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

Soutenance de thèse

Julien Dambrine,

Thierry Colin, Mathieu Colin.

Mc2, INRIA Bordeaux Sud-Ouest









Quelques exemples d'écoulements de fluides complexes :

- Fluides à plusieurs phases, interfaces (ex : huile-eau)
- Problèmes de mélange (ex : suivi d'un mélange réactif)
- Interaction fluide-structure (ex : particules, parois élastiques)
- Fluides non-Newtoniens, Rhéologie (ex : micelles, polymères)

 \rightarrow Besoin important en modélisation

 \rightarrow Besoin important en calcul scientifique

Quelques exemples d'écoulements de fluides complexes :

- Fluides à plusieurs phases, interfaces (ex : huile-eau)
- Problèmes de mélange (ex : suivi d'un mélange réactif)
- Interaction fluide-structure (ex : particules, parois élastiques)
- Fluides non-Newtoniens, Rhéologie (ex : micelles, polymères)

 \rightarrow Besoin important en modélisation

 \rightarrow Besoin important en calcul scientifique

Quelques exemples d'écoulements de fluides complexes :

- Fluides à plusieurs phases, interfaces (ex : huile-eau)
- Problèmes de mélange (ex : suivi d'un mélange réactif)
- Interaction fluide-structure (ex : particules, parois élastiques)
- Fluides non-Newtoniens, Rhéologie (ex : micelles, polymères)

 \rightarrow Besoin important en modélisation

 \rightarrow Besoin important en calcul scientifique

Introduction Micro-fluidique

Une définition simple :

"écoulements dans des canaux dont la taille varie de $1 \, \mu m$ à $1 \, mm$ "





- a) Micro-canaux naturels : nervures sur une feuille (image : Wikipedia)
- b) Micro-canaux artificiels : puces en verre ou en PDMS (image : L.O.F. Rhodia/CNRS/U-Bx1)

Introduction Micro-fluidique

Une définition simple :

"écoulements dans des canaux dont la taille varie de $1 \, \mu m$ à $1 \, mm$ "





- a) Micro-canaux naturels : nervures sur une feuille (image : Wikipedia)
- b) Micro-canaux artificiels : puces en verre ou en PDMS (image : L.O.F. Rhodia/CNRS/U-Bx1)

Introduction

Pourquoi utiliser la micro-fluidique pour étudier des écoulements complexes ?

La micro-fluidique est (entre autres) :

- Un outil d'analyse chimique (expériences de co-flow) :



Image : Jean-Baptiste Salmon (LOF)

- Un outil d'analyse rhéologique (rhéomètre sur puce) :



Image : Chloé Masselon (LOF)

- Un "modèle" pour étudier des écoulements en milieu poreux (réseaux micro-fluidiques)

Caractéristiques des écoulements micro-fluidiques :

- ▶ Prédominance des effets visqueux sur les effets inertiels
- Régime incompressible

 \rightarrow Utilisation du modèle de Stokes :

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

- ► Ecoulements conduits par la pression
- Ecoulements confinés

 \rightarrow Grande importance des conditions aux limites

L'expression de la contrainte σ change suivant le cas étudié :

Problèmes de mélange (partie I) :Ecoulements de micelles géantes (partie II) : $\sigma = 2 \eta(\phi) D[V],$ $\sigma = 2 \eta D[V] + \sigma_p,$ $\partial_t \phi + V \cdot \nabla \phi - D\Delta \phi = 0.$ + loi de comportement sur σ_p .

Caractéristiques des écoulements micro-fluidiques :

- ▶ Prédominance des effets visqueux sur les effets inertiels
- Régime incompressible

 \rightarrow Utilisation du modèle de Stokes :

- ► Ecoulements conduits par la pression
- Ecoulements confinés

\rightarrow Grande importance des conditions aux limites

L'expression de la contrainte σ change suivant le cas étudié :

Problèmes de mélange (partie I) :Ecoulements de micelles géantes (partie II) : $\sigma = 2 \eta(\phi) D[V],$ $\sigma = 2 \eta D[V] + \sigma_p,$ $\partial_t \phi + V \cdot \nabla \phi - D\Delta \phi = 0.$ + loi de comportement sur σ_p .

Caractéristiques des écoulements micro-fluidiques :

- ▶ Prédominance des effets visqueux sur les effets inertiels
- Régime incompressible

 \rightarrow Utilisation du modèle de Stokes :

- ► Ecoulements conduits par la pression
- Ecoulements confinés

 \rightarrow Grande importance des conditions aux limites

L'expression de la contrainte σ change suivant le cas étudié :

Problèmes de mélange (partie l) :Ecoulements de micelles géantes (partie ll) : $\sigma = 2 \eta(\phi) D[V],$ $\sigma = 2 \eta D[V] + \sigma_P,$ $\partial_t \phi + V \cdot \nabla \phi - D\Delta \phi = 0.$ + loi de comportement sur $\sigma_P.$

Partie I :

Problèmes de mélange en domaines fins

Un modèle de mélange



Variable pour suivre le mélange : fraction volumique ϕ

$$\partial_t \phi + \nabla \cdot (F_c + F_d) = 0$$

- Flux convectif : $F_c = V \phi$
- Flux diffusif, loi de Fick : $F_d = \mathcal{D} \,
 abla \phi$

Hydrodynamique : modèle de Stokes :

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

On considère des fluides Newtoniens :

$$\boldsymbol{\sigma} = 2 \, \eta(\phi) \, D[\boldsymbol{V}]$$

Un modèle de mélange



Variable pour suivre le mélange : fraction volumique ϕ

$$\partial_t \phi + \nabla \cdot (F_c + F_d) = 0$$

- Flux convectif : $F_c = V \phi$
- Flux diffusif, loi de Fick : $F_d = \mathcal{D} \, \nabla \phi$

Hydrodynamique : modèle de Stokes :

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

On considère des fluides Newtoniens :

$$\boldsymbol{\sigma} = 2 \, \eta(\phi) \, D[\boldsymbol{V}]$$

Un modèle de mélange



Variable pour suivre le mélange : fraction volumique ϕ

$$\partial_t \phi + \nabla \cdot (F_c + F_d) = 0$$

- Flux convectif : $F_c = V \phi$
- Flux diffusif, loi de Fick : $F_d = \mathcal{D} \,
 abla \phi$

Hydrodynamique : modèle de Stokes :

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

On considère des fluides Newtoniens :

$$oldsymbol{\sigma}=2\,\eta(\phi)\,D[oldsymbol{V}]$$

Conditions aux limites

Conditions aux limites pour un écoulement micro-fluidique :



▶ Sur $\Gamma_{h/b}$:

- Pour *V*, deux possibilités :

Une condition d'adhérence : V = 0Une condition de glissement : $V_n = 0$, $\partial_{\vec{n}} V_{\tau} = \pm \frac{1}{L_{L/L}} V_{\tau}$

-
$$\partial_{\vec{n}}\phi = 0$$

Conditions aux limites

Conditions aux limites pour un écoulement micro-fluidique :



▶ Sur $\Gamma_{h/b}$:

- Pour V, deux possibilités :

Une condition d'adhérence : V = 0Une condition de glissement : $V_n = 0$, $\partial_{\vec{n}} V_{\tau} = \pm \frac{1}{L_{h/h}} V_{\tau}$

-
$$\partial_{\vec{n}}\phi = 0$$

Conditions aux limites

Conditions aux limites pour un écoulement micro-fluidique :



▶ Sur $\Gamma_{h/b}$:

- Pour V, deux possibilités :

Une condition d'adhérence : V = 0Une condition de glissement : $V_n = 0$, $\partial_{\vec{n}} V_{\tau} = \pm \frac{1}{L_{h/h}} V_{\tau}$

-
$$\partial_{\vec{n}}\phi = 0$$

Conditions aux limites

Conditions aux limites pour un écoulement micro-fluidique :



▶ Sur $\Gamma_{h/b}$:

- Pour V, deux possibilités :

Une condition d'adhérence : V = 0Une condition de glissement : $V_n = 0$, $\partial_{\vec{n}} V_{\tau} = \pm \frac{1}{L_{h/h}} V_{\tau}$

-
$$\partial_{\vec{n}}\phi = 0$$

Conditions aux limites

Conditions aux limites pour un écoulement micro-fluidique :



