure que ce rapport de débits de sortie suit la même tendance que celle constatée à la section 9.2.3, c'est à dire que l'effet de bouchage s'estompe à mesure que l'on augmente le débit d'entrée dans la jonction. Toutefois, les points obtenus par simulation directe sont bien au dessus de ceux obtenus grâce à l'algorithme développé à la section 9.2, ce qui montre le rôle non-négligeable de la jonction dans ce type d'écoulements. Il est par conséquent nécessaire d'effectuer des simulations directes sur le modèle (9.1a-9.1c) afin d'obtenir des prédictions réalistes sur les débits de sortie de la jonction, et sur l'effet de "bouchage" propre aux écoulements de micelles géantes.

9.3.3 Jonctions faiblement asymétriques : $\frac{L_2}{L_1} \sim 1$

Dans cette section on se propose d'étudier des écoulements dans des jonctions qui contrairement à ce qui a été fait précédemment, possèdent des branches de sortie dont les longueurs sont assez proches. On considère le rapport de longueurs des branches de sortie suivant :

$$\frac{L_2}{L_1} = 1 + \omega,$$

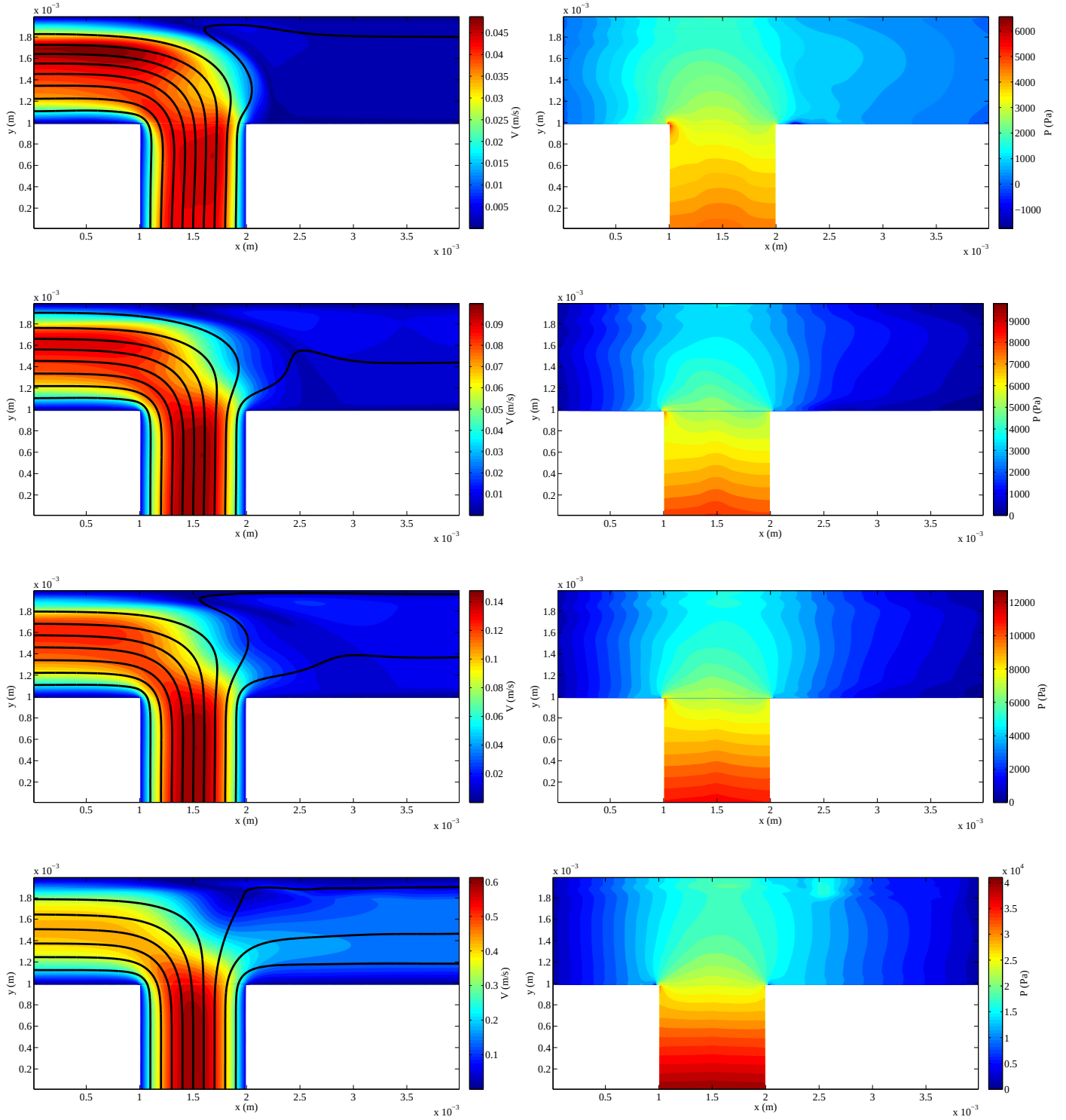


FIGURE 9.7 – Simulations numériques d'écoulement de micelles géantes dans une jonction en T asymétrique. Conditions aux limites de Neumann sur la vitesse en sortie. Débits d'entrée (de haut en bas) $Q_e = [25.28, 49.66, 72.04, 293.54] \mu\text{L.s}^{-1}$. A gauche : coupe en $z = h/2$ du champ de vitesses et lignes de courant partant de l'entrée. A droite : coupe en $z = h/2$ du champ de pressions.

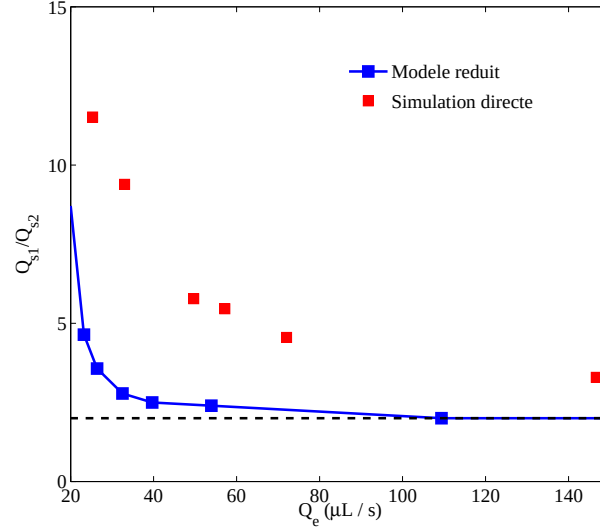


FIGURE 9.8 – Rapports de débits Q_{s1}/Q_{s2} en fonction du débit d'entrée Q_e . En rouge résultat obtenu par simulation numérique directe sur le modèle (9.1a-9.1c). En bleu, résultats obtenus précédemment sur le modèle simplifié. En pointillés, résultat attendu sur un fluide Newtonien.

où ω est petit devant 1. On fixe pour la suite le débit d'entrée à $Q_e =$. On garde les paramètres rhéologiques (9.2-9.6), et on fait varier ω :

$$\omega = [0.025, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3]. \quad (9.16)$$

On garde également les mêmes conditions aux limites qu'à la section précédente (Dirichlet en entrée, Neumann en sortie). La résolution du maillage pour les calculs suivants est : $N_x \times N_y \times N_z = 100 \times 150 \times 50$.

La figure 9.9 montre des résultats de simulations numériques effectuées dans les conditions ci-dessus. On remarque que l'écoulement se fait toujours nettement plus important dans la branche la plus courte, même lorsque la différence de longueur entre les deux branches de sortie est très petite ($\omega = 0.025$). Comme on s'y attend, lorsque ω augmente, cet effet est amplifié.

La Fig. 9.10 montre le rapport de débits de sortie en fonction, non plus du débit d'entrée, qui ici est fixé, mais du paramètre ω qui règle l'asymétrie de la jonction. On constate que l'effet de bouchage observé ici est très sensible à l'asymétrie de la jonction. Par exemple pour une variation de longueur de l'ordre de 2.5% entre les deux branches de sorties, il s'écoule plus d'une fois et demi plus de fluide dans la branche la plus courte que dans la branche la plus longue.

Cette sensibilité de l'écoulement à la géométrie est un obstacle majeur à l'établissement d'une loi simple (type Darcy) pour décrire des écoulements de micelles géantes dans des réseaux complexes de micro-canaux. Examinons à présent le cas très particulier d'une jonction parfaitement symétrique.

9.3.4 Jonction symétriques

On s'intéresse ici au cas particulier d'un écoulement de micelles géantes dans une jonction parfaitement symétrique. Pour les simulations, on reprend tous les paramètres utilisés à la section précédente

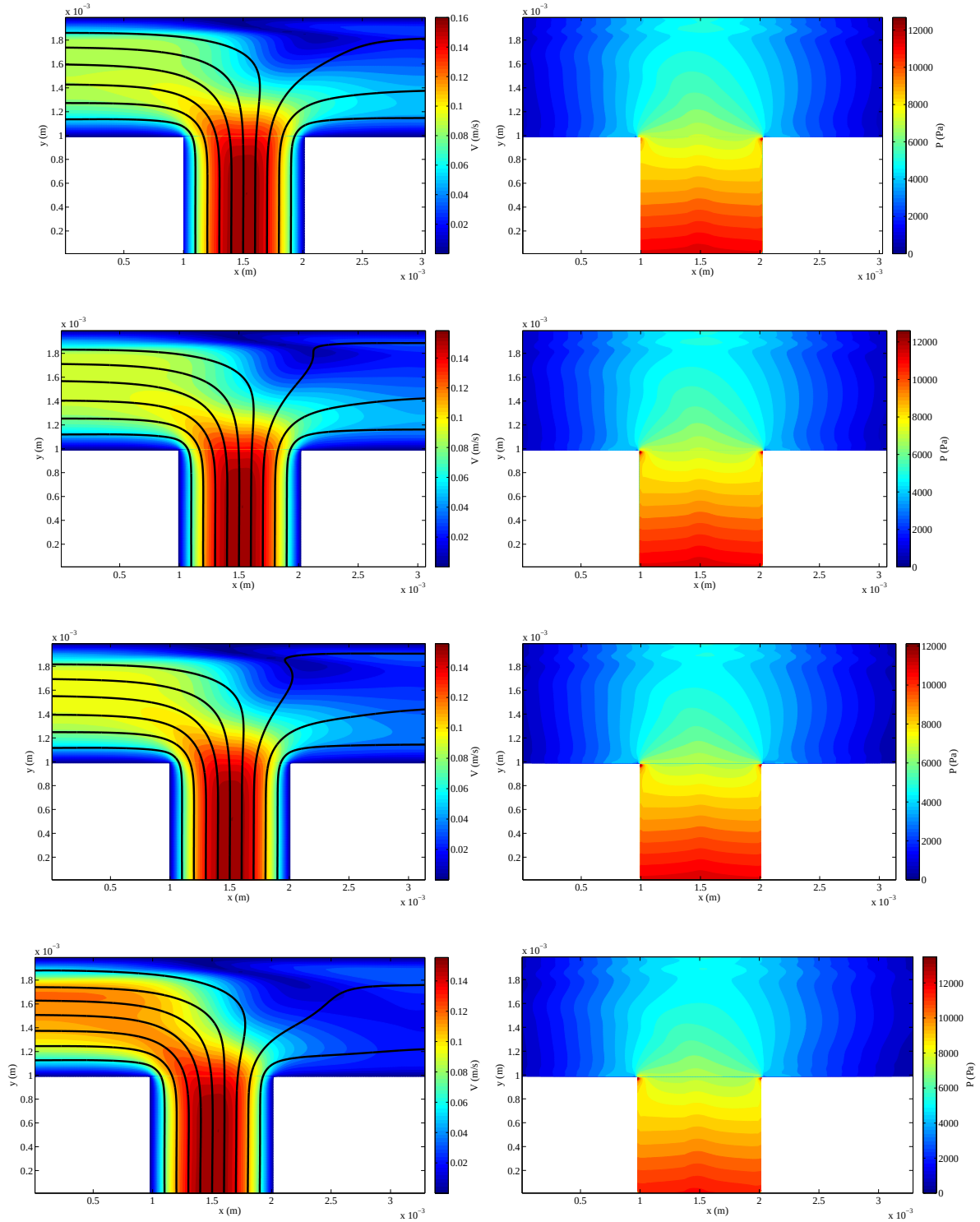


FIGURE 9.9 – Simulations numériques d'écoulement de micelles géantes dans une jonction en T faiblement asymétriques. Valeurs du paramètre réglant la différence des longueurs des blanches de sorties L_1 et L_2 (de haut en bas) : $\omega = [0.025, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3]$. A gauche : coupe en $z = h/2$ du champ de vitesses et lignes de courant partant de l'entrée. A droite : coupe en $z = h/2$ du champ de pressions.

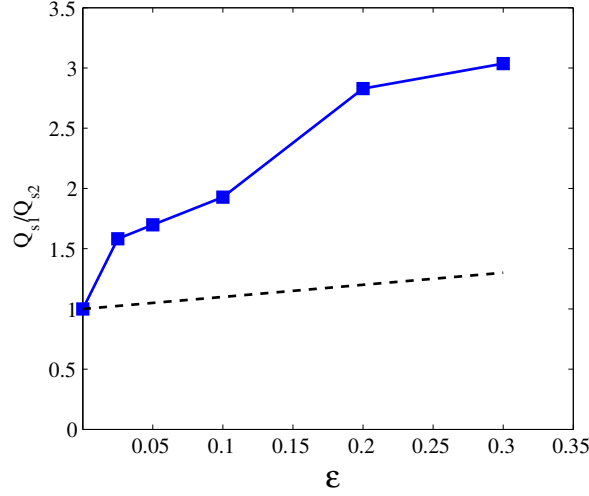


FIGURE 9.10 – Rapports de débits Q_{s1}/Q_{s2} en fonction de l’asymétrie ω de la jonction, obtenue par simulation directe sur le modèle (9.1a-9.1c). En pointillés, résultat attendu sur un fluide Newtonien.

avec $\omega = 0$. La Fig. 9.11 montre les profils de vitesse obtenus par simulation numérique en différents instants de l’écoulement. Dans cette simulation on n’observe pas de régime stationnaire, et l’écoulement semble osciller périodiquement autour d’une position d’équilibre. Cette alternance est encore plus flagrante si on s’intéresse au taux de cisaillement représenté sur la Fig. 9.12 à plusieurs instants. Sur cette figure on observe une alternance portant sur les bandes de cisaillement fort se formant à proximité du mur qui se trouve face à l’entrée de la jonction (en $y = 2\text{ mm}$). Il semble que ce soit cette compétition entre les bandes de fort cisaillement à proximité de ce mur qui soit ici à l’origine de la déstabilisation de l’écoulement. On se trouve donc dans un cas où l’effet de la jonction est très fort.

9.4 Conclusion et perspectives

Dans ce chapitre nous avons abordé un cas d’écoulement de micelles géantes pour lequel il est absolument nécessaire d’effectuer des simulations 3D, d’une part afin d’être capable de faire des prédictions réalistes, et d’autre part afin de mieux comprendre les mécanismes mis en jeu dans ces écoulements. Nous avons vu, que des arguments simples s’appuyant sur des relations débits/pression ne permettaient pas de prédire de manière satisfaisante les rapports de débits entre les deux sorties de la jonction. Nous sommes donc en présence d’un cas où l’utilité de la simulation numérique 3D est cruciale pour quantifier les effets de la jonction. Ces simulations numériques nous ont par ailleurs permis d’évaluer la sensibilité des résultats sur les débits de sortie de la jonction à l’asymétrie du domaine. Tous ces éléments laissent supposer que la description de l’écoulement dans une géométrie plus complexe, comme par exemple un réseau de micro-canaux ou bien une roche poreuse, s’avère être une tâche très difficile. Enfin, nous avons pu mettre en évidence un phénomène étrange d’instabilité dans une jonction purement symétrique, phénomène lié vraisemblablement à l’interaction entre les différentes bandes de cisaillement se formant sur le mur se trouvant face à l’entrée de la jonction.

D’autres études numériques pourraient être menées à l’avenir sur ce cas. Tout d’abord il serait intéressant de quantifier les effets du confinements sur les résultats (importance des effets 3D). D’autre part, le rôle de l’élongation étant bien plus important ici que dans des cas d’écoulements dans des

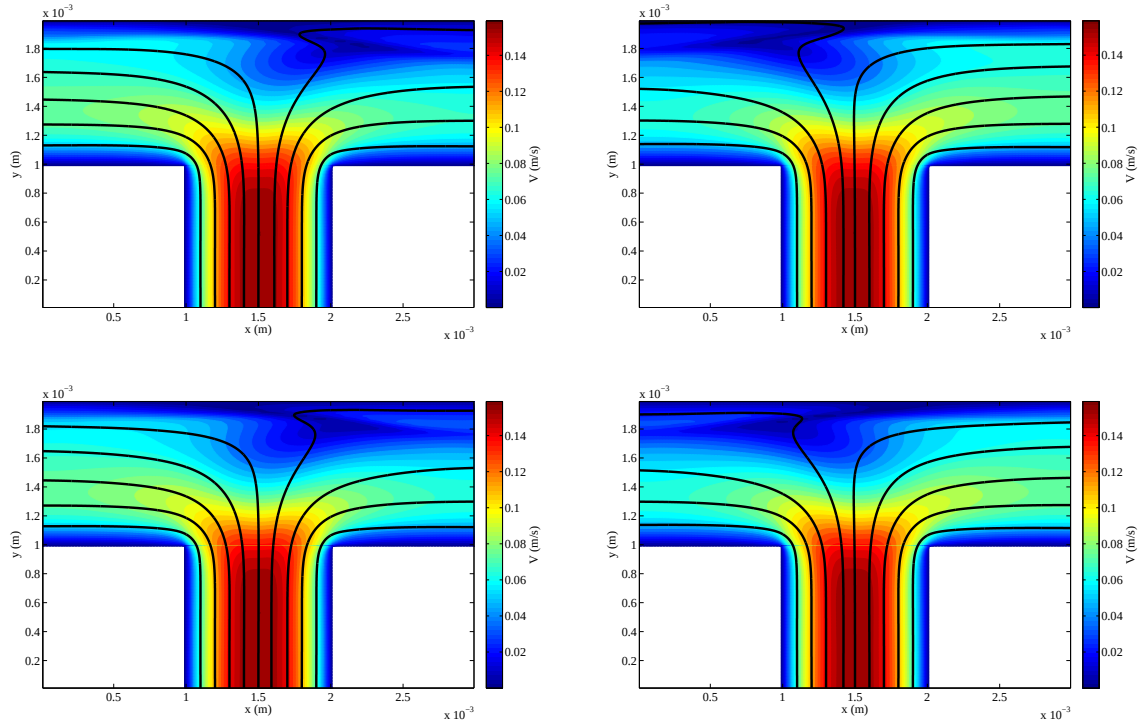


FIGURE 9.11 – Champs de vitesse et lignes de courant en différents instants obtenus par simulation numérique sur le modèle (9.1a-9.1c) pour une jonction parfaitement symétrique (coupe en $z = h/2$).

canaux droits, il serait judicieux d'évaluer la validité physique du modèle choisi du point de vue de son comportement en extension. La rhéologie en élongation choisie ici prévoit une augmentation de la viscosité élongationnelle avec le taux d'élongation. La littérature semble au contraire suggérer une diminution très importante de la viscosité élongationnelle [60] avec le taux d'élongation. La dérivation d'un modèle ayant un comportement plus réaliste en élongation pourrait donner des résultats bien différents de ceux exposés ici.

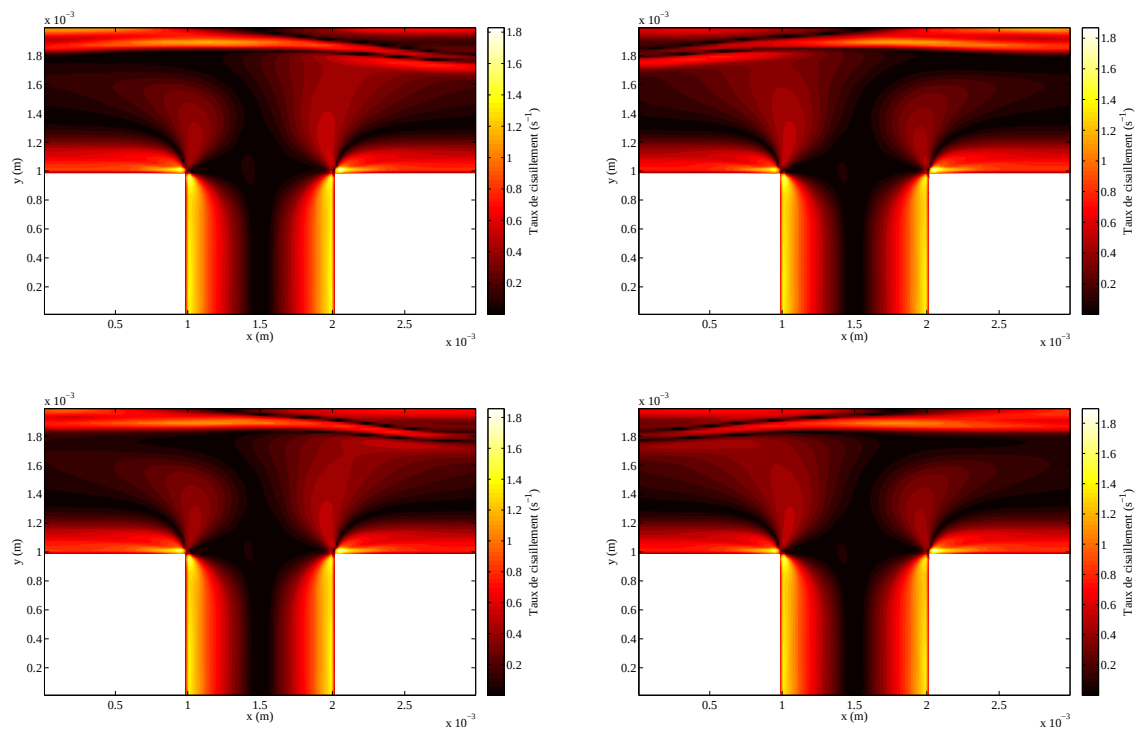


FIGURE 9.12 – Répartition spatiale du taux de cisaillement $|\dot{\gamma}|$ en différents instants obtenus par simulation numérique sur le modèle (9.1a - 9.1c) pour une jonction parfaitement symétrique (coupe en $z = h/2$).

Conclusion

Ce document a été consacré à l'étude de quelques écoulements de fluides complexes en microfluidique nécessitant un travail de modélisation et d'analyse numérique. Nous nous sommes intéressés à deux types d'écoulements : d'une part les mélanges de fluides dans des canaux fins et d'autre part aux écoulements monofluides de micelles géantes en solution.

Problèmes de mélange dans des domaines fins

La première partie de ce mémoire a été consacrée à l'étude du mélange de fluides dans des géométries fines. Dans un premier temps (chapitre 1) nous avons rappelé la construction du modèle général d'hydrodynamique de mélange, et le problème de la définition du tenseur des contraintes pour un mélange conduisant à l'écriture de deux modèles distincts. La géométrie fine des micro-canaux utilisés dans les expériences permet ici une description simplifiée de l'écoulement. Dans le chapitre 2 nous proposons une approximation des modèles de mélange exposés au chapitre 1. Cette approximation se fait sur la base de considérations sur la géométrie du domaine (domaine fin). Le modèle de Reynolds obtenu prend en compte les conditions aux limites en haut et au fond du canal de façon très naturelle, en effet ces dernières apparaissent comme des coefficients du modèle réduit. Par ailleurs, les modèles obtenus après réduction permettent de nous affranchir de la question du modèle de mélange à utiliser (équivalence des modèles "massiques" et "volumiques"). Dans ce chapitre on dérive deux types de modèles : un modèle 2D et un modèle 2.5D dans lequel on reconstruit une vitesse 3D complète grâce à la condition d'incompressibilité : $\nabla \cdot V = 0$.

Une méthode numérique a été développée au chapitre 3 permettant l'étude des modèles écrits au chapitre 2. Deux études numériques ont alors été menées : la première (chapitre 4) a été consacrée à l'étude de l'interdiffusion de fluides de différentes viscosités dans un canal droit, dans la deuxième (chapitre 5) on s'intéresse aux résultats donnés par le modèle dans le cas de conditions de glissement ou d'adhérence dans un canal à reliefs. A la lumière de ces études on peut conclure que :

- Le modèle de Reynolds 2D permet une description satisfaisante de l'hydrodynamique d'un mélange de fluides de différentes viscosités dans les expériences de co-flow. Des comparaisons quantitatives avec des données issues des expériences ont donné des résultats intéressants sur l'évolution de la position et de la largeur dans le canal de la zone de mélange entre les deux fluides (eau/glycérol-eau) mis en présence.
- Les résultats numériques sur modèles réduits 2.5D écrits dans le cas particulier d'un canal à reliefs, bien que convergeant vers ceux du modèle de Stokes (dont ils dérivent) à mesure que l'épaisseur du canal diminue, ne permettent pas de rendre compte de certains phénomènes indispensables aux applications envisagées (accélération de mélange par ajout de reliefs), comme par exemple le confinement de l'écoulement.