• Sur $\Gamma_{h/b}$:

- Pour V, deux possibilités : Une condition d'adhérence : V = 0Une condition de glissement : $V_n = 0$, $\partial_{\vec{n}} V_{\tau} = \pm \frac{1}{L_{h/b}} V_{\tau}$ - $\partial_{\vec{n}} \phi = 0$

Modèle de Reynolds

Hypothèses ($\varepsilon << 1$) : 1) Domaine fin : $\frac{h}{l} = o(\varepsilon)$, $\frac{h}{L} = o(\varepsilon)$ 2) Incompressibilité : $\frac{w_0}{u_0} = o(\varepsilon)$, $\frac{w_0}{v_0} = o(\varepsilon)$ 3) Ecoulement conduit par la pression : $\frac{\eta_0 u_0}{P_0 l} = o(\varepsilon^2)$

On obtient deux types de modèles :

Modèle de Reynolds

Hypothèses ($\varepsilon << 1$) : 1) Domaine fin : $\frac{h}{l} = o(\varepsilon)$, $\frac{h}{L} = o(\varepsilon)$ 2) Incompressibilité : $\frac{w_0}{u_0} = o(\varepsilon)$, $\frac{w_0}{v_0} = o(\varepsilon)$ 3) Ecoulement conduit par la pression : $\frac{\eta_0 u_0}{P_0 l} = o(\varepsilon^2)$

On obtient deux types de modèles :

Modèles 2D

$$\begin{cases}
\nabla_{xy} \cdot [K_{1}(x, y, \phi) \nabla_{xy} P] = 0 \\
\left(\frac{\overline{u}}{\overline{v}}\right)(x, y) = \overline{K_{2}}(x, y, \phi) \nabla_{xy} P \\
\partial_{t} \phi + \left(\frac{\overline{u}}{\overline{v}}\right) \cdot \nabla_{xy} \phi = \nabla_{xy} \cdot (\mathcal{D}(\phi) \nabla_{xy} \phi)
\end{cases}$$
Modèles 2.5D

$$\begin{cases}
\nabla_{xy} \cdot \left[K_{1}(x, y, \overline{\phi}) \nabla_{xy} P\right] = 0 \\
\left(\frac{u}{v}\right)(x, y, z) = K_{2}(x, y, z, \phi) \nabla_{xy} P \\
w = -\nabla_{xy} \cdot \left[\nabla_{xy} P \int_{0}^{z} K_{2}(x, y, s, \phi) ds\right] \\
\partial_{t} \phi + \left(\frac{u}{v}\right) \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (\mathcal{D}(\phi) \nabla \phi)
\end{cases}$$

Conditions aux limites pour un écoulement micro-fluidique :



• Sur $\Gamma_{h/b}$:

- Pour **P**, pas de conditions sur $\Gamma_{h/b}$

 \rightarrow le glissement ou l'adhérence apparaissent dans les coefficients du modèle réduit - $\partial_{\vec{n}}\phi=0$

Avantages :

Pour l'hydrodynamique :

problème 3D sur $(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}) \rightarrow$ problème 2D sur \boldsymbol{P}

- ► On peut récupérer des vitesses 3D pour le modèle de Reynods
- Les conditions aux limites sur $\Gamma_{h/b}$ sont prises en compte dans K_1 et K_2
- ► Temps de calcul pour les simulations numériques : Canal à reliefs, $N_x \times N_y \times N_z = 400 \times 100 \times 100$, calcul des vitesses : Modèle de Stokes : 4h | Modèle de Reynolds 2.5D : 10min

Discrétisation en temps

Equations :

$$\begin{cases} \nabla_{xy} \cdot [K_1(x, y, \phi) \nabla_{xy} \mathbf{P}] = 0\\ (\mathbf{u}, \mathbf{v})(x, y, z) = K_2(x, y, z, \phi) \nabla_{xy} \mathbf{P}\\ \mathbf{w} = -\nabla_{xy} \cdot \left[\nabla_{xy} \mathbf{P} \int_0^z K_2(x, y, s, \phi) \, \mathrm{d}s \right]\\ \partial_t \phi + \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (\mathcal{D}(\phi) \nabla \phi) \end{cases}$$

On note $t^n = n \, \delta t$ et :

$$(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})^n(X)\sim (\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})(t^n,X), \ \boldsymbol{P}^n(X)\sim \boldsymbol{P}(t^n,X), \ \phi^n(X)\sim \phi(t^n,X)$$

Etapes de calcul (on connait ϕ^n) :

Etape 1 : On résout l'équation elliptique sur la pression

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

Etape 2 : On calcule les vitesses

$$(\boldsymbol{u}^{n}, \boldsymbol{v}^{n})(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) = K_{2}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}^{n}) \nabla_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}} \boldsymbol{P}^{n}$$
$$\boldsymbol{w}^{n} = -\nabla_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}} \cdot \left[\nabla_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}} \boldsymbol{P}^{n} \int_{0}^{\boldsymbol{z}} K_{2}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{s}, \boldsymbol{\phi}^{n}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{s} \right]$$

Etape 3 : On résout l'équation sur φ

$$oldsymbol{\phi}^{n+1} - \delta t \; \mathcal{D} \Delta oldsymbol{\phi}^{n+1} = oldsymbol{\phi}^n - \delta t \; oldsymbol{V}^n \cdot
abla oldsymbol{\phi}^n$$

Discrétisation en temps

Equations :

$$\begin{cases} \nabla_{xy} \cdot [K_1(x, y, \phi) \nabla_{xy} \mathbf{P}] = 0\\ (\mathbf{u}, \mathbf{v})(x, y, z) = K_2(x, y, z, \phi) \nabla_{xy} \mathbf{P}\\ \mathbf{w} = -\nabla_{xy} \cdot \left[\nabla_{xy} \mathbf{P} \int_0^z K_2(x, y, s, \phi) \, \mathrm{d}s \right]\\ \partial_t \phi + \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (\mathcal{D}(\phi) \nabla \phi) \end{cases}$$

On note $t^n = n \, \delta t$ et :

$$(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})^n(X)\sim (\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})(t^n,X)\,,\ \boldsymbol{P}^n(X)\sim \boldsymbol{P}(t^n,X)\,,\ \phi^n(X)\sim \phi(t^n,X)$$

Etapes de calcul (on connait ϕ^n) :

 $\blacktriangleright \ \ \, \textbf{Etape 1}: \mbox{On résout l'équation elliptique sur la pression}$

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

Etape 2 : On calcule les vitesses

$$(\boldsymbol{u}^{n}, \boldsymbol{v}^{n})(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) = K_{2}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{\phi}^{n}) \nabla_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}} \boldsymbol{P}^{n}$$
$$\boldsymbol{w}^{n} = -\nabla_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}} \cdot \left[\nabla_{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}} \boldsymbol{P}^{n} \int_{0}^{\boldsymbol{z}} K_{2}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{s}, \boldsymbol{\phi}^{n}) \, \mathrm{d}\boldsymbol{s} \right]$$

• Etape 3 : On résout l'équation sur ϕ

$$oldsymbol{\phi}^{n+1} - \delta t \; \mathcal{D} \Delta oldsymbol{\phi}^{n+1} = oldsymbol{\phi}^n - \delta t \; oldsymbol{V}^n \cdot
abla oldsymbol{\phi}^n$$

Discrétisation en temps

Equations :

$$\begin{cases} \nabla_{xy} \cdot [K_1(x, y, \phi) \nabla_{xy} \mathbf{P}] = 0\\ (\mathbf{u}, \mathbf{v})(x, y, z) = K_2(x, y, z, \phi) \nabla_{xy} \mathbf{P}\\ \mathbf{w} = -\nabla_{xy} \cdot \left[\nabla_{xy} \mathbf{P} \int_0^z K_2(x, y, s, \phi) \, \mathrm{d}s \right]\\ \partial_t \phi + \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (\mathcal{D}(\phi) \nabla \phi) \end{cases}$$

On note $t^n = n \, \delta t$ et :

$$(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})^n(X)\sim (\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})(t^n,X), \ \boldsymbol{P}^n(X)\sim \boldsymbol{P}(t^n,X), \ \phi^n(X)\sim \phi(t^n,X)$$