Dans l'avenir, plusieurs approfondissements peuvent être envisagés, en particulier sur l'étude de l'interdiffusion de fluides dans les expériences de co-flow. Le domaine d'applications visé dans ce type d'expérience est le suivi de la réaction chimique entre les constituants des fluides mis en présence. Il serait donc intéressant à l'avenir d'ajouter un modèle de réaction chimique aux modèles développés dans cette partie de la thèse. Les comparaisons avec l'expérience pourraient nous permettre de déterminer des constantes de réaction. Les modèles montrés au dessus pourraient également permettre une bonne description de l'écoulement lorsque les propriétés mécaniques des produits de la réaction sont différentes de celles des réactifs présents dans les deux fluides que l'on met en contact (polymérisation par exemple).

Écoulements de solutions de micelles géantes

La deuxième partie de cette thèse a été consacrée à l'étude d'écoulements de micelles géantes. Une loi de comportement existant dans la littérature, le modèle de Johnson-Segalman, a été introduite au chapitre 6. Nous avons apporté à ce modèle une modification afin de le rendre utilisable dans toutes les situations d'écoulement (écoulements cisailés, écoulements d'élongation). Une méthode numérique a ensuite été introduite au chapitre 7 afin d'étudier ce modèle. La discrétisation de ces équations a posé deux problèmes, d'une part un problème de stabilité lié à au couplage explicite entre la loi de comportement et l'équation de conservation de la quantité de mouvement et d'autre part un problème d'oscillations d'origine numérique apparaissant lorsque le fluide se sépare en deux phases (bandes de cisaillement). Des solutions ont été apportées pour remédier à ces problèmes :

- Une condition nécessaire de stabilité a été donnée sur un sous-modèle du modèle complet. Cette condition de stabilité dépend du rapport de viscosité $\frac{\eta}{G\tau}$ entre les contributions du "solvant" et du "polymère" à la contrainte interne du fluide.
- L'ajout dans la loi de comportement d'un terme de diffusion artificiel dont l'importance diminue à mesure que le maillage est raffiné.

Du point de vue de l'analyse numérique des modèles de micelles géantes, beaucoup de travail reste à faire, en particulier l'étude de stabilité du modèle complet.

Deux études ont été menées grâce à l'outil numérique développé au chapitre 7. La première étude, présentée au chapitre 7 a concerné des écoulements dans une conduite droite de type canyon. Dans cette étude on s'est intéressés en particulier au phénomène de formation de bandes de cisaillement dans le fluide et aux effets non locaux engendrés par l'ajout d'un terme de diffusion dans la loi de comportement. Cette étude nous a permis de constater plusieurs faits :

- Le phénomène de formation de bandes de cisaillement se fait par évitement dynamique d'une partie de la courbe d'écoulement non-monotone du modèle de Johnson-Segalman, la partie de pente négative.
- La diffusion dans le modèle est un ingrédient indispensable pour une description de la formation de bandes de cisaillement qui soit indépendante de l'état initial du fluide.
- La diffusion dans la loi de comportement peut mener, suivant le type de conditions aux limites adjointes au modèle, à la perte de notion de courbe d'écoulement, c'est à dire à un diagramme contrainte/cisaillement dans le canal qui dépende de la force du gradient de pression appliqué. Cette constatation sur le modèle rejoint l'analyse des observations effectuées par Chloé Masselon au L.O.F.

Bien qu'ayant permis de retrouver les effets non-locaux observés dans les expériences, il est difficile de donner un véritable sens aux conditions aux limites que nous avons utilisées. A plus forte raison, nous ne sommes pas en mesure de relier les conditions aux limites sur la contrainte à l'état de la surface (rugosités, nature chimique) des canaux utilisés, dans le cas particulier du modèle de Johnson-Segalman. Il serait donc judicieux pour la suite de travailler dans ce sens, et d'établir une loi rhéologique "de surface" permettant de pouvoir moduler, comme dans les expériences, la nature des murs du canal.

La deuxième étude du modèle présenté au chapitre 6 a porté sur des écoulements de micelles géantes dans des jonctions micro-fluidiques en forme de "T". Dans ce chapitre nous avons effectué des simulations numériques directes sur le modèle décrit au chapitre 6. Dans cette étude nous avons pu constater principalement trois faits :

- La modification du modèle décrit au chapitre 6 consistant en l’ajout d’une non-linéarité quadratique dans les équations, est absolument nécessaire ici, car l’écoulement possède une forte composante d’élongation.
- La redistribution des débits dans les deux sorties de la jonction est un phénomène complexe qui nécessite d’effectuer des simulations numériques 3D directement sur le modèle complet.
- La répartition de l’écoulement dans ces deux branches de sortie est très sensible à la symétrie de la jonction. Par exemple, si la différence des longueurs des deux branches de sortie de la jonction est de l’ordre de 2.5%, il s’écoule alors une fois et demi plus de fluide dans la branche la plus courte que dans la branche la plus longue.

On peut conclure de ces deux constatations qu’il sera très difficile de prédire la répartition de l’écoulement dans un réseau de canaux plus complexe, et à plus forte raison dans une roche poreuse. Par ailleurs, le fait qu’il soit nécessaire de modifier le modèle à cause du comportement catastrophique du modèle (linéaire) de Johnson-Segalman dans un écoulement d’élongation montre bien l’importance que revêt ici la rhéologie en élongation. Il serait donc judicieux par la suite de déterminer l’influence de cette dernière sur les résultats.

Annexes

Annexe A : Equivalence des modèles "massique" et "volumique" dans l'approximation de Hele-Shaw

On rappelle tout d'abord l'expression des modèles d'hydrodynamique de mélange introduits au chapitre 1. On considère le modèle dit "volumique" (qui construit le tenseur des taux de déformation sur la vitesse "volumique") :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \left[2\eta(\phi) \left(\frac{\nabla V_\phi + \nabla V_\phi^t}{2} \right) \right] = \nabla P, \end{array} \right. \quad (\text{a.1a})$$

$$\nabla \cdot V_\phi = 0, \quad (\text{a.1b})$$

$$\partial_t \phi + V_\phi \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot (\mathcal{D} \nabla \phi) = 0, \quad (\text{a.1c})$$

et le modèle dit "massique" (qui construit le tenseur des taux de déformation sur la vitesse "massique") :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \left[2\eta(\phi) \left(\frac{\nabla V_\phi + \nabla V_\phi^t}{2} \right) \right] = \xi \nabla \cdot (\eta(\phi) (2\tilde{\mathcal{D}} H(\phi) + \nabla \tilde{\mathcal{D}} \times \nabla \phi + \nabla \phi \times \nabla \tilde{\mathcal{D}})) \\ \quad - \frac{4}{3} \xi \nabla \left[\eta(\phi) \nabla \cdot (\tilde{\mathcal{D}} \nabla \phi) \right] + \nabla P, \end{array} \right. \quad (\text{a.2a})$$

$$\nabla \cdot V_\phi = 0, \quad (\text{a.2b})$$

$$\partial_t \phi + V_\phi \cdot \nabla \phi - \nabla \cdot (\mathcal{D} \nabla \phi) = 0, \quad (\text{a.2c})$$

où $H(\phi)$ représente la matrice Hessienne de ϕ et ξ une constante du modèle. La différence entre ces deux modèles réside dans l'ajout d'un certains nombre de termes que l'on notera $R(\phi) = (R_x(\phi), R_y(\phi), R_z(\phi))$, dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$R(\phi) = 2\xi \nabla \cdot (\eta(\phi) (2\tilde{\mathcal{D}} H(\phi) + \nabla \tilde{\mathcal{D}} \times \nabla \phi + \nabla \phi \times \nabla \tilde{\mathcal{D}})) - \frac{4}{3} \xi \nabla \left[\eta(\phi) \nabla \cdot (\tilde{\mathcal{D}} \nabla \phi) \right]. \quad (\text{a.3})$$

On se restreindra, pour plus de simplicité à un coefficient de diffusion $\tilde{\mathcal{D}}$ constant. $R(\phi)$ devient alors :

$$R(\phi) = 2\tilde{\mathcal{D}} \xi \nabla \cdot (\eta(\phi) H(\phi)) - \frac{4}{3} \tilde{\mathcal{D}} \xi \nabla (\eta(\phi) \Delta \phi). \quad (\text{a.4})$$

Développons à présent cette expression sur les trois composantes d'espace (pour simplifier les écritures on note $\eta(\phi) = \eta$) :

$$R_x(\phi) = 2\xi \tilde{\mathcal{D}} (\partial_x(\eta \partial_{xx}^2 \phi) + \partial_y(\eta \partial_{xy}^2 \phi) + \partial_z(\eta \partial_{xz}^2 \phi)) - \frac{4}{3} \xi \tilde{\mathcal{D}} \partial_x (\eta (\partial_{xx}^2 \phi + \partial_{yy}^2 \phi + \partial_{zz}^2 \phi)),$$

$$R_y(\phi) = 2\xi \tilde{\mathcal{D}} (\partial_y(\eta \partial_{yy}^2 \phi) + \partial_x(\eta \partial_{xy}^2 \phi) + \partial_z(\eta \partial_{yz}^2 \phi)) - \frac{4}{3} \xi \tilde{\mathcal{D}} \partial_y (\eta (\partial_{xx}^2 \phi + \partial_{yy}^2 \phi + \partial_{zz}^2 \phi)),$$

$$R_z(\phi) = \xi \tilde{\mathcal{D}} (\partial_z(\eta \partial_{zz}^2 \phi) + \partial_x(\eta \partial_{xz}^2 \phi) + \partial_y(\eta \partial_{yz}^2 \phi)) - \frac{4}{3} \xi \tilde{\mathcal{D}} \partial_z (\eta (\partial_{xx}^2 \phi + \partial_{yy}^2 \phi + \partial_{zz}^2 \phi)).$$

On applique alors les adimensionnements sur x, y, z, η introduits au chapitre 2 :

$$R_x(\phi) = \xi \eta_0 \tilde{\mathcal{D}} \left(2 \left(\frac{1}{l^3} \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{x}}^2 \phi) + \frac{1}{l^3} \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{1}{l^2 h} \partial_{\tilde{z}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{z}}^2 \phi) \right) - \frac{4}{3} \left(\frac{1}{l^3} \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{x}}^2 \phi) + \frac{1}{l^3} \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{1}{h^2 l} \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{z}\tilde{z}}^2 \phi) \right) \right), \quad (\text{a.5})$$

$$R_y(\phi) = \xi \eta_0 \tilde{D} \left(2 \left(\frac{1}{l^3} \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{1}{l^3} \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{1}{l^2 h} \partial_{\tilde{z}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{z}}^2 \phi) \right) - \right. \\ \left. \frac{4}{3} \left(\frac{1}{l^3} \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{x}}^2 \phi) + \frac{1}{l^3} \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{1}{h^2 l} \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{z}\tilde{z}}^2 \phi) \right) \right), \quad (\text{a.6})$$

$$R_z(\phi) = \xi \eta_0 \tilde{D} \left(2 \left(\frac{1}{h^3} \partial_{\tilde{z}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{z}\tilde{z}}^2 \phi) + \frac{1}{l^2 h} \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{z}}^2 \phi) + \frac{1}{l^2 h} \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{z}}^2 \phi) \right) - \right. \\ \left. \frac{4}{3} \left(\frac{1}{l^2 h} \partial_{\tilde{z}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{x}}^2 \phi) + \frac{1}{l^2 h} \partial_{\tilde{z}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{1}{h^3} \partial_{\tilde{z}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{z}\tilde{z}}^2 \phi) \right) \right). \quad (\text{a.7})$$

Comme au chapitre 2 on multiplie ensuite (a.5- a.7) par $\frac{l^2}{u_0 \eta_0}$. On note également le nombre de Péclet :

$$\mathcal{P}e = \frac{u_0 l}{\tilde{D}},$$

Ce nombre de Péclet est indépendant de ε , il sera donc placé en facteur. On obtient alors :

$$R_x^* = \frac{l^2}{u_0 \eta_0} R_x(\phi) = \frac{\xi}{\mathcal{P}e} \left(2 \left(\partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{x}}^2 \phi) + \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{l}{h} \partial_{\tilde{z}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{z}}^2 \phi) \right) - \right. \\ \left. \frac{4}{3} \left(\partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{x}}^2 \phi) + \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{l^2}{h^2} \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{z}\tilde{z}}^2 \phi) \right) \right), \quad (\text{a.8})$$

$$R_y^* = \frac{l^2}{u_0 \eta_0} R_y(\phi) = \frac{\xi}{\mathcal{P}e} \left(2 \left(\partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{y}}^2 \phi) + \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{l}{h} \partial_{\tilde{z}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{z}}^2 \phi) \right) - \right. \\ \left. \frac{4}{3} \left(\partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{x}}^2 \phi) + \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{l^2}{h^2} \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{z}\tilde{z}}^2 \phi) \right) \right), \quad (\text{a.9})$$

$$R_z^* = \frac{l^2}{u_0 \eta_0} R_z(\phi) = \frac{\xi}{\mathcal{P}e} \left(2 \left(\frac{l^3}{h^3} \partial_{\tilde{z}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{z}\tilde{z}}^2 \phi) + \frac{l}{h} \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{z}}^2 \phi) + \frac{l}{h} \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{z}}^2 \phi) \right) - \right. \\ \left. \frac{4}{3} \left(\frac{l}{h} \partial_{\tilde{z}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{x}}^2 \phi) + \frac{l}{h} \partial_{\tilde{z}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{l^3}{h^3} \partial_{\tilde{z}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{z}\tilde{z}}^2 \phi) \right) \right). \quad (\text{a.10})$$

Dans le chapitre 2 on a fixé le paramètre d'ordre ε de cette manière :

$$\frac{h}{l} = c_1 \varepsilon.$$

Les équations (a.8 - a.10) deviennent alors :

$$R_x^* = \frac{\xi}{\mathcal{P}e} \left(2 \left(\partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{x}}^2 \phi) + \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{1}{c_1 \varepsilon} \partial_{\tilde{z}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{z}}^2 \phi) \right) - \right. \\ \left. \frac{4}{3} \left(\partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{x}}^2 \phi) + \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{1}{c_1^2 \varepsilon^2} \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{z}\tilde{z}}^2 \phi) \right) \right), \quad (\text{a.11})$$

$$R_y^* = \frac{\xi}{\mathcal{P}e} \left(2 \left(\partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{y}}^2 \phi) + \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{1}{c_1 \varepsilon} \partial_{\tilde{z}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{z}}^2 \phi) \right) - \right. \\ \left. \frac{4}{3} \left(\partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{x}}^2 \phi) + \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{1}{c_1^2 \varepsilon^2} \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{z}\tilde{z}}^2 \phi) \right) \right), \quad (\text{a.12})$$

$$R_z^* = \frac{l^2}{u_0 \eta_0} R_z(\phi) = \frac{\xi}{\mathcal{P}_e} \left(2 \left(\frac{1}{c_1^3 \varepsilon^3} \partial_z (\tilde{\eta} \partial_{zz}^2 \phi) + \frac{1}{c_1 \varepsilon} \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{xz}^2 \phi) + \frac{1}{c_1 \varepsilon} \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{yz}^2 \phi) \right) - \frac{4}{3} \left(\frac{1}{c_1 \varepsilon} \partial_z (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{x}}^2 \phi) + \frac{1}{c_1 \varepsilon} \partial_z (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{y}}^2 \phi) + \frac{1}{c_1^3 \varepsilon} \partial_z (\tilde{\eta} \partial_{zz}^2 \phi) \right) \right). \quad (\text{a.13})$$

Dès lors on a deux possibilités comme on l'a mentionné dans la section 2.3.3 au chapitre 2 :

1. soit on ne fait aucune hypothèse sur ϕ , auquel cas on a, grâce à l'équation de suivi du mélange, $\partial_z \phi = 0$ au premier ordre dans le modèle,
2. soit on fait l'hypothèse que ϕ varie lentement en z , auquel cas, toutes les dérivées en z de ϕ sont d'ordre $o(1)$ par rapport à ε .

Le cas 1. fait disparaître toutes les dérivées en z de ϕ dans (a.11 - a.10), ce qui donne :

$$\begin{aligned} R_x^* &= \frac{\xi}{\mathcal{P}_e} \left(2 \left(\partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{x}}^2 \phi) + \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{y}}^2 \phi) \right) - \frac{4}{3} \left(\partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{x}}^2 \phi) + \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{y}}^2 \phi) \right) \right), \\ R_y^* &= \frac{\xi}{\mathcal{P}_e} \left(2 \left(\partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{y}}^2 \phi) + \partial_{\tilde{x}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{y}}^2 \phi) \right) - \frac{4}{3} \left(\partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{x}\tilde{x}}^2 \phi) + \partial_{\tilde{y}} (\tilde{\eta} \partial_{\tilde{y}\tilde{y}}^2 \phi) \right) \right), \\ R_z^* &= 0, \end{aligned}$$

alors, les termes additionnels R_x^* , R_y^* , sont d'ordre $o(1)$ par rapport à ε et par conséquent n'apparaissent pas dans la réduction de modèle comme on le fait à la section (ref) du chapitre (ref), car celle ci ne fait intervenir les termes d'ordre $o(\varepsilon^{-2})$. De plus, dans ce cas, R_z^* disparaît complètement.

Le cas 2. rend tous les termes additionnels R_x^* , R_y^* et R_z^* d'ordre $o(1)$, et par conséquent ces derniers n'apparaissent pas dans la réduction du modèle car celle ci ne fait intervenir que les termes d'ordre $o(\varepsilon^{-2})$ pour les deux premières équations, et d'ordre $o(\varepsilon^{-3})$ pour la troisième équation.

Par conséquent les termes additionnels (a.3) qui font toute la différence entre les modèles d'hydrodynamique de mélange "massique" (a.1a - a.1c) et "volumique" (a.2a - a.2c), disparaissent complètement par passage à l'approximation de Hele-Shaw.

Annexe B : Calculs des comportements en cisaillement et en élongation pour le modèle de Johnson-Segalman

Comportement en cisaillement du modèle de Johnson-Segalman

La loi de comportement introduite au chapitre 6 s'écrit :

$$\partial_t \sigma_p - (\Omega \sigma_p - \sigma_p \Omega) - a(D \sigma_p + \sigma_p D) + V \cdot \nabla \sigma_p + \frac{1}{\tau} \sigma_p = 2 G D \quad (\text{b.1})$$

On considère le cas d'un cisaillement unidirectionnel, c'est à dire :

$$V = \begin{pmatrix} u(y) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \nabla V = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{b.2})$$

le fait que l'écoulement soit supposé unidirectionnel et le cisaillement homogène entraîne d'ores et déjà la disparition du terme de transport dans l'équation (b.1). Les tenseurs des taux de déformation et de rotation s'écrivent alors :

$$D = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ \dot{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Omega = \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ -\dot{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{b.3})$$

La loi de comportement s'écrit alors :

$$\partial_t \sigma_p - \dot{\gamma} \begin{pmatrix} 2 \sigma_p^{xy} & \sigma_p^{yy} - \sigma_p^{xx} & \sigma_p^{yz} \\ \sigma_p^{yy} - \sigma_p^{xx} & -2 \sigma_p^{xy} & -\sigma_p^{xz} \\ \sigma_p^{yz} & -\sigma_p^{xz} & 0 \end{pmatrix} - a \dot{\gamma} \begin{pmatrix} 2 \sigma_p^{xy} & \sigma_p^{yy} + \sigma_p^{xx} & \sigma_p^{yz} \\ \sigma_p^{yy} + \sigma_p^{xx} & 2 \sigma_p^{xy} & \sigma_p^{xz} \\ \sigma_p^{yz} & \sigma_p^{xz} & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\tau} \sigma_p = 2 G \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ \dot{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

ce qui peut être ré-écrit :

$$\partial_t \sigma_p = \dot{\gamma} \begin{pmatrix} 2(a+1)\sigma_p^{xy} & (a-1)\sigma_p^{xx} + (a+1)\sigma_p^{yy} & (a+1)\sigma_p^{yz} \\ (a-1)\sigma_p^{xx} + (a+1)\sigma_p^{yy} & 2(a-1)\sigma_p^{xy} & (a+1)\sigma_p^{xz} \\ (a+1)\sigma_p^{yz} & (a+1)\sigma_p^{xz} & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{\tau} \sigma_p + 2 G \begin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \\ \dot{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{b.4})$$

On adopte à présent la notation de Voigt afin de faire ressortir le système dynamique agissant sur les composantes du tenseur σ_p :

$$\begin{pmatrix} \sigma_p^{xx} & \sigma_p^{xy} & \sigma_p^{xz} \\ \sigma_p^{xy} & \sigma_p^{yy} & \sigma_p^{yz} \\ \sigma_p^{xz} & \sigma_p^{yz} & \sigma_p^{zz} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \sigma_p^{xx} \\ \sigma_p^{yy} \\ \sigma_p^{zz} \\ \sigma_p^{xy} \\ \sigma_p^{xz} \\ \sigma_p^{yz} \end{pmatrix},$$

Le système (b.4) s'écrit alors :

$$\partial_t \begin{pmatrix} \sigma_p^{xx} \\ \sigma_p^{yy} \\ \sigma_p^{zz} \\ \sigma_p^{xy} \\ \sigma_p^{xz} \\ \sigma_p^{yz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\tau} & 0 & 0 & 2(a+1)\dot{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\tau} & 0 & 2(a-1)\dot{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\tau} & 0 & 0 & 0 \\ (a-1)\dot{\gamma} & (a+1)\dot{\gamma} & 0 & -\frac{1}{\tau} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\tau} & (a+1)\dot{\gamma} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & (a+1)\dot{\gamma} & -\frac{1}{\tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_p^{xx} \\ \sigma_p^{yy} \\ \sigma_p^{zz} \\ \sigma_p^{xy} \\ \sigma_p^{xz} \\ \sigma_p^{yz} \end{pmatrix} + 2G \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{\gamma} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{b.5})$$

On remarque sur ce système que les variables σ_p^{xz} , σ_p^{yz} ainsi que σ_p^{zz} sont découplées du reste du système. Etant donnée qu'elles ne sont alimentées par aucun terme source, on peut considérer que si à $t = 0$, on a : $\sigma_p^{xz} = \sigma_p^{yz} = \sigma_p^{zz} = 0$, alors pour tout temps on a : $\sigma_p^{xz} = \sigma_p^{yz} = \sigma_p^{zz} = 0$. Dans la suite on ne suit donc l'évolution que des variables σ_{xx} , σ_{yy} et σ_{xy} . Le système (b.5) s'écrit alors :

$$\partial_t \begin{pmatrix} \sigma_p^{xx} \\ \sigma_p^{yy} \\ \sigma_p^{zz} \\ \sigma_p^{xy} \\ \sigma_p^{xz} \\ \sigma_p^{yz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\tau} & 0 & 2(a+1)\dot{\gamma} \\ 0 & -\frac{1}{\tau} & 2(a-1)\dot{\gamma} \\ (a-1)\dot{\gamma} & (a+1)\dot{\gamma} & -\frac{1}{\tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_p^{xx} \\ \sigma_p^{yy} \\ \sigma_p^{xy} \end{pmatrix} + 2G \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dot{\gamma} \end{pmatrix}, \quad (\text{b.6})$$

ce qui donne à l'état stationnaire :

$$\sigma_p^{xx} = 2\tau\dot{\gamma}(a+1)\sigma_p^{xy}, \quad (\text{b.7})$$

$$\sigma_p^{yy} = 2\tau\dot{\gamma}(a-1)\sigma_p^{xy}, \quad (\text{b.8})$$

$$\sigma_p^{xy} = \tau\dot{\gamma}(a-1)\sigma_p^{xx} + \tau\dot{\gamma}(a+1)\sigma_p^{yy} + 2G\dot{\gamma}. \quad (\text{b.9})$$

En substituant (b.7) et (b.8) dans (b.9) on obtient :

$$\sigma_p^{xy} = 4\tau^2\dot{\gamma}^2(a^2-1)\sigma_p^{xy} + 2G\dot{\gamma}. \quad (\text{b.10})$$