Etapes de calcul (on connait ϕ^n) :

Etape 1 : On résout l'équation elliptique sur la pression

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

Etape 2 : On calcule les vitesses

$$(\boldsymbol{u}^{n}, \boldsymbol{v}^{n})(x, y, z) = K_{2}(x, y, z, \phi^{n}) \nabla_{xy} \boldsymbol{P}^{n}$$
$$\boldsymbol{w}^{n} = -\nabla_{xy} \cdot \left[\nabla_{xy} \boldsymbol{P}^{n} \int_{0}^{z} K_{2}(x, y, s, \phi^{n}) \, \mathrm{d}s \right]$$

Etape 3 : On résout l'équation sur φ

$$\phi^{n+1} - \delta t \ \mathcal{D} \Delta \phi^{n+1} = \phi^n - \delta t \ oldsymbol{V}^n \cdot
abla \phi^n$$

Discrétisation en temps

Equations :

$$\begin{cases} \nabla_{xy} \cdot [K_1(x, y, \phi) \nabla_{xy} \mathbf{P}] = 0\\ (\mathbf{u}, \mathbf{v})(x, y, z) = K_2(x, y, z, \phi) \nabla_{xy} \mathbf{P}\\ \mathbf{w} = -\nabla_{xy} \cdot \left[\nabla_{xy} \mathbf{P} \int_0^z K_2(x, y, s, \phi) \, \mathrm{d}s \right]\\ \partial_t \phi + \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (\mathcal{D}(\phi) \nabla \phi) \end{cases}$$

On note $t^n = n \, \delta t$ et :

$$(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})^n(X)\sim (\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})(t^n,X), \ \boldsymbol{P}^n(X)\sim \boldsymbol{P}(t^n,X), \ \phi^n(X)\sim \phi(t^n,X)$$

Etapes de calcul (on connait ϕ^n) :

Etape 1 : On résout l'équation elliptique sur la pression

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

Etape 2 : On calcule les vitesses

$$(\boldsymbol{u}^{n}, \boldsymbol{v}^{n})(x, y, z) = K_{2}(x, y, z, \phi^{n}) \nabla_{xy} \boldsymbol{P}^{n}$$
$$\boldsymbol{w}^{n} = -\nabla_{xy} \cdot \left[\nabla_{xy} \boldsymbol{P}^{n} \int_{0}^{z} K_{2}(x, y, s, \phi^{n}) \, \mathrm{d}s \right]$$

▶ Etape 3 : On résout l'équation sur ϕ

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

12/56

Discrétisation en espace

On note : $x_i = i \, \delta x$, $y_j = j \, \delta y$, $z_k = k \, \delta z$. On place les variables de la manière suivante (grille MAC) :



Discrétisation :

- ▶ Etape 1 : Schéma de volumes finis à 5 points pour l'équation en pression
- **Etape 2** : Calcul de (u, v) par volumes finis, intégration numérique pour w
- Etape 3 : Equation en φ : Schéma de volumes finis à 5 (2D) ou 7 (2.5D) points pour la diffusion Schéma WENO5 pour le transport.

Le schéma est stable sous la condition C.F.L.

(

$$\delta t < \frac{1}{\frac{||\boldsymbol{u}||_{\infty}}{\delta x} + \frac{||\boldsymbol{v}||_{\infty}}{\delta y} + \frac{||\boldsymbol{w}||_{\infty}}{\delta z}}$$

Contexte : deux fluides miscibles injectés parallèlement dans un canal



Constatations :

- Déplacement transverse très rapide de l'interface à cause du gradient de viscosité
- Inter-diffusion des deux fluides sur des échelles de temps longues
- Déplacement transverse de la zone de mélange sur de grandes longueurs

Modèle : Reynolds 2D, canal plat, adhérence :

$$\begin{cases} \nabla_{xy} \cdot [K_1(x, y, \phi) \nabla_{xy} \mathbf{P}] = 0\\ \begin{pmatrix} \overline{\mathbf{u}} \\ \overline{\mathbf{v}} \end{pmatrix} (x, y) = \overline{K_2}(x, y, \phi) \nabla_{xy} \mathbf{P}\\ \partial_t \phi + \begin{pmatrix} \overline{\mathbf{u}} \\ \overline{\mathbf{v}} \end{pmatrix} \cdot \nabla_{xy} \phi = \nabla_{xy} \cdot (\mathcal{D}(\phi) \nabla_{xy} \phi) \end{cases}$$

J. Dambrine, B. Geraud, J.-B. Salmon, "Interdiffusion of liquids with different viscosities in a microchannel", NJP, 2009

Echelles courtes ($L \sim I$), déplacement lié au gradient de viscosité :

• Convergence en maillage du déplacement de l'interface m(x) :



Echelles courtes ($L \sim I$), déplacement lié au gradient de viscosité :

► Validation de la position de l'interface à l'équilibre m* en fonction du contraste de viscosité c dans les deux phases :



Valeurs "théoriques" données grâce à un argument d'égalité des débits dans chaque phase :

$$\frac{m^*}{l} - \frac{1}{2} = c$$

Echelles longues (L >> I), inter-diffusion, comparaisons avec les expériences.

- Choix des paramètres :
- Viscosité de mélange $\eta(\phi)
 ightarrow$ littérature (mélange glycérol/eau)
- Coefficient de diffusion \rightarrow comparaison entre simulations et expériences



Meilleur accord avec l'expérience pour $\mathcal{D} = 5.10^{-10} m^2 . s^{-1}$.

Echelles longues (L >> I), inter-diffusion, comparaisons avec les expériences.

Déplacement de la zone de mélange



On retrouve des tendances similaires entre l'expérience et les simulations.

Applications et résultats : motifs de glissement

Contexte : micro-canaux glissant alternativement pour le fluide A et pour le fluide B

Longueurs de glissement :



$$L_{g} \phi$$
$$L_{g} (1 - \phi)$$

Modèle : Reynolds 2D, adapté aux conditions de glissement

Simulations numériques :



Applications et résultats : limitations du modèle

Contexte : micro-canaux à reliefs



Modèles :

- Reynolds 2.5D, adapté à des reliefs
- Stokes 3D, conditions d'adhérence

Simulations numériques : comparaisons entre les modèles de Stokes de Reynolds



 \rightarrow convergence entre les deux modèles lorsque $h \rightarrow 0$, mais perte du confinement T. Colin, M. Colin, J. Dambrine, "Validity of the Reynolds model for microfluidic flows", soumis

Dans cette étude, nous avons :

- Développé des modèles de Reynolds (2D et 2.5D) adaptés à des écoulements micro-fluidiques (reliefs, motifs de glissement, mélanges)
- Validé le modèle pour des expériences de co-flow (canal plat)
- ► Fourni un outil de mesure du coefficient d'inter-diffusion entre deux fluides

Perspectives :

- ► Etude de mélanges réactifs dans les expériences de co-flow
- ► Comparaison avec l'expérience pour les canaux à motifs de glissement
Partie II :

Ecoulements de micelles géantes

Micelles géantes Agrégats

Agrégats de molécules bi-polaires (savon) dans un solvant (eau) :



Structures capables de se rompre et de se recombiner en permanence

Micelles géantes Micelles cylindriques

Sous cisaillement, deux états possibles :

- a) Etat enchevêtré (visco-élastique)
- b) Etat aligné (fluide)



→ Formation de bandes de cisaillement dans l'écoulement.

Micelles géantes Micelles cylindriques

Sous cisaillement, deux états possibles :

- a) Etat enchevêtré (visco-élastique)
- b) Etat aligné (fluide)



 \rightarrow Formation de bandes de cisaillement dans l'écoulement.