On retrouve au final l'expression énoncée au chapitre ?? :

$$\sigma_p^{xy} = 2G \frac{\dot{\gamma}}{1 + 4\tau^2(1-a^2)\dot{\gamma}^2}.$$

Comportement en élongation du modèle de Johnson-Segalman

On reprend l'expression de la loi de comportement introduite au chapitre 6 :

$$\partial_t \sigma_p - (\Omega \sigma_p - \sigma_p \Omega) - a(D \sigma_p + \sigma_p D) + V \cdot \nabla \sigma_p + \frac{1}{\tau} \sigma_p = 2G D. \quad (\text{b.11})$$

On considère un point d'arrêt ans un écoulement d'élongation, c'est à dire :

$$V = 0, \quad \nabla V = \begin{pmatrix} 2\dot{\epsilon} & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{\epsilon} & 0 \\ 0 & 0 & -\dot{\epsilon} \end{pmatrix}, \quad (\text{b.12})$$

Du fait que $V = 0$, les termes de transport disparaissent dans l'équation (b.11). Les taux de déformation et de rotation s'écrivent :

$$D = \begin{pmatrix} 2\dot{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & -\dot{\varepsilon} \end{pmatrix}, \quad \Omega = 0, \quad (\text{b.13})$$

En ré-injectant (b.14) dans (b.11) on obtient :

$$\partial_t \sigma_p - \dot{\varepsilon} a \begin{pmatrix} 4\sigma_p^{xx} & \sigma_p^{xy} & \sigma_p^{xz} \\ \sigma_p^{xy} & -2\sigma_p^{yy} & -2\sigma_p^{yz} \\ \sigma_p^{xz} & -2\sigma_p^{xz} & -2\sigma_p^{zz} \end{pmatrix} + \frac{1}{\tau} \sigma_p = 2GD, \quad (\text{b.14})$$

que l'on réécrit via la notation de Voigt :

$$\partial_t \sigma_p^{xx} = \left(4a\dot{\varepsilon} - \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{xx} + 4G\dot{\varepsilon}, \quad (\text{b.15})$$

$$\partial_t \sigma_p^{yy} = -\left(2a\dot{\varepsilon} + \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{yy} - 2G\dot{\varepsilon}, \quad (\text{b.16})$$

$$\partial_t \sigma_p^{zz} = -\left(2a\dot{\varepsilon} + \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{zz} - 2G\dot{\varepsilon}, \quad (\text{b.17})$$

$$\partial_t \sigma_p^{xy} = \left(a\dot{\varepsilon} - \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{xy}, \quad (\text{b.18})$$

$$\partial_t \sigma_p^{xz} = \left(a\dot{\varepsilon} - \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{xz}, \quad (\text{b.19})$$

$$\partial_t \sigma_p^{yz} = \left(a\dot{\varepsilon} - \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{yz}. \quad (\text{b.20})$$

Seuls σ_p^{xx} , σ_p^{yy} , σ_p^{zz} sont alimentés par un terme source, donc, on ne suivra pour la suite que ces trois variables. Le système s'écrit alors :

$$\partial_t \sigma_p^{xx} = \left(4a\dot{\varepsilon} - \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{xx} + 2\dot{\varepsilon}, \quad (\text{b.21})$$

$$\partial_t \sigma_p^{yy} = -\left(2a\dot{\varepsilon} + \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{yy} - \dot{\varepsilon}, \quad (\text{b.22})$$

$$\partial_t \sigma_p^{zz} = -\left(2a\dot{\varepsilon} + \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{zz} - \dot{\varepsilon}. \quad (\text{b.23})$$

Si on considère la première équation, on remarque que ce σ_p^{xx} admet une solution stationnaire stable si :

$$4a\dot{\varepsilon} - \frac{1}{\tau} < 0,$$

c'est à dire si :

$$\dot{\varepsilon} < \frac{1}{4a\tau}.$$

Les solutions stationnaires de (b.21 - b.23) s'écrivent :

$$\begin{aligned} \sigma_p^{xx} &= -\frac{2\dot{\varepsilon}}{4a\dot{\varepsilon} - \frac{1}{\tau}} \\ \sigma_p^{yy} &= -\frac{\dot{\varepsilon}}{2a\dot{\varepsilon} + \frac{1}{\tau}} \\ \sigma_p^{zz} &= -\frac{\dot{\varepsilon}}{2a\dot{\varepsilon} + \frac{1}{\tau}}. \end{aligned}$$

Comportement en élongation du modèle modifié

On a considéré dans le chapitre 6 l'ajout au modèle (b.1) une non-linéarité quadratique :

$$\partial_t \sigma_p - (\Omega \sigma_p - \sigma_p \Omega) - a(D \sigma_p + \sigma_p D) + V \cdot \nabla \sigma_p + \frac{1}{\tau} \sigma_p - \frac{\kappa}{G \tau} (\sigma_p)^2 = 2 G D \quad (\text{b.24})$$

Développons à présent ce système :

$$\partial_t \sigma_p^{xx} = \left(4 a \dot{\varepsilon} - \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{xx} - \frac{\kappa}{G \tau} ((\sigma_p^{xx})^2 + (\sigma_p^{xy})^2 + (\sigma_p^{xz})^2) + 4 G \dot{\varepsilon}, \quad (\text{b.25})$$

$$\partial_t \sigma_p^{yy} = - \left(2 a \dot{\varepsilon} + \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{yy} - \frac{\kappa}{G \tau} ((\sigma_p^{xy})^2 + (\sigma_p^{yy})^2 + (\sigma_p^{yz})^2) - 2 G \dot{\varepsilon}, \quad (\text{b.26})$$

$$\partial_t \sigma_p^{zz} = - \left(2 a \dot{\varepsilon} + \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{zz} - \frac{\kappa}{G \tau} ((\sigma_p^{xz})^2 + (\sigma_p^{yz})^2 + (\sigma_p^{zz})^2) - 2 G \dot{\varepsilon}, \quad (\text{b.27})$$

$$\partial_t \sigma_p^{xy} = \left(a \dot{\varepsilon} - \frac{1}{\tau} - \frac{\kappa}{G \tau} (\sigma_p^{xx} + \sigma_p^{yy}) \right) \sigma_p^{xy} - \frac{\kappa}{G \tau} \sigma_p^{xz} \sigma_p^{yz}, \quad (\text{b.28})$$

$$\partial_t \sigma_p^{xz} = \left(a \dot{\varepsilon} - \frac{1}{\tau} - \frac{\kappa}{G \tau} (\sigma_p^{xx} + \sigma_p^{zz}) \right) \sigma_p^{xz} - \frac{\kappa}{G \tau} \sigma_p^{xy} \sigma_p^{yz}, \quad (\text{b.29})$$

$$\partial_t \sigma_p^{yz} = \left(a \dot{\varepsilon} - \frac{1}{\tau} - \frac{\kappa}{G \tau} (\sigma_p^{yy} + \sigma_p^{zz}) \right) \sigma_p^{yz} - \frac{\kappa}{G \tau} \sigma_p^{xy} \sigma_p^{xz}. \quad (\text{b.30})$$

Si on étudie à part les trois dernières équations (b.28 - b.30), on s'aperçoit que, du fait de l'absence de termes sources dans cette équation, si à $t = 0$ on a : $\sigma_p^{xy} = \sigma_p^{xz} = \sigma_p^{yz} = 0$, alors pour tout t on a $\sigma_p^{xy} = \sigma_p^{xz} = \sigma_p^{yz} = 0$. Le système (b.25 - b.30) s'écrit alors :

$$\partial_t \sigma_p^{xx} = \left(4 a \dot{\varepsilon} - \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{xx} - \frac{\kappa}{G \tau} (\sigma_p^{xx})^2 + 4 G \dot{\varepsilon}, \quad (\text{b.31})$$

$$\partial_t \sigma_p^{yy} = - \left(2 a \dot{\varepsilon} + \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{yy} - \frac{\kappa}{G \tau} (\sigma_p^{yy})^2 - 2 G \dot{\varepsilon}, \quad (\text{b.32})$$

$$\partial_t \sigma_p^{zz} = - \left(2 a \dot{\varepsilon} + \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{zz} - \frac{\kappa}{G \tau} (\sigma_p^{zz})^2 - 2 G \dot{\varepsilon}, \quad (\text{b.33})$$

Examinons à présent les états stationnaires de chacune de ces équations. La première équation donne :

$$\left(4 a \dot{\varepsilon} - \frac{1}{\tau} \right) \sigma_p^{xx} - \frac{\kappa}{G \tau} (\sigma_p^{xx})^2 + 4 G \dot{\varepsilon} = 0.$$

La solution de cette équation s'écrit alors :

$$\sigma_p^{xx} = \frac{G}{2 \kappa} \left((4 a \tau \dot{\varepsilon} - 1) + \sqrt{(4 a \tau \dot{\varepsilon} - 1)^2 + 16 \kappa \tau \dot{\varepsilon}} \right).$$

De la même manière, on obtient :

$$\sigma_p^{yy} = \sigma_p^{zz} = \frac{G}{2 \kappa} \left(-(2 a \tau \dot{\varepsilon} + 1) + \sqrt{(2 a \tau \dot{\varepsilon} + 1)^2 - 8 \kappa \tau \dot{\varepsilon}} \right).$$

Annexe C : Ecriture de la loi de comportement de Johnson-Segalman dans la notation de Voigt

On considère le modèle décrit dans le chapitre 6 :

$$\partial_t \sigma_p + V \cdot \sigma_p = (\Omega \sigma_p - \sigma_p \Omega) + a(D \sigma_p + \sigma_p D) - \frac{1}{\tau} \sigma_p + 2 G D. \quad (\text{c.1})$$

où $M_a[V](\sigma_p)$ représente les termes de dérivée objective :

$$M_a[V](\sigma_p) = (\Omega \sigma_p - \sigma_p \Omega) + a(D \sigma_p + \sigma_p D).$$

$M_a[V](\cdot)$ est une application linéaire de l'ensemble des matrices symétriques $\mathcal{S}^3$ dans $\mathcal{S}^3$. On souhaite réécrire ce modèle en utilisant la notation de Voigt, qui ramène l'écriture de tenseurs symétriques à l'écriture d'un vecteur :

$$\begin{pmatrix} \sigma_p^{xx} & \sigma_p^{xy} & \sigma_p^{xz} \\ \sigma_p^{xy} & \sigma_p^{yy} & \sigma_p^{yz} \\ \sigma_p^{xz} & \sigma_p^{yz} & \sigma_p^{zz} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \sigma_p^{xx} \\ \sigma_p^{yy} \\ \sigma_p^{zz} \\ \sigma_p^{xy} \\ \sigma_p^{xz} \\ \sigma_p^{yz} \end{pmatrix}.$$

En utilisant cette notation, $M_a[V]$ est représentée par une matrice 6×6 :

$$M_a[V] = \begin{pmatrix} 2m_{xx} & 0 & 0 & 2m_{xy} & 2m_{xz} & 0 \\ 0 & 2m_{yy} & 0 & 2m_{yx} & 0 & 2m_{yz} \\ 0 & 0 & 2m_{zz} & 0 & 2m_{zx} & 2m_{zy} \\ m_{yx} & m_{xy} & 0 & m_{xx} + m_{yy} & m_{yz} & m_{xz} \\ m_{zx} & 0 & m_{xz} & m_{zy} & m_{xx} + m_{zz} & m_{xy} \\ 0 & m_{zy} & m_{yz} & m_{zx} & m_{yx} & m_{yy} + m_{zz} \end{pmatrix},$$

où :

$$\begin{aligned} m_{xx} &= a \partial_x u, \\ m_{yy} &= a \partial_y v, \\ m_{zz} &= a \partial_z w, \\ m_{xy} &= \frac{-(\partial_x v - \partial_y u) + a(\partial_x v + \partial_y u)}{2}, \\ m_{xz} &= \frac{-(\partial_x w - \partial_z u) + a(\partial_x w + \partial_z u)}{2}, \\ m_{yz} &= \frac{-(\partial_y w - \partial_z v) + a(\partial_y w + \partial_z v)}{2}, \\ m_{yx} &= \frac{(\partial_x v - \partial_y u) + a(\partial_x v + \partial_y u)}{2}, \\ m_{zx} &= \frac{(\partial_x w - \partial_z u) + a(\partial_x w + \partial_z u)}{2}, \\ m_{zy} &= \frac{(\partial_y w - \partial_z v) + a(\partial_y w + \partial_z v)}{2}. \end{aligned}$$