Loi de comportement de Johnson-Segalman

Modèle mécanique : cellule de Jeffrey



• σ_p suit une loi de comportement visco-élastique linéaire :

$$\hat{\sigma}_{p} + rac{1}{ au} \, \sigma_{p} = 2 \, G \, D[m{V}]$$

• Dérivée objective $\stackrel{\diamond}{\sigma}_{p}$: dérivée de Gordon-Schowalter

$$\overset{\diamond}{\sigma}_{p} = \partial_{t}\sigma_{p} + \boldsymbol{V}\cdot\nabla\sigma_{p} - (\Omega[\boldsymbol{V}]\sigma_{p} - \sigma_{p}\Omega[\boldsymbol{V}]) - a(D[\boldsymbol{V}]\sigma_{p} + \sigma_{p}D[\boldsymbol{V}])$$

où :

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

Loi de comportement de Johnson-Segalman

Modèle mécanique : cellule de Jeffrey



• σ_p suit une loi de comportement visco-élastique linéaire :

$$\overset{\diamond}{oldsymbol{\sigma}_{oldsymbol{p}}}+rac{1}{ au}\,oldsymbol{\sigma}_{oldsymbol{p}}=2\,G\,D[oldsymbol{V}]$$

• Dérivée objective $\stackrel{\diamond}{\sigma}_{p}$: dérivée de Gordon-Schowalter

$$\overset{\diamond}{\sigma}_{p} = \partial_{t}\sigma_{p} + \boldsymbol{V}\cdot\nabla\sigma_{p} - (\Omega[\boldsymbol{V}]\sigma_{p} - \sigma_{p}\Omega[\boldsymbol{V}]) - a(D[\boldsymbol{V}]\sigma_{p} + \sigma_{p}D[\boldsymbol{V}])$$

où :

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

Loi de comportement de Johnson-Segalman

Modèle mécanique : cellule de Jeffrey



• σ_p suit une loi de comportement visco-élastique linéaire :

$$\overset{\diamond}{oldsymbol{\sigma}_{oldsymbol{
ho}}}+rac{1}{ au}\,oldsymbol{\sigma}_{oldsymbol{
ho}}=2\,oldsymbol{G}\,D[oldsymbol{V}]$$

• Dérivée objective $\stackrel{\diamond}{\sigma}_{p}$: dérivée de Gordon-Schowalter

$$\overset{\diamond}{\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}} = \partial_t \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}} + \boldsymbol{V} \cdot \nabla \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}} - (\Omega[\boldsymbol{V}]\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}} - \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}\Omega[\boldsymbol{V}]) - \mathsf{a}(D[\boldsymbol{V}]\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}} + \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}D[\boldsymbol{V}])$$

où :

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

Comportement sous cisaillement

Etude préliminaire "0D" d'un cas particulier classique :

- On suppose σ homogène en espace
- On fixe $\nabla \boldsymbol{V}$:

$$abla oldsymbol{
u} = egin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \ 0 & 0 & 0 \ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



- On cherche les états stationnaires sur $\sigma(\dot{\gamma})$

- On vérifie la stabilité de ces états stationnaires

Comportement sous cisaillement

- On suppose σ homogène en espace
- On fixe $\nabla \boldsymbol{V}$:

$$abla oldsymbol{V} = egin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \ 0 & 0 & 0 \ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



- On cherche les états stationnaires sur $\sigma(\dot{\gamma})$
- On vérifie la stabilité de ces états stationnaires

Comportement sous cisaillement

- On suppose σ homogène en espace
- On fixe $\nabla \boldsymbol{V}$:

$$abla oldsymbol{V} = egin{pmatrix} 0 & \dot{\gamma} & 0 \ 0 & 0 & 0 \ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



- On cherche les états stationnaires sur $\sigma(\dot{\gamma})$
- On vérifie la stabilité de ces états stationnaires

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

$$\sigma^{xx}_p(\dot{\gamma}) = 4 \tau^2 G \dot{\gamma} (a + 1) \frac{\dot{\gamma}}{1 + 4 \tau^2 (1 - a^2) \dot{\gamma}^2}$$

$$\sigma^{yy}_p(\dot{\gamma}) = 4 \tau^2 G \dot{\gamma} (a - 1) \frac{\dot{\gamma}}{1 + 4 \tau^2 (1 - a^2) \dot{\gamma}^2}$$

$$\sigma^{xz}_p(\dot{\gamma}) = \sigma^{yz}_p(\dot{\gamma}) = \sigma^{zz}_p(\dot{\gamma}) = 0$$



Comportement en élongation, modification du modèle

- On suppose σ homogène en espace
- On fixe $\nabla \boldsymbol{V}$:

$$abla oldsymbol{
u} = egin{pmatrix} 2\,\dotarepsilon & 0 & 0 \ 0 & -\dotarepsilon & 0 \ 0 & 0 & -\dotarepsilon \end{pmatrix}$$



- On cherche les états stationnaires sur $\sigma(\dot{arepsilon})$
- On vérifie la stabilité de ces états stationnaires

Comportement en élongation, modification du modèle

- On suppose σ homogène en espace
- On fixe $\nabla \boldsymbol{V}$:

$$abla oldsymbol{
u} = egin{pmatrix} 2\,\dotarepsilon & 0 & 0 \ 0 & -\dotarepsilon & 0 \ 0 & 0 & -\dotarepsilon \end{pmatrix}$$



- On cherche les états stationnaires sur $\sigma(\dot{arepsilon})$
- On vérifie la stabilité de ces états stationnaires

Comportement en élongation, modification du modèle

Etude préliminaire "0D" d'un cas particulier classique :

- On suppose σ homogène en espace
- On fixe $\nabla \boldsymbol{V}$:

$$abla oldsymbol{
u} = egin{pmatrix} 2\,\dotarepsilon & 0 & 0 \ 0 & -\dotarepsilon & 0 \ 0 & 0 & -\dotarepsilon \end{pmatrix}$$



- On cherche les états stationnaires sur $\sigma(\dot{\varepsilon})$

- On vérifie la stabilité de ces états stationnaires

$$\sigma^{xx}(\dot{\varepsilon}) = 2\eta \dot{\varepsilon} - G\tau \frac{2\dot{\varepsilon}}{4a\dot{\varepsilon} - \frac{1}{\tau}}$$
$$\sigma^{yy}(\dot{\varepsilon}) = \sigma^{zz}(\dot{\varepsilon}) = -\eta \dot{\varepsilon} - G\tau \frac{\dot{\varepsilon}}{2a\dot{\varepsilon} + \frac{1}{\tau}}$$
$$\sigma^{xz}_{p}(\dot{\gamma}) = \sigma^{yz}_{p}(\dot{\gamma}) = \sigma^{xy}_{p}(\dot{\gamma}) = 0$$



Stable pour $\dot{\varepsilon} < \frac{1}{4 \, a \, \tau}$

Comportement en élongation, modification du modèle

Il faut modifier le modèle car :

- Le comportement instable n'est pas physiquement raisonnable
- On veut traiter des cas où $\dot{\varepsilon}$ peut être grand (par ex : des jonctions)

Proposition :

Loi de comportement non linéaire : Modèle de Giesekus :

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\boldsymbol{p}} + \frac{1}{\tau} \, \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}} + \frac{\kappa}{G \, \tau} \, (\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}})^2 = 2 \, G \, D[\boldsymbol{V}]$$

Comportement en élongation, modification du modèle

Il faut modifier le modèle car :

- Le comportement instable n'est pas physiquement raisonnable
- On veut traiter des cas où $\dot{arepsilon}$ peut être grand (par ex : des jonctions)

Proposition :

Loi de comportement non linéaire : Modèle de Giesekus :

$$\hat{\sigma}_{\boldsymbol{p}} + \frac{1}{\tau} \, \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}} + \frac{\kappa}{G \, \tau} \, (\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}})^2 = 2 \, G \, D[\boldsymbol{V}]$$

Comportement en élongation, modification du modèle

Il faut modifier le modèle car :

- Le comportement instable n'est pas physiquement raisonnable
- On veut traiter des cas où $\dot{\varepsilon}$ peut être grand (par ex : des jonctions)

Proposition :

Loi de comportement non linéaire : Modèle de Giesekus :

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{\boldsymbol{\rho}} + \frac{1}{\tau} \, \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{\rho}} + \frac{\kappa}{G \, \tau} \, (\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{\rho}})^2 = 2 \, G \, D[\boldsymbol{V}]$$

Comportement en élongation :



Remarque : il existe un grand nombre de lois rhéologiques non-linéaires

Les effet non-locaux ne sont pas négligeables pour les écoulements formant des bandes de cisaillement.

Proposition (El Kareh, Leal 1989) :

Ajout d'un terme de diffusion dans la loi de comportement :

$$\overset{\diamond}{\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}} + rac{1}{\tau} \, \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}} + rac{\kappa}{G \, \tau} \, (\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}})^2 = 2 \, G \, D[\boldsymbol{V}] + \mathcal{D} \Delta \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}$$

Question : quelles conditions aux limites?

Modèle complet, modèles réduits

Modèle complet, conditions aux limites :

- Dans Ω :

$$\begin{cases} \eta \Delta \boldsymbol{V} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{\rho}} = \nabla \boldsymbol{P}, \\ \nabla \cdot \boldsymbol{V} = 0, \\ \overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma}}_{\boldsymbol{\rho}} + \frac{1}{\tau} \, \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{\rho}} + \frac{\kappa}{G \, \tau} \, (\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{\rho}})^2 = 2 \, G \, D[\boldsymbol{V}] + \mathcal{D} \Delta \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{\rho}}. \end{cases}$$

- Sur Γ_e :

$$\begin{cases} \mathbf{V}|_{\Gamma_{e}} = V^{e}, \\ \sigma_{p}|_{\Gamma_{e}} = \sigma_{p}^{e}. \end{cases}$$

- Sur Γ_s^i :

$$\begin{cases} \partial_{\vec{n}} V|_{\Gamma_s} = 0 \,, \\ \partial_{\vec{n}} \sigma_p|_{\Gamma_s} = 0 \,. \end{cases}$$

- Sur Γ_m :

$$\begin{cases} \boldsymbol{V}|_{\boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{m}}} = \boldsymbol{0}, \\ \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}|_{\boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{m}}} = \sigma_{\boldsymbol{p}}^{loc}(\dot{\boldsymbol{\gamma}}), \quad \partial_{\boldsymbol{\vec{n}}}\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}|_{\boldsymbol{\Gamma}_{\boldsymbol{m}}} = \boldsymbol{0} \end{cases}$$

Problème : détermination des conditions V^e , σ_p^e .



Modèle complet, modèles réduits

Modèle complet, conditions aux limites :

- Dans Ω :

$$\begin{cases} \eta \,\Delta \boldsymbol{V} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}} = \nabla \boldsymbol{P} \,, \\ \nabla \cdot \boldsymbol{V} = 0 \,, \\ \overset{\diamond}{\boldsymbol{\sigma}}_{\boldsymbol{p}} + \frac{1}{\tau} \,\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}} + \frac{\kappa}{G \,\tau} \, (\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}})^2 = 2 \, G \, D[\boldsymbol{V}] + \mathcal{D} \Delta \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}} \,. \end{cases}$$

- Sur Γ_e :

$$\begin{cases} \boldsymbol{V}|_{\Gamma_{\mathbf{e}}} = V^{\mathbf{e}}\,,\\ \boldsymbol{\sigma_{p}}|_{\Gamma_{\mathbf{e}}} = \sigma_{p}^{\mathbf{e}}\,. \end{cases}$$

- Sur Γⁱ_s :

$$\begin{cases} \partial_{\vec{n}} \boldsymbol{V}|_{\Gamma_{\boldsymbol{s}}} = 0, \\ \partial_{\vec{n}} \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}|_{\Gamma_{\boldsymbol{s}}} = 0. \end{cases}$$

- Sur Γ_m :

$$\begin{cases} \boldsymbol{V}|_{\Gamma_{\boldsymbol{m}}} = 0, \\ \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{\rho}}|_{\Gamma_{\boldsymbol{m}}} = \sigma_{\boldsymbol{\rho}}^{loc}(\dot{\boldsymbol{\gamma}}), \quad \partial_{\vec{n}}\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{\rho}}|_{\Gamma_{\boldsymbol{m}}} = 0 \end{cases}$$

Problème : détermination des conditions V^e , σ_p^e



Modèle complet, modèles réduits

Modèle complet, conditions aux limites :

- Dans Ω :

$$\begin{cases} \eta \Delta \boldsymbol{V} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{p} = \nabla \boldsymbol{P} ,\\ \nabla \cdot \boldsymbol{V} = 0 ,\\ \overset{\diamond}{\boldsymbol{\sigma}}_{\boldsymbol{p}} + \frac{1}{\tau} \, \boldsymbol{\sigma}_{p} + \frac{\kappa}{G \, \tau} \, (\boldsymbol{\sigma}_{p})^{2} = 2 \, G \, D[\boldsymbol{V}] + \mathcal{D} \Delta \boldsymbol{\sigma}_{p} \, . \end{cases}$$

- Sur Γ_e :

$$\begin{cases} \pmb{V}|_{\Gamma_{\pmb{e}}} = V^{\pmb{e}}\,,\\ \pmb{\sigma_p}|_{\Gamma_{\pmb{e}}} = \sigma_p^{\pmb{e}}\,. \end{cases}$$

- Sur Γⁱ_s :

$$\begin{cases} \partial_{\vec{n}} \boldsymbol{V}|_{\Gamma_{\boldsymbol{s}}} = 0, \\ \partial_{\vec{n}} \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}|_{\Gamma_{\boldsymbol{s}}} = 0. \end{cases}$$

- Sur Γ_m :

$$\begin{cases} \boldsymbol{V}|_{\Gamma_{\boldsymbol{m}}} = \boldsymbol{0}, \\ \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}|_{\Gamma_{\boldsymbol{m}}} = \sigma_{\boldsymbol{p}}^{loc}(\dot{\boldsymbol{\gamma}}), \quad \partial_{\boldsymbol{n}}\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}|_{\Gamma_{\boldsymbol{m}}} = \boldsymbol{0} \end{cases}$$

Problème : détermination des conditions V^e , σ^e_p .



Modèle complet, modèles réduits

Modèle complet, conditions aux limites :

- Dans Ω :

$$\begin{cases} \eta \Delta \boldsymbol{V} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{p} = \nabla \boldsymbol{P} ,\\ \nabla \cdot \boldsymbol{V} = 0 ,\\ \overset{\diamond}{\boldsymbol{\sigma}}_{\boldsymbol{p}} + \frac{1}{\tau} \, \boldsymbol{\sigma}_{p} + \frac{\kappa}{G \, \tau} \, (\boldsymbol{\sigma}_{p})^{2} = 2 \, G \, D[\boldsymbol{V}] + \mathcal{D} \Delta \boldsymbol{\sigma}_{p} \, . \end{cases}$$

- Sur Γ_e :

$$\begin{cases} \boldsymbol{V}|_{\Gamma_{\boldsymbol{e}}} = V^{\boldsymbol{e}}\,,\\ \boldsymbol{\sigma_{p}}|_{\Gamma_{\boldsymbol{e}}} = \sigma_{p}^{\boldsymbol{e}}\,. \end{cases}$$

- Sur Γ_sⁱ :

$$\begin{cases} \partial_{\vec{n}} \boldsymbol{V}|_{\Gamma_{\boldsymbol{s}}} = 0\,,\\ \partial_{\vec{n}} \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}|_{\Gamma_{\boldsymbol{s}}} = 0\,. \end{cases}$$

- Sur Γ_m : $\begin{cases} \mathbf{V}|_{\Gamma_m} = 0, \\ \mathbf{\sigma}_p|_{\Gamma_m} = \sigma_p^{loc}(\dot{\gamma}), \quad \partial_{\vec{n}}\mathbf{\sigma}_p|_{\Gamma_m} = 0 \end{cases}$

Problème : détermination des conditions V^e , $\sigma^e_{\rm p}$



Modèle complet, modèles réduits

Modèle complet, conditions aux limites :

- Dans Ω :

$$\begin{cases} \eta \,\Delta \boldsymbol{V} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma_p} = \nabla \boldsymbol{P} \,, \\ \nabla \cdot \boldsymbol{V} = 0 \,, \\ \overset{\circ}{\boldsymbol{\sigma_p}} + \frac{1}{\tau} \,\boldsymbol{\sigma_p} + \frac{\kappa}{G \,\tau} \,(\boldsymbol{\sigma_p})^2 = 2 \,G \,D[\boldsymbol{V}] + \mathcal{D} \Delta \boldsymbol{\sigma_p} \,. \end{cases}$$

- Sur Γ_e :

$$\begin{cases} \boldsymbol{V}|_{\Gamma_{\boldsymbol{e}}} = V^{\boldsymbol{e}} \,, \\ \boldsymbol{\sigma_p}|_{\Gamma_{\boldsymbol{e}}} = \sigma_p^{\boldsymbol{e}} \,. \end{cases}$$

- Sur Γ_sⁱ :

$$\begin{cases} \partial_{\vec{n}} \boldsymbol{V}|_{\Gamma_{\boldsymbol{s}}} = 0, \\ \partial_{\vec{n}} \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}|_{\Gamma_{\boldsymbol{s}}} = 0. \end{cases}$$

- Sur Γ_m : $\begin{cases} \mathbf{V}|_{\Gamma_m} = 0, \\ \sigma_{\mathbf{P}}|_{\Gamma_m} = \sigma_{\mathbf{P}}^{loc}(\dot{\gamma}), \quad \partial_{\vec{n}}\sigma_{\mathbf{P}}|_{\Gamma_m} = 0 \end{cases}$

Problème : détermination des conditions V^e , σ_p^e .