Annexe D : Discrétisation des sous-modèles Poiseuille 1D et 2D

Discrétisation du modèle 1D

Dans cette section nous détaillons le traitement réservé au sous modèle (6.50a - 6.50b) introduit au chapitre 6 :

$$\begin{cases} \alpha \dot{\gamma} + \sigma_p^{xy} = \Pi y, \\ \partial_t \sigma_p = M_a[\dot{\gamma}](\sigma_p) - \sigma_p - \kappa \sigma_p^2 + 2 \dot{\gamma} (\delta_2^1 + \delta_1^2) + \beta \partial_{yy}^2 \sigma_p. \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{(d.1a)} \\ \text{(d.1b)} \end{matrix}$$

Dans ce modèle, la vitesse est unidirectionnelle, et l'on écrit les équations directement sur le taux de cisaillement $\dot{\gamma} = \partial_y u$. Le temps est subdivisé en pas de temps t^n définis par :

$$t^n = n \delta t,$$

où $n \in \mathbb{N}$ et δt représente le pas de temps. On note :

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}^n(y) &= \dot{\gamma}(t^n, y), \\ \sigma_p^n(y) &= \sigma_p(t^n, y). \end{aligned}$$

Le système (d.1a - d.1b) est discrétisé en temps de la manière suivante :

$$\dot{\gamma}^n = \frac{\Pi y - \sigma_p^{xy, n}}{\alpha}, \quad \text{(d.2)}$$

$$\sigma_p^{n+1/2} = \sigma_p^n + \delta t \left(M_a[\dot{\gamma}^n] \left(\frac{\sigma_p^{n+1/2} + \sigma_p^n}{2} \right) - \frac{\sigma_p^{n+1/2} + \sigma_p^n}{2} - \kappa (\sigma_p^n)^2 + 2 \dot{\gamma}^n (\delta_2^1 + \delta_1^2) \right), \quad \text{(d.3)}$$

$$\sigma_p^{n+1} = \sigma_p^{n+1/2} + \delta t \beta \partial_{yy}^2 \sigma_p^{n+1}. \quad \text{(d.4)}$$

La composante d'espace est discrétisée par : $y_j = j \delta_y$ où $j \in \mathbb{N}$. On note alors :

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}_j(t) &= \dot{\gamma}(t, y_j), \\ \sigma_{p,j}(t) &= \sigma_p(t, y_j). \end{aligned}$$

La discrétisation des équations (d.2 - d.3) consiste alors simplement à réécrire le système en (t^n, y_j) . On a alors :

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}_j^n &= \frac{\Pi y_j - \sigma_{p,j}^{xy, n}}{2\alpha}, \\ \sigma_{p,j}^{n+1/2} &= \sigma_{p,j}^n + \delta t \left(M_a[\dot{\gamma}_j^n] \left(\frac{\sigma_{p,j}^{n+1/2} + \sigma_{p,j}^n}{2} \right) - \frac{\sigma_{p,j}^{n+1/2} + \sigma_{p,j}^n}{2} - \kappa (\sigma_{p,j}^n)^2 + 2 \dot{\gamma}_j^n (\delta_2^1 + \delta_1^2) \right). \end{aligned}$$

La dernière étape (d.4) contient un Laplacien, qui sera discrétisé de la manière suivante :

$$\Delta \sigma_p(y_j) \sim \frac{\sigma_{p,j+1} - 2\sigma_{p,j} + \sigma_{p,j-1}}{\delta y^2}.$$

L'équation (d.4) se discrétise alors de la manière suivante :

$$\sigma_{p,j}^{n+1} - \delta t \beta \frac{\sigma_{p,j+1}^{n+1} - 2\sigma_{p,j}^{n+1} + \sigma_{p,j-1}^{n+1}}{\delta y^2} = \sigma_{p,j}^{n+1/2}. \quad \text{(d.5)}$$

Le système (d.5) écrit pour tout $j = 1..N_y$, avec les bonnes conditions aux limites constitue un système linéaire fermé, inversible. Son inversion, via une méthode de gradient conjugué donne σ_p^{n+1} . Il est à noter que σ_p représente ici le tenseur des contraintes 2D, les composantes σ_p^{xz} , σ_p^{yz} , σ_p^{zz} étant alors découplées du reste du système.

Discrétisation du modèle 2D

Dans cette section on détaille la discrétisation en espace du sous-modèle 2D (6.43a - 6.43b) décrit au chapitre 6. Ce modèle s'écrit :

$$\begin{cases} \alpha \Delta_{yz} u + \partial_y \sigma_p^{xy} + \partial_z \sigma_p^{xz} = \Pi, \\ \partial_t \sigma_p = M_a[u](\sigma_p) - \sigma_p - \kappa \sigma_p^2 + 2 (\partial_y u (\delta_2^1 + \delta_1^2) + 2 \partial_z u (\delta_3^1 + \delta_1^3)) + \beta \Delta_{yz} \sigma_p. \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{(d.6a)} \\ \text{(d.6b)} \end{matrix}$$

On introduit alors la discrétisation en temps suivante :

$$t^n = n \delta t,$$

où $n \in \mathbb{N}$ et δt représente le pas de temps. On note :

$$\begin{aligned} u^n(y, z) &= u(t^n, y, z), \\ \sigma_p^n(y, z) &= \sigma_p(t^n, y, z). \end{aligned}$$

Les équations (d.6a - d.6b) sont alors discrétisées en temps de la manière suivante :

$$\alpha \Delta_{yz} u^n = \Pi - \partial_y \sigma_p^{xy, n} - \partial_z \sigma_p^{xz, n}, \quad \text{(d.7)}$$

$$\begin{aligned} \sigma_p^{n+1/2} = \sigma_p^n + \delta t \left(M_a[u^n] \left(\frac{\sigma_p^{n+1/2} + \sigma_p^n}{2} \right) - \frac{\sigma_p^{n+1/2} + \sigma_p^n}{2} - \kappa (\sigma_p^n)^2 \right. \\ \left. + 2 (\partial_y u^n (\delta_2^1 + \delta_1^2) + 2 \partial_z u^n (\delta_3^1 + \delta_1^3)) + \beta \Delta_{yz} \sigma_p^n \right), \end{aligned} \quad \text{(d.8)}$$

$$\sigma_p^{n+1} = \sigma_p^{n+1/2} + \delta t \beta \Delta_{yz} \sigma_p^{n+1/2}. \quad \text{(d.9)}$$

L'espace est alors discrétisé de la manière suivante :

$$\begin{aligned} y_j &= j \delta y, \\ z_k &= k \delta z, \end{aligned}$$

avec $(j, k) \in \mathbb{N}^2$. Les variables du système (d.6a - d.6b) sont placées de la manière suivante :

$$\begin{aligned} u_{jk}(t) &= u(t, y_j, z_k), \\ \sigma_{p,jk}(t) &= \sigma_p(t, y_j, z_k). \end{aligned}$$

Discrétisation de l'équation de Stokes réduite

L'équation (d.7), dans ce cas là est une équation de Poisson 2D. Le Laplacien est discrétisé par :

$$\Delta u \sim \frac{u_{j+1,k} - 2u_{jk} + u_{j-1,k}}{\delta y^2} + \frac{u_{j,k+1} - 2u_{jk} + u_{j,k-1}}{\delta z^2}.$$

Le terme source $\nabla \cdot \sigma_p$ est approché de la manière suivante :

$$\nabla \cdot \sigma_p(y_j, z_k) = \partial_y \sigma_p^{xy}(y_j, z_k) + \partial_z \sigma_p^{xz}(y_j, z_k) \sim \frac{\sigma_{p,j+1,k}^{xy} - \sigma_{p,j-1,k}^{xy}}{2 \delta y} + \frac{\sigma_{p,j,k+1}^{xz} - \sigma_{p,j,k-1}^{xz}}{2 \delta z}.$$

La discrétisation de l'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit alors :

$$\frac{u_{j+1,k}^n - 2u_{jk}^n + u_{j-1,k}^n}{\delta y^2} + \frac{u_{j,k+1}^n - 2u_{jk}^n + u_{j,k-1}^n}{\delta z^2} = \frac{1}{2\alpha} \left(\Pi - \frac{\sigma_{p,j+1,k}^{xy,n} - \sigma_{p,j-1,k}^{xy,n}}{2\delta y} - \frac{\sigma_{p,j,k+1}^{xz,n} - \sigma_{p,j,k-1}^{xz,n}}{2\delta z} \right). \quad (\text{d.10})$$

Sachant que σ_p^n est connu, le système composé de (d.10) écrit pour tous les points (j, k) du domaine, constitue encore une fois un système linéaire inversible, si on lui adjoint les bonnes conditions aux limites. Ce schéma permet donc de calculer u^n .

Discrétisation de la loi de comportement

La première étape de discrétisation de la loi de comportement se discrétise en espace simplement en écrivant l'équation (d.8) en (y_j, z_k) :

$$\sigma_{p,jk}^{n+1/2} = \sigma_{p,jk}^n + \delta t \left(M_{a,jk}^n(\sigma_{p,jk}^n) - \sigma_{p,jk}^n - \kappa(\sigma_{p,jk}^n)^2 + 2D[V_{jk}^n] \right).$$

Cette discrétisation nécessite d'approcher $\nabla u(y_j, z_k)$ afin de déterminer les termes $M_{a,jk}$ et $D[V_{jk}^n]$. Dans notre cas, on a :

$$\nabla V = \partial_y u \delta_2^1 + \partial_z u \delta_3^1.$$

Les termes $\partial_y u$ et $\partial_z u$ sont alors approchés en (y_j, z_k) par :

$$\begin{aligned} \partial_y u(y_j, z_k) &\sim \frac{u_{j+1,k} - u_{j-1,k}}{\delta y}, \\ \partial_z u(y_j, z_k) &\sim \frac{u_{j,k+1} - u_{j,k-1}}{\delta z}. \end{aligned}$$

La deuxième étape de résolution (d.9) nécessite la discrétisation d'une équation de la chaleur 2D à coefficients constants sur les composantes de σ_p . De la même manière que précédemment, cette équation est discrétisée par :

$$\sigma_{p,jk}^{n+1} - \delta t \beta \left(\frac{\sigma_{p,j+1,k}^{n+1} - 2\sigma_{p,jk}^{n+1} + \sigma_{p,j-1,k}^{n+1}}{\delta y^2} + \frac{\sigma_{p,j,k+1}^{n+1} - 2\sigma_{p,jk}^{n+1} + \sigma_{p,j,k-1}^{n+1}}{\delta z^2} \right) = \sigma_{p,jk}^{n+1/2}. \quad (\text{d.11})$$

En résolvant le système composé de l'équation (d.11) écrite en tout point (j, k) du domaine, on obtient σ_p^{n+1} .

Bibliographie

- [1] J.M. Adams, S.M. Fielding, and P.D. Olmsted. The interplay between boundary conditions and flow geometries in shear banding : Hysteresis, band configurations and surface transitions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2008.
- [2] J.M. Adams and P.D. Olmsted. A non-monotonic constitutive model is not necessary to obtain sheazr banding phenomena in entangled polymer solutions. *Physical Review Letters*, 2009.
- [3] P. Angot. A unified fictitious domain for general embedded boundary conditions. *Comptes Rendus en Mathématiques de l'Académie des Sciences*, 2005.
- [4] J. Baranger, C. Guillopé, and J-C. Saut. Mathematical analysis of differential models for viscoelastic fluids. *Rheology for Polymer Melt Processing*, Elsevier, 1996.
- [5] G. Bayada and M. Chambat. The transition between the stokes equation and the reynolds equation : a mathematical proof. *Applied Mathematics and Optimization*, 1986.
- [6] G. Bayada, L. Chupin, and B. Grec. Some theoretical results concerning diphasic fluids in thin films. *à paraître*, 2009.
- [7] G. Bayada, L. Chupin, and S. Martin. Viscoelastic fluids in a thin domain. *Quarterly of Applied Mathematics*, 2007.
- [8] F. Boyer, L. Chupin, and P.Fabrie. Numerical study of viscoelastic mixtures through a cahn-hillard flow model. *European Journal of Mechanics B*, 2004.
- [9] F. Boyer and P Fabrie. *Eléments d'analyse pour l'étude de quelques modèles d'écoulements de fluides visqueux incompressibles*. Springer, 2006.
- [10] H Brenner. Fluid mechanics revisited. *Physica A*, 2006.
- [11] C.H. Bruneau, T. Colin, P.Guillot, A. Colin, S. Quiniou, and M. Joanicot. Un rhéomètre sur puce. *Rapport interne MAB-LOF*, 2004.
- [12] C.H. Bruneau and E. Creusé. Towards a transparent boundary condition for compressible navier-stokes equations. *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, 2001.
- [13] M.E. Cates. Reptation of living polymers : dynamics of entangled polymers in the presence of reversible chain-scission reactions. *Macromolecules*, 1987.
- [14] M.E. Cates and S.M. Fielding. Rheology of giant micelles. *Advances in Physics*, 2006.
- [15] A. J. Chorin. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *Journal of Computational Physics*, 1967.