Modèle complet, modèles réduits

Problème : détermination des conditions d'injection et/ou de sortie $V^{e/s}$, $\sigma_p^{e/s}$. Proposition : utilisation d'un sous-modèle type "Poiseuille". Hypothèses :

- Ecoulement parallèle :

 $V = u \vec{e}_x$

- Ecoulement invariant en x :

 $\partial_{\mathbf{x}} \mathbf{u} = 0$ $\partial_{\mathbf{x}} \mathbf{P} = 0$

- Le gradient de pression devient une donnée

$$\nabla P = \delta P \vec{e}_x$$

$$\begin{cases} \eta \, \Delta_{yz} \boldsymbol{u} + \partial_y \sigma_p^{xy} + \partial_z \sigma_p^{xz} = \delta P \,, \\ \overset{\circ}{\sigma}_{\rho} + \frac{1}{\tau} \, \sigma_{\rho} + \frac{\kappa}{G \, \tau} \, (\sigma_{\rho})^2 = 2 \, G \, D[\boldsymbol{V}] + \mathcal{D} \Delta \sigma_{\rho} \,. \end{cases} \quad \text{dans}$$



Modèle complet, modèles réduits

Problème : détermination des conditions d'injection et/ou de sortie $V^{e/s}$, $\sigma_p^{e/s}$. Proposition : utilisation d'un sous-modèle type "Poiseuille".

Hypothèses :

- Ecoulement parallèle :

 $V = u \vec{e}_x$

- Ecoulement invariant en x :

 $\partial_x \boldsymbol{u} = 0$ $\partial_x \boldsymbol{P} = 0$

- Le gradient de pression devient une donnée

$$\nabla P = \delta P \vec{e}_x$$

$$\begin{cases} \eta \, \Delta_{yz} \boldsymbol{u} + \partial_y \sigma_p^{xy} + \partial_z \sigma_p^{xz} = \delta P \,, \\ \overset{\circ}{\sigma}_{\rho} + \frac{1}{\tau} \, \sigma_{\rho} + \frac{\kappa}{G \, \tau} \, (\sigma_{\rho})^2 = 2 \, G \, D[\boldsymbol{V}] + \mathcal{D} \Delta \sigma_{\rho} \,. \end{cases} \quad \text{dans}$$



Modèle complet, modèles réduits

Problème : détermination des conditions d'injection et/ou de sortie $V^{e/s}$, $\sigma_p^{e/s}$. Proposition : utilisation d'un sous-modèle type "Poiseuille".

Hypothèses :

- Ecoulement parallèle :

$$V = u \vec{e}_x$$

- Ecoulement invariant en x :
 - $\partial_x \boldsymbol{u} = 0$ $\partial_x \boldsymbol{P} = 0$



 $\nabla \boldsymbol{P} = \delta P \, \vec{\boldsymbol{e}}_{\boldsymbol{x}}$

$$\begin{cases} \eta \, \Delta_{yz} u + \partial_y \sigma_p^{xy} + \partial_z \sigma_p^{xz} = \delta P \,, \\ \mathring{\sigma}_p + \frac{1}{\tau} \, \sigma_p + \frac{\kappa}{G \, \tau} \, (\sigma_p)^2 = 2 \, G \, D[V] + \mathcal{D} \Delta \sigma_p \,. \end{cases} \quad d$$



Modèle complet, modèles réduits

Problème : détermination des conditions d'injection et/ou de sortie $V^{e/s}$, $\sigma_p^{e/s}$. Proposition : utilisation d'un sous-modèle type "Poiseuille".

Hypothèses :

- Ecoulement parallèle :

 $V = u \vec{e}_x$

- Ecoulement invariant en x :
 - $\partial_x \boldsymbol{u} = 0$ $\partial_x \boldsymbol{P} = 0$



$$\nabla P = \delta P \vec{e}_x$$

$$\begin{cases} \eta \, \Delta_{yz} \boldsymbol{u} + \partial_y \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{\rho}}^{xy} + \partial_z \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{\rho}}^{xz} = \delta \boldsymbol{P} \,, \\ \overset{\diamond}{\boldsymbol{\sigma}}_{\boldsymbol{\rho}} + \frac{1}{\tau} \, \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{\rho}} + \frac{\kappa}{G \, \tau} \, (\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{\rho}})^2 = 2 \, G \, D[\boldsymbol{V}] + \mathcal{D} \Delta \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{\rho}} \,. \end{cases} \quad \text{dans } \Gamma^{e/s} + \text{CL sur } \Gamma^m$$



Discrétisation en temps

Equations :

$$\begin{cases} \eta \Delta \boldsymbol{V} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{p} = \nabla \boldsymbol{P}, \\ \nabla \cdot \boldsymbol{V} = 0, \\ \partial_{t} \boldsymbol{\sigma}_{p} + \boldsymbol{V} \cdot \nabla \boldsymbol{\sigma}_{p} + M_{a}[\boldsymbol{V}] \boldsymbol{\sigma}_{p} + \frac{1}{\tau} \boldsymbol{\sigma}_{p} + \frac{\kappa}{G\tau} (\boldsymbol{\sigma}_{p})^{2} = 2 G D[\boldsymbol{V}] + \mathcal{D} \Delta \boldsymbol{\sigma}_{p}. \end{cases}$$

On note $t^n = n \, \delta t$ et :

$$\boldsymbol{V}^{n}(X) \sim \boldsymbol{V}(t^{n},X), \ \boldsymbol{P}^{n}(X) \sim \boldsymbol{P}(t^{n},X), \ \boldsymbol{\sigma}_{p}^{n}(X) \sim \boldsymbol{\sigma}_{p}(t^{n},X)$$

Etapes de calcul (on connait σ_p^n) :

 Etape 1 : On résout Stokes (méthode de Lagrangien augmenté pour l'incompressibilité)

$$\eta \Delta \boldsymbol{V}^{n,k+1} + \delta r \,\nabla (\nabla \cdot \boldsymbol{V}^{n,k+1}) = -\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}^{n} + \nabla \boldsymbol{P}^{n,k}$$
$$\boldsymbol{P}^{n,k+1} = \boldsymbol{P}^{n,k+1} - \delta r \,\nabla \cdot \boldsymbol{V}^{n,k+1}$$

Etape 2 : On résout la partie locale dans la loi de comportement

$$\frac{\sigma_p^{n+1/2} - \sigma_p^n}{\delta t} + \left(\frac{ld}{\tau} + M_a[\boldsymbol{V}^n]\right) \left(\frac{\sigma_p^{n+1} + \sigma_p^n}{2}\right) + \delta t \frac{\kappa}{G \tau} (\sigma_p^n)^2 = 2 G D[\boldsymbol{V}^n]$$

▶ Etape 3 : On résout la partie non-locale dans la loi de comportement

$$\frac{\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^{n+1/2}}{\delta t} + \boldsymbol{V}^n \cdot \nabla \sigma_p^{n+1/2} = \mathcal{D} \Delta \sigma_p^{n+1}$$

Discrétisation en temps

Equations :

$$\begin{cases} \eta \Delta \mathbf{V} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{p} = \nabla \mathbf{P}, \\ \nabla \cdot \mathbf{V} = 0, \\ \partial_{t} \boldsymbol{\sigma}_{p} + \mathbf{V} \cdot \nabla \boldsymbol{\sigma}_{p} + M_{a}[\mathbf{V}] \boldsymbol{\sigma}_{p} + \frac{1}{\tau} \boldsymbol{\sigma}_{p} + \frac{\kappa}{G \tau} (\boldsymbol{\sigma}_{p})^{2} = 2 G D[\mathbf{V}] + \mathcal{D} \Delta \boldsymbol{\sigma}_{p}. \end{cases}$$

On note $t^n = n \, \delta t$ et :

$$\boldsymbol{V}^{n}(X) \sim \boldsymbol{V}(t^{n},X), \ \boldsymbol{P}^{n}(X) \sim \boldsymbol{P}(t^{n},X), \ \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}^{n}(X) \sim \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}(t^{n},X)$$

Etapes de calcul (on connait σ_p^n) :

 Etape 1 : On résout Stokes (méthode de Lagrangien augmenté pour l'incompressibilité)

$$\eta \Delta \boldsymbol{V}^{n,k+1} + \delta r \nabla (\nabla \cdot \boldsymbol{V}^{n,k+1}) = -\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_p^n + \nabla \boldsymbol{P}^{n,k}$$
$$\boldsymbol{P}^{n,k+1} = \boldsymbol{P}^{n,k+1} - \delta r \nabla \cdot \boldsymbol{V}^{n,k+1}$$

Etape 2 : On résout la partie locale dans la loi de comportement

$$\frac{\sigma_p^{n+1/2} - \sigma_p^n}{\delta t} + \left(\frac{ld}{\tau} + M_a[\boldsymbol{V}^n]\right) \left(\frac{\sigma_p^{n+1} + \sigma_p^n}{2}\right) + \delta t \frac{\kappa}{G \tau} (\sigma_p^n)^2 = 2 G D[\boldsymbol{V}^n]$$

▶ Etape 3 : On résout la partie non-locale dans la loi de comportement

$$\frac{\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^{n+1/2}}{\delta t} + \boldsymbol{V}^n \cdot \nabla \sigma_p^{n+1/2} = \mathcal{D} \Delta \sigma_p^{n+1}$$

Discrétisation en temps

Equations :

$$\begin{cases} \eta \Delta \mathbf{V} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{p} = \nabla \mathbf{P}, \\ \nabla \cdot \mathbf{V} = 0, \\ \partial_{t} \boldsymbol{\sigma}_{p} + \mathbf{V} \cdot \nabla \boldsymbol{\sigma}_{p} + M_{a}[\mathbf{V}] \boldsymbol{\sigma}_{p} + \frac{1}{\tau} \boldsymbol{\sigma}_{p} + \frac{\kappa}{G \tau} (\boldsymbol{\sigma}_{p})^{2} = 2 G D[\mathbf{V}] + \mathcal{D} \Delta \boldsymbol{\sigma}_{p}. \end{cases}$$

On note $t^n = n \, \delta t$ et :

$$\boldsymbol{V}^{n}(X) \sim \boldsymbol{V}(t^{n},X), \ \boldsymbol{P}^{n}(X) \sim \boldsymbol{P}(t^{n},X), \ \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}^{n}(X) \sim \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}(t^{n},X)$$

Etapes de calcul (on connait σ_p^n) :

 Etape 1 : On résout Stokes (méthode de Lagrangien augmenté pour l'incompressibilité)

$$\eta \Delta \boldsymbol{V}^{n,k+1} + \delta r \,\nabla (\nabla \cdot \boldsymbol{V}^{n,k+1}) = -\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_p^n + \nabla \boldsymbol{P}^{n,k}$$
$$\boldsymbol{P}^{n,k+1} = \boldsymbol{P}^{n,k+1} - \delta r \,\nabla \cdot \boldsymbol{V}^{n,k+1}$$

• Etape 2 : On résout la partie locale dans la loi de comportement

$$\frac{\sigma_p^{n+1/2} - \sigma_p^n}{\delta t} + \left(\frac{ld}{\tau} + M_a[\boldsymbol{V}^n]\right) \left(\frac{\sigma_p^{n+1} + \sigma_p^n}{2}\right) + \delta t \frac{\kappa}{G \tau} (\sigma_p^n)^2 = 2 G D[\boldsymbol{V}^n]$$

▶ Etape 3 : On résout la partie non-locale dans la loi de comportement

$$\frac{\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^{n+1/2}}{\delta t} + V^n \cdot \nabla \sigma_p^{n+1/2} = \mathcal{D} \Delta \sigma_p^{n+1}$$

Discrétisation en temps

Equations :

$$\begin{cases} \eta \Delta \mathbf{V} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{p} = \nabla \mathbf{P}, \\ \nabla \cdot \mathbf{V} = 0, \\ \partial_{t} \boldsymbol{\sigma}_{p} + \mathbf{V} \cdot \nabla \boldsymbol{\sigma}_{p} + M_{a}[\mathbf{V}] \boldsymbol{\sigma}_{p} + \frac{1}{\tau} \boldsymbol{\sigma}_{p} + \frac{\kappa}{G \tau} (\boldsymbol{\sigma}_{p})^{2} = 2 G D[\mathbf{V}] + \mathcal{D} \Delta \boldsymbol{\sigma}_{p}. \end{cases}$$

On note $t^n = n \, \delta t$ et :

$$\boldsymbol{V}^{n}(X) \sim \boldsymbol{V}(t^{n},X), \ \boldsymbol{P}^{n}(X) \sim \boldsymbol{P}(t^{n},X), \ \boldsymbol{\sigma}_{p}^{n}(X) \sim \boldsymbol{\sigma}_{p}(t^{n},X)$$

Etapes de calcul (on connait σ_p^n) :

 Etape 1 : On résout Stokes (méthode de Lagrangien augmenté pour l'incompressibilité)

$$\eta \Delta \boldsymbol{V}^{n,k+1} + \delta r \,\nabla (\nabla \cdot \boldsymbol{V}^{n,k+1}) = -\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_p^n + \nabla \boldsymbol{P}^{n,k}$$
$$\boldsymbol{P}^{n,k+1} = \boldsymbol{P}^{n,k+1} - \delta r \,\nabla \cdot \boldsymbol{V}^{n,k+1}$$

• Etape 2 : On résout la partie locale dans la loi de comportement

$$\frac{\sigma_p^{n+1/2} - \sigma_p^n}{\delta t} + \left(\frac{ld}{\tau} + M_a[\boldsymbol{V}^n]\right) \left(\frac{\sigma_p^{n+1} + \sigma_p^n}{2}\right) + \delta t \frac{\kappa}{G \tau} (\sigma_p^n)^2 = 2 G D[\boldsymbol{V}^n]$$

▶ Etape 3 : On résout la partie non-locale dans la loi de comportement

$$\frac{\sigma_p^{n+1} - \sigma_p^{n+1/2}}{\delta t} + \boldsymbol{V}^n \cdot \nabla \sigma_p^{n+1/2} = \mathcal{D} \Delta \sigma_p^{n+1}$$

32/56

Discrétisation en espace

On note : $x_i = i \ \delta x$, $y_j = j \ \delta y$, $z_k = k \ \delta z$. On place les variables de la manière suivante (grille MAC) :



- Etape 1 : Schéma MAC pour Stokes, interpolations pour $abla \cdot \sigma_p$
- ► Etape 2 : Interpolations pour calculer D[V]
- ► Etape 3 : Schéma à 7 points pour la diffusion, schéma WENO5 pour le transport
- ► Traitement de la géométrie : Méthode de pénalisation

Méthodes numériques _{Questions} de stabilité

Quelques conditions nécessaires de stabilité

- Stabilité liée au transport (C.F.L.) :

$$\delta t < \frac{1}{\frac{||u||_{\infty}}{\delta x} + \frac{||v||_{\infty}}{\delta y} + \frac{||w||_{\infty}}{\delta z}}$$

- Stabilité liée à la relaxation du fluide :

$$\delta t < \frac{\tau}{2}$$

- Stabilité liée au couplage Stokes ↔ Loi de comportement

$$\delta t < \frac{\tau}{2} \left(\frac{\eta}{G \tau}\right)^2$$

Méthodes numériques _{Questions de stabilité}

Quelques conditions nécessaires de stabilité

- Stabilité liée au transport (C.F.L.) :

$$\delta t < \frac{1}{\frac{||u||_{\infty}}{\delta x} + \frac{||v||_{\infty}}{\delta y} + \frac{||w||_{\infty}}{\delta z}}$$