- [16] L. Chupin. Contribution à l'étude des mélanges de fluides visco-élastiques. *Phd Thesis*, 2003.
- [17] M. Cromer, L.P. Cook, and G.H. McKinley. Extensional flow of wormlike micellar solutions. *Chemical Engineering Science*, 2009.
- [18] E.L. Cussler. *Diffusion - Mass Transfer in Fluid Systems*. Cambridge University Press, second edition edition, 1997.
- [19] J. Dambrine, B. Geraud, and J.-B. Salmon. Interdiffusion of liquids of different viscosities in a microchannel. *New Journal of Physics*, 2009.
- [20] C.-Y. David, P.D. Olmsted, and R.C. Ball. Effects of non-local stress on the determination of shear banding flow. *Physical Review Letters*, 2000.
- [21] J.K.G. Dhont. A constitutive relation describing the shear-banding transition. *Physical Review Letters*, 1999.
- [22] A. Einstein. The motion of elements suspended in static liquids as claimed in the molecular kinetic theory of heat. *Annalen der Physik*, 1905.
- [23] A.W. El-Kareh and L.G. Leal. Existence of solutions for all Deborah numbers a non-newtonian model modified to include diffusion. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1989.
- [24] P. Español, X.F. Yuan, and R.C. Ball. Shear banding flow in the johnson-segalman fluid. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1996.
- [25] A. Fick. Über diffusion. *Poggendorff's Annal. Physik Chem.*, 1855.
- [26] H. Y. Gan, Y. C. Lam, N. T. Nguyen, K. C. Tam, and C. Yang. Efficient mixing of viscoelastic fluids in a microchannel at low reynolds number. *Physical Review E*, 2006.
- [27] F. Gibou, R. Fedkiw, L.-T. Cheng, and M. Kang. A second-order accurate symmetric discretization of the poisson equation on irregular domains. *Journal of Computational Physics*, 2002.
- [28] H. Giesekus. A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1982.
- [29] G. Gompper and M. Schick. *Soft Matter (3 volumes)*. Wiley, 2006.
- [30] M. Herrchen and H.S. Öttinger. A detailed comparison of various fene dumbbell models. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1997.
- [31] M.W. Johnson and D. Segalman. A model for viscoelastic fluid behavior which allows non-affine deformation. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1976.
- [32] Daniel D. Joseph. *Fluid Dynamics of Viscoelastic Liquids*. Springer-Verlag, 1990.
- [33] Daniel D. Joseph, A. Huang, and H. Hu. Non-solenoidal velocity effects and korteweg stresses in simple mixtures of incompressible liquids. *Physica D*, 1996.
- [34] B. Jourdain, T. Lelièvre, and C. Le Bris. Existence of solution for a micro-macro model of polymeric fluid : the fene model. *Journal of Functional Analysis*, 2004.
- [35] B. Jourdain, T. Lelièvre, and C. Le Bris. On a variance reduction technique for micro-macro simulations of polymeric fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2004.

- [36] O. Kuksenok and A.C. Balazs. Simulating the dynamic behavior of immiscible binary fluids in three-dimensional chemically patterned microchannels. *Physical Review E*, 2003.
- [37] O. Kuksenok and A.C. Balazs. Structures formation in binary fluids driven through patterned microchannels : effect of hydrodynamics and arrangement of surface patterns. *Physica D*, 2004.
- [38] D.R. Lide. *Hanbook of chemistry and physics*. C.R.C. Press, 2004.
- [39] X.-D. Liu, S. Osher, and T. Chan. Weighted essentially non-oscillatory schemes. *Journal of Computational Physics*, 1994.
- [40] E.A. Mansur, Y.E. Mingxing, W. Yungdong, and D. Youyuan. A state-of-the-art review of mixing in microfluidic mixers. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2008.
- [41] C. Masselon. Effets non locaux dans un écoulement microfluidique de microfluidique de micelles géantes. *Phd Thesis*, 2008.
- [42] J.G. Oldroyd. On the formulation of rheological equations of state. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 1950.
- [43] P.D. Olmsted, O. Radulescu, and C.-Y. David Lu. The johnson-segalman model with a diffusion term in a cylindrical couette flow. *Journal of Rheology*, 2000.
- [44] Stanley Osher and Ronald Fedkiw. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer-Verlag, 2004.
- [45] P. Oswald. *Rhéophysique*. Belin, 2005.
- [46] J. Ou, R. Moss, and J.P. Rosthstein. Enhanced mixing in laminar flows using ultrahydrophobic surfaces. *Physical Review E*, 2007.
- [47] R.G. Owens and T.N. Phillips. *Computational Rheology*. Imperial College Press, 2002.
- [48] C. Peskin. Numerical analysis of blood flow in the heart. *Journal of Computational Physics*, 1977.
- [49] N. Phan-Thien and R.I. Tanner. A new constitutive equation derived from network theory. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1977.
- [50] O. Radulescu, P.D. Olmsted, and C.-Y. David. Shear banding in reaction-diffusion models. *Rheologica Acta*, 1999.
- [51] I. Ramière, P. Angot, and M. Belliard. A fictious domain approach with spread interface for elliptic problems with general boundary conditions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2007.
- [52] P. Saramito. Efficient simulation of nonlinear viscoelastic fluid flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1995.
- [53] D. Schafroth, N. Goyal, and E. Meiburg. Miscible displacements in hele-shaw cells : Nonmonotonic viscosity profiles. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 2007.
- [54] J. Soulages, P.C. Oliveira, M.A. Sousa, and G.H. McKinley. Investigating the stability of viscoelastic stagnation flows in t-shaped microchannels. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2009.

- [55] A. D. Stroock, S. K. W. Dertinger, A. Adjari, I. Mezić, H. A. Stone, and G. M. Whitesides. Chaotic mixers in microchannels. *Science*, 2002.
- [56] A. D. Stroock, S. K. W. Dertinger, G. M. Whitesides, and A. Adjari. Patterning flows using grooved surfaces. *Analytical Chemistry*, 2002.
- [57] Roger Temam. *Navier-Stokes Equations*. North Holland, 1985.
- [58] H. Uzawa. Iterative methods for concave programming. *Studies in Linear and Non-Linear Programming*, 1958.
- [59] D Vlassopoulos and S.G. Hatzikiriakos. A generalized giesekus constitutive model with retardation time and its association to the spurt effect. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1995.
- [60] L.M. Walker and P. Moldenaers. Macroscopic response of wormlike micelles to elongational flow. *Langmuir*, 1996.
- [61] H.R. Warner. Kinetic theory and rheology of dilute suspensions of finitely extendible dumbbells. *Ind. Eng. Chem. Fundamen.*, 1972.
- [62] G. M. Whitesides. The origins and the future of microfluidics. *Nature*, 2006.

Table des figures

0.1	Différents exemples de micro-fluidique. a) veines dans une feuille d'érable, b) puce micro-fluidique fabriquée au L.O.F. Images tirées de http://fr.wikipedia.org/ , et http://www.lof.cnrs.fr/ .	11
0.2	Représentation schématique d'une expérience de "co-flow" mettant en scène deux réactifs A et B suivant la réaction totale : $A + B \rightarrow C$.	14
0.3	Vue schématique des différentes échelles impliquées dans la simulation d'une expérience de co-flow.	17
0.4	Micelles géantes : en haut, molécule bipolaire servant de base aux différentes formes d'agrégats possibles : sphéroïdes, longs cylindres et phase lamellaire.	18
0.5	Écoulements de micelles géantes cylindriques. a) : l'état enchevêtré ; b) : l'état aligné ; c) : un écoulement cisailé de type Couette ; d) un écoulement dans un canal. Les bandes foncées dans c) et d) correspondent à un fluide dans l'état enchevêtré visco-élastique a). Les bandes claires représentent le fluide dans son état aligné plus fluide b).	19
0.6	Rhéogrammes pour le modèle de Johnson-Segalman sans diffusion. En pointillés : le rhéogramme caractéristique pour un cisaillement homogène. En bleu : rhéogramme issu d'un écoulement dans un canal en partant d'une condition initiale donnée dans la branche fluide (en haut à droite sur la courbe). En vert : condition initiale donnée dans la branche fluide (en bas à gauche sur la courbe).	21
0.7	Diagrammes Elongation/Contrainte (première contrainte d'élongation) pour les modèles de Johnson-Segalman (en rouge) et de Giesekus (en violet). La partie de la courbe en pointillés représente les points stationnaires instables pour le modèle de Johnson-Segalman.	22
1.1	Illustration du phénomène d'auto-diffusion. En haut suivi de la trajectoire erratique d'une particule, en bas mélange de deux espèces discriminées.	30
1.2	Représentation schématique d'un domaine Ω où sont mises en présence deux espèces chimiques. Dans le cas du mélange parfait, chaque élément de volume est constitué du mélange d'un volume V_A de fluide A et V_B de fluide B.	30
2.1	Vue schématique d'un domaine fin	35
2.2	Domaine et notations pour les modèles (2.56a-2.56d) et (2.64a-2.64c).	45
3.1	Placement des différentes variables sur une grille décalée pour la discrétisation des équations (3.1a-3.1d).	53
3.2	Précision de la méthode numérique décrite à la section 3.2.1, de gauche à droite : $l = 10$, $l = 20$, $l = 100$.	57
3.3	Erreurs commises entre la solution numérique issue du schéma décrit à la section 3.2.1 et la solution exacte, en fonction de la résolution du maillage. À gauche : erreurs sur la solution, à droite : erreurs sur le gradient de la solution.	58

3.4	carte de la répartition de l'erreur entre la solution exacte et la solution approchée. A gauche : erreur sur la solution, à droite erreur sur le gradient. Résolution 256×256 , $l = 100$	58
3.5	Précision de la méthode numérique sur le gradient, de gauche à droite : $l = 10$, $l = 20$, $l = 100$	59
3.6	Précision de la méthode numérique pour le transport, de gauche à droite : $l = 10^{-8}$ (vu comme discontinu pour toutes les résolutions), $l = 0.01$, $l = 0.05$	63
4.1	Représentation schématique d'une expérience de "co-flow" mettant en scène deux réactifs A et B suivant la réaction totale : $A + B \rightarrow C$	65
4.2	Représentation schématique du domaine, notations.	66
4.3	Vérification numérique de convergence en maillage pour des simulations de déplacements de l'interface dus à des gradients de viscosité. A gauche, évolution temporelle de la position de l'interface au bout du domaine de calcul ($x = L$) pour différentes résolutions de maillage. A droite, carte de concentration ϕ en espace à l'état stationnaire.	69
4.4	Comparaison entre les résultats numériques (en rouge) et théoriques (en noir) du positionnement de l'interface à l'équilibre m^* en fonction du contraste de viscosité prescrit.	70
4.5	Courbe du profil de viscosités $\eta(\phi)$, données tirées de [38].	70
4.6	Distribution spatiale de ϕ dans le cas où $Q_A = 50 \mu L/h$ et $Q_B = 300 \mu L/h$ (placement de l'interface au milieu du canal), pour différentes valeurs de $\mathcal{D}$. De gauche à droite, puis de haut en bas : $\mathcal{D} = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9] 10^{-10} m^2/s$. On s'aperçoit qu'à mesure que le coefficient d'inter-diffusion grandit, le cône de diffusion grandit également. Par ailleurs le déplacement de l'interface à l'échelle longue mentionnée dans ce chapitre est de plus en plus important à mesure que l'on augmente $\mathcal{D}$	72
4.7	Distribution spatiale de ϕ issue des expériences menées au L.O.F. par Jean-Baptiste Salmon (figure extraite de [19]).	73
4.8	Comparaison entre l'évolution de σ^2 dans le canal issue des simulations numériques (trait plein, en noir) et des expériences (points). Abscisse re-normalisée pour rendre la comparaison indépendante de la vitesse moyenne $\bar{u}(x)$	73
4.9	Distribution spatiale de ϕ pour les simulations numériques dans les conditions identiques à celles des expériences menées au L.O.F. Comme dans les expériences, on effectue différents placements de l'interface à l'entrée $m^* = [1.48, 3.64, 5, 6] 10^{-4} m$ en modulant les débits d'entrée (4.21 - 4.22), et en nous servant de la formule (4.17) pour trouver la position d'équilibre m^* correspondante.	74
4.10	Comparaison entre l'évolution du milieu de l'interface m dans le canal issue des simulations numériques (traits pleins) et des expériences (points), pour les différents débits d'entrée (4.21 - 4.22). Abscisse re-normalisée pour rendre la comparaison indépendante de la vitesse moyenne $\bar{u}(x)$	75
5.1	Schéma de principe d'un mélangeur micro-fluidique passif. En rouge : trajectoire d'une particule lâchée à l'entrée du canal.	77
5.2	Erreur sur les vitesses entre les résultats donné par les simulations numériques effectuées sur le modèle de Reynolds (2.56a - 2.56d) et sur le modèle de Stokes (2.1a - 2.1c) dont il dérive, en fonction de la hauteur du canal re-normalisée sur la largeur.	78

5.3	Simulations numériques d'écoulements dans des canaux possédant les reliefs décrits dans l'équation (5.1). a) : $h_{\max} = 200 \mu m$, b) : $h_{\max} = 150 \mu m$, c) : $h_{\max} = 100 \mu m$, d) : $h_{\max} = 50 \mu m$. En bleu : lignes de courant calculées à partir de simulations numériques sur le modèle de Stokes incompressible (2.1a- 2.1c); en rouge : lignes de courant issues de simulations sur le modèle de Reynolds 2.5D (2.56a- 2.56d).	79
5.4	Schéma de principe d'un micro-canal comportant des motifs de glissement.	80
5.5	Cartes de la concentration $\phi(x, y)$ dans le canal pour un écoulement présentant des surfaces de glissements comme décrit sur la Fig. 5.4. Longueurs de glissement relatives : $\delta h = [0, 0.04, 0.08, 0.12]$	80
6.1	Vue schématique des différentes échelles apparaissant dans la formation de micelles géantes, de l'échelle moléculaire à l'échelle du nano-mètre, où s'expriment les comportements collectifs qui vont conditionner l'écoulement à l'échelle macroscopique.	88
6.2	A gauche : localisation du cisaillement dans une expérience d'écoulement de micelles géantes dans un micro-canal (figure extraite de la thèse de Chloé Masselon [41]). Les zones les plus sombres mettent en évidence des bandes de cisaillement plus élevé à proximité des parois du canal. A droite : vue schématique des états alignés et enchevêtrés ainsi que des profils de vitesses typiques de ces écoulements.	88
6.3	Modèle rhéologique de Jeffrey.	89
6.4	Schéma de principe d'un écoulement cisailé unidirectionnel.	91
6.5	Courbes d'écoulement obtenues grâce à l'équation (6.6). A gauche on fait varier le rapport de viscosités $\alpha = \frac{\eta}{G\tau}$, à droite on fait varier le paramètre sans dimensions a	91
6.6	Schéma de principe d'un écoulement d'élongation. Au milieu de l'écoulement se trouve un point d'arrêt où l'on a une déformation d'élongation pure	92
6.7	Courbes représentant la première contrainte d'élongation σ^{xx} en fonction du taux d'élongation fixé. On fait varier le paramètre a pour obtenir les différentes courbes.	93
6.8	A gauche : contrainte élongationnelle σ^{xx} en fonction du taux d'élongation pour le modèle (6.10) obtenu grâce à (6.11). A droite : Viscosité élongationnelle définie par (6.13) en fonction du taux d'élongation.	94
6.9	Représentation schématique du type de domaine considéré pour le modèle complet (6.20a- 6.20c)	96
7.1	Placement des différentes variables sur une grille décalée pour la discrétisation des équations (7.1a- 7.1a).	103
7.2	Différentes mailles considérées pour discrétiser les trois composantes de (7.1a).	104
7.3	Précision de la méthode numérique pour le problème de Stokes incompressible.	107
7.4	Différents domaines en jeu dans les méthodes de pénalisation décrites dans ce chapitre.	110
7.5	Précision de la méthode numérique pour la discrétisation de l'équation de Laplace avec pénalisation sur un cercle.	111
7.6	Précision de la méthode numérique pour le problème (7.23) avec pénalisation Neumann sur un cercle.	112
7.7	Profil de vitesses $u(y, z)$ obtenu grâce à une simulation numérique sur le modèle Poiseuille 2D sans diffusion ($\beta = 0$). Résolution du maillage : $N_y \times N_z = 50 \times 50$	117
7.8	Cartes des deux composantes $\sigma_p^{xy}(y, z)$ (à gauche) et $\sigma_p^{xz}(y, z)$ (à droite) de l'extra-contrainte obtenues à l'état stationnaire sur des simulations numériques sur le modèle Poiseuille 2D sans diffusion ($\beta = 0$). De haut en bas : $N_y \times N_z = [50 \times 50 \ 100 \times 100 \ 150 \times 150]$	118

7.9	Cartes des deux composantes $\sigma_p^{xy}(y, z)$ (à gauche) et $\sigma_p^{xz}(y, z)$ (à droite) de l'extra-contrainte obtenues à l'état stationnaire sur des simulations numériques sur le modèle Poiseuille 2D avec diffusion ($\beta^* = \min(\delta x, \delta y)^2$). De haut en bas : $N_y \times N_z = [50 \times 50 \ 100 \times 100 \ 150 \times 150]$	119
7.10	Cartes des deux composantes $\sigma_p^{xy}(y, z)$ (à gauche) et $\sigma_p^{xz}(y, z)$ (à droite) de l'extra-contrainte obtenues à l'état stationnaire sur des simulations numériques sur le modèle Poiseuille 2D avec diffusion ($\beta^* = \min(\delta x, \delta y)^{3/2}$). De haut en bas : $N_y \times N_z = [50 \times 50 \ 100 \times 100 \ 150 \times 150]$	120
8.1	Illustration de la notion de courbe d'écoulement. On montre différentes natures de fluides : a) fluide Newtonien (eau, air, huile ...), b) fluide rhéo-fluidifiant (peintures, micelles géantes, sang ...), c) fluide rhéo-épaississant (suspensions concentrées), d) fluide à seuil (mousses, émulsions, neige ...)	122
8.2	Vue schématique du dispositif expérimental utilisé au L.O.F. pour étudier les effets non-locaux dans les écoulement de micelles géantes.	122
8.3	A gauche : courbe d'écoulement de référence du modèle de Johnson-Segalman pour les paramètres (8.4-8.7). A droite : courbe d'écoulement expérimentale obtenue par Chloé Masselon sur une solution de CPCI-Sal 6% (figure extraite de [41]).	123
8.4	Evolution en temps du système (8.2a- 8.2b) avec les paramètres (8.4- 8.7) et les valeurs suivantes du gradient de pression $\delta P = [330, \ ,660, \ 990] \text{ mB}/(6 \text{ cm})$. A gauche : évolution en temps du profil de taux de cisaillement $ \dot{\gamma} (y)$. A droite : évolution en temps des points $(\dot{\gamma}_i, \sigma_i^{xy})$, avec $i = 1 \dots N_y$, vers l'état stationnaire, où ils forment une courbe d'écoulement.	125
8.5	Simulations numériques sur le modèle (8.2a- 8.2b) avec les paramètres (8.4- 8.7) et $\delta P = 1320 \text{ mB}/(6 \text{ cm})$. Evolution en temps des points de la courbe d'écoulement $(\dot{\gamma}_i, \sigma_i^{xy})$. En bleu, $\circ$: condition initiale "haute" ; en rouge, $+$: condition initiale "basse" ; en tirets : plateaux de contrainte obtenus à l'état stationnaire.	127
8.6	Simulations numériques sur le modèle (8.2a-8.2b) avec une diffusion de $\mathcal{D} = 8e^{-11} \text{ m}^2.s^{-1}$, pour les paramètres (8.4-8.7) et $\delta P = 1320 \text{ mB}/(6 \text{ cm})$. Evolution en temps des points de la courbe d'écoulement $(\dot{\gamma}_i, \sigma_i^{xy})$. En bleu, $\circ$: condition initiale "haute" ; en rouge, $+$: condition initiale "basse".	128
8.7	Résultats à l'état stationnaire des simulations numériques effectuées sur le modèle (8.2a-8.2b) avec les paramètres (8.4-8.7), et (de haut en bas) $\mathcal{D} = [8, \ 16, \ 80] \text{ m}^2.s^{-1}$, pour une condition aux limites de Neumann sur σ_p . A gauche : courbes d'écoulement. A droite : profil transverse de cisaillement $ \dot{\gamma} $	130
8.8	Résultats à l'état stationnaire des simulations numériques effectuées sur le modèle (8.2a-8.2b) avec les paramètres (8.4-8.7), et (de haut en bas) $\mathcal{D} = [8, \ 16, \ 80] \text{ m}^2.s^{-1}$, pour une condition aux limites de Dirichlet sur σ_p . A gauche courbes d'écoulement. A droite : profil transverse de cisaillement $ \dot{\gamma} $	131
9.1	Schéma de principe du type de dispositif micro-fluidique étudié dans ce chapitre . . .	133
9.2	Géométrie du domaine et notations	134
9.3	A gauche : relation entre débit et gradient de pressions obtenu par simulation numérique sur le modèle Poiseuille 2D (9.12a-9.12b) (échelle logarithmique). A droite : quelques profils de vitesses correspondants (coupe en $z = h/2$).	137
9.4	Rapports de débits Q_{s1}/Q_{s2} en fonction du débit d'entrée Q_e obtenus après plusieurs calculs effectués sur l'algorithme présenté à la section 9.2.1. En pointillés, résultat attendu sur un fluide Newtonien.	138

9.5	Simulation d'un écoulement de micelles géantes dans une jonction en T. Conditions aux limites sur les vitesses obtenues via l'algorithme proposé à la section 9.2.1 pour $Q_e = 56.4 \mu L.s^{-1}$. A gauche : coupe en $z = h/2$ du champ de vitesses et lignes de courant partant de l'entrée. A droite : coupe en $z = h/2$ du champ de pressions.	139
9.6	Lignes de courant calculées sur les vitesses obtenues par simulations numériques sur le modèle (9.1a-9.1c) pour deux valeurs de κ . En haut : $\kappa = 0.3$. En bas $\kappa = 0$	140
9.7	Simulations numériques d'écoulement de micelles géantes dans une jonction en T asymétrique. Conditions aux limites de Neumann sur la vitesse en sortie. Débits d'entrée (de haut en bas) $Q_e = [25.28, 49.66, 72.04, 293.54] \mu L.s^{-1}$. A gauche : coupe en $z = h/2$ du champ de vitesses et lignes de courant partant de l'entrée. A droite : coupe en $z = h/2$ du champ de pressions.	142
9.8	Rapports de débits Q_{s1}/Q_{s2} en fonction du débit d'entrée Q_e . En rouge résultat obtenu par simulation numérique directe sur le modèle (9.1a-9.1c). En bleu, résultats obtenus précédemment sur le modèle simplifié. En pointillés, résultat attendu sur un fluide Newtonien.	143
9.9	Simulations numériques d'écoulement de micelles géantes dans une jonction en T faiblement asymétriques. Valeurs du paramètre réglant la différence des longueurs des blanches de sorties L_1 et L_2 (de haut en bas) : $\omega = [0.025, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3]$. A gauche : coupe en $z = h/2$ du champ de vitesses et lignes de courant partant de l'entrée. A droite : coupe en $z = h/2$ du champ de pressions.	144
9.10	Rapports de débits Q_{s1}/Q_{s2} en fonction de l'asymétrie ω de la jonction, obtenue par simulation directe sur le modèle (9.1a-9.1c). En pointillés, résultat attendu sur un fluide Newtonien.	145
9.11	Champs de vitesse et lignes de courant en différents instants obtenus par simulation numérique sur le modèle (9.1a-9.1c) pour une jonction parfaitement symétrique (coupe en $z = h/2$).	146
9.12	Répartition spatiale du taux de cisaillement $ \dot{\gamma} $ en différents instants obtenus par simulation numérique sur le modèle (9.1a-9.1c) pour une jonction parfaitement symétrique (coupe en $z = h/2$).	147