- Stabilité liée à la relaxation du fluide :

$$\delta t < \frac{\tau}{2}$$

- Stabilité liée au couplage Stokes ↔ Loi de comportement

$$\delta t < \frac{\tau}{2} \left(\frac{\eta}{G \tau}\right)^2$$

Quelques conditions nécessaires de stabilité

- Stabilité liée au transport (C.F.L.) :

$$\delta t < \frac{1}{\frac{||u||_{\infty}}{\delta x} + \frac{||v||_{\infty}}{\delta y} + \frac{||w||_{\infty}}{\delta z}}$$

- Stabilité liée à la relaxation du fluide :

$$\delta t < \frac{\tau}{2}$$

- Stabilité liée au couplage Stokes \leftrightarrow Loi de comportement

$$\delta t < \frac{\tau}{2} \left(\frac{\eta}{G \tau}\right)^2$$

Applications et résultats : écoulements dans des canaux droits

Contexte : expériences menées par Chloé Masselon



Constatations :

- Au delà d'un δP critique, il y a formation de bandes de cisaillement
- Dans certaines conditions, le diagramme cisaillement/contraintes n'est pas unique

Approche :

 $\mathsf{Canaux} \text{ fins} \to \mathsf{Modèle} "\mathsf{Poiseuille"} \ \mathsf{1D}:$

$$\begin{cases} \eta \, \partial_{yy}^2 \mathbf{u} + \partial_y \sigma_{\boldsymbol{\rho}}^{xy} = \delta P \,, \\ \mathring{\sigma}_{\boldsymbol{\rho}} + \frac{1}{\tau} \, \sigma_{\boldsymbol{\rho}} + \frac{\kappa}{G \, \tau} \, (\sigma_{\boldsymbol{\rho}})^2 = 2 \, G \, D[\boldsymbol{V}] + \mathcal{D} \Delta \sigma_{\boldsymbol{\rho}} \,. \end{cases}$$

Paramètres utilisés :

$$\eta = 2.5 \, \textit{Pa.s} \,, \ \ \textit{G} = 110 \, \textit{Pa} \,, \ \ \tau = 0.7 \, \textit{s} \,, \ \ \textit{a} = 0.9 \,.$$

Applications et résultats : écoulements dans des canaux droits

► Formation de bandes de cisaillement

Simulations numériques pour $\mathcal{D} = 0 \ m^2/s$:



 $\delta P = 990 \ mB/(6cm)$
► Dépendance à la condition initiale, rôle de la diffusion

Simulations numériques pour $\delta P = 990 \ mB/(6 \ cm)$, deux conditions initiales :



 $\mathcal{D} = 0 m^2/s$

► Dépendance à la condition initiale, rôle de la diffusion

Simulations numériques pour $\delta P = 990 \ mB/(6 \ cm)$, deux conditions initiales :



 $D = 8.10^{-11} \ m^2/s$

Effets non-locaux, perte de la notion de "courbe d'écoulement"
Simulations numériques pour plusieurs δP :



 $D = 8.10^{-11} m^2/s$

Effets non-locaux, perte de la notion de "courbe d'écoulement"
Simulations numériques pour plusieurs δP :



 $\mathcal{D} = 16.\,10^{-11}\,m^2/s$

Effets non-locaux, perte de la notion de "courbe d'écoulement"
Simulations numériques pour plusieurs δP :



 $D = 80.10^{-11} m^2/s$

Contexte : expériences menées par Chloé Masselon



Constatations :

- La répartition des débits de sortie n'est pas celle attendue
- Effet de "bouchage" rendant difficile la prédiction de l'écoulement dans une géométrie plus complexe

Approches :

Modèle réduit Algorithme de recherche de débits Utilisation du modèle "Poiseuille" 2D

Modèle complet Simulations numériques 3D

Paramètres utilisés :

 $\eta = 1 Pa.s, \ G = 150 Pa, \ \tau = 0.5 s, \ \kappa = 0.3, \ a = 0.9, \ \mathcal{D} = 10^{-10} \ m^2/s.$

M. Colin, T. Colin, J. Dambrine, "Numerical study of a flow of wormlike micelles through a microfluidic T-shaped junction", en préparation

Première approche : modèle réduit

Hypothèses :

- Pression linéaire dans chaque branche du T
- Pression identique à chaque sortie $(P_1 = P_2 = 0)$
- Le modèle "Poiseuille" 2D permet de calculer les débits dans chaque branche de la jonction



Algorithme de recherche de débits compatibles (on initialise P_i^0) :

• On calcule δP_1^n et δP_2^n avec :

$$\delta P_1^n = -\frac{P_i^n}{L_1}, \quad \delta P_2^n = -\frac{P_i^n}{L_2}$$

- On calcule Q_1^n et Q_2^n grâce au modèle "Poiseuille" 2D
- On corrige la pression intermédiaire :

$$P_i^{n+1} = P_i^n + \delta r \left(Q_3 - (Q_1 + Q_2) \right)$$

Première approche : modèle réduit

Resultat :
$$\frac{L_2}{L_1} = 2$$



Question : Validité des approximations effectuées ?

Deuxième approche : simulations numériques 3D

Modèle :

$$\begin{cases} \eta \Delta \boldsymbol{V} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}} = \nabla \boldsymbol{P}, \\ \nabla \cdot \boldsymbol{V} = 0, \\ \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}} + \frac{1}{\tau} \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}} + \frac{\kappa}{G \tau} (\boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}})^2 = 2 G D[\boldsymbol{V}] + \mathcal{D} \Delta \boldsymbol{\sigma}_{\boldsymbol{p}}. \end{cases}$$

Domaine et conditions aux limites :



Résolution : $N_x \times N_y \times N_z = 100 \times 200 \times 50$

Temps de calcul : \sim 7 jours

• Jonctions fortement asymétriques : $\frac{L_2}{L_1} = 2$

Simulations numériques 3D, effet de bouchage :



 $\delta P = 2 B/(6cm)$

• Jonctions fortement asymétriques : $\frac{L_2}{L_1} = 2$

Simulations numériques 3D, effet de bouchage :



 $\delta P = 3.5 \, B/(6 cm)$

• Jonctions fortement asymétriques : $\frac{L_2}{L_1} = 2$

Simulations numériques 3D, effet de bouchage :



 $\delta P = 5 B/(6cm)$

• Jonctions fortement asymétriques : $\frac{L_2}{L_1} = 2$

Simulations numériques 3D, effet de bouchage :



 $\delta P = 20 B/(6cm)$

Deuxième approche : simulations numériques 3D

Resultat :
$$\frac{L_2}{L_1} = 2$$



► Jonctions faiblement asymétriques : $\frac{L_2}{L_1} = 1 + \varepsilon$

Simulations numériques 3D, $\delta P = 5 B/(6cm)$, sensibilité à la géométrie :



► Jonctions faiblement asymétriques : $\frac{L_2}{L_1} = 1 + \varepsilon$

Simulations numériques 3D, $\delta P = 5 B/(6cm)$, sensibilité à la géométrie :



► Jonctions faiblement asymétriques : $\frac{L_2}{L_1} = 1 + \varepsilon$

Simulations numériques 3D, $\delta P = 5 B/(6cm)$, sensibilité à la géométrie :



► Jonctions faiblement asymétriques : $\frac{L_2}{L_1} = 1 + \varepsilon$

Simulations numériques 3D, $\delta P = 5 B/(6cm)$, sensibilité à la géométrie :



Conclusion de la deuxième partie

Travail effectué :

- Modification du modèle de Johnson-Segalman
- ► Caractérisation des effets non-locaux, et du rôle de la diffusion dans le modèle
- Reproduction des effets de bouchage dans des jonctions micro-fluidiques grâce à des calculs 3D
- ► Etude de l'influence de la géométrie

Perspectives

- ► Simulations numériques dans le cas de réseaux micro-fluidiques complexes
- Ecoulements d'émulsions (C. Picard)
- ► Ecoulements diphasiques, Polymère/Polymère, Eau/Poymère (V. Huber)

Merci pour votre attention !