

N° d'ordre : 4667

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX I

ÉCOLE DOCTORALE DE MATHÉMATIQUES ET
INFORMATIQUE

par **Johana Lizeth PINILLA VELANDIA**

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : Mathématiques Appliquées et Calcul Scientifique

**MODÉLISATION ET SIMULATION À L'ÉCHELLE DU
PORE DE LA RÉCUPÉRATION ASSISTÉE DES
HYDROCARBURES PAR INJECTION DE
POLYMÈRES**

Soutenue le 13 décembre 2012

Après avis de :

M. Cédric GALUSINSKI Professeur, Université du Sud-Toulon-Var Rapporteur
M. Mazen SAAD Professeur, École Centrale de Nantes Rapporteur

Devant la commission d'examen formée de :

M. Hugues BODIGUEL	Maître de conférences, IPB	Examineur
M. Charles-Henri BRUNEAU	Professeur, Université Bordeaux I	Directeur
M. Cédric GALUSINSKI	Professeur, Université du Sud-Toulon-Var	Examineur
M. Angelo IOLLO	Professeur, Université Bordeaux I	Président
Mme. Sandra TANCOGNE	Maître de conférences, Université de Reims	Rapporteur

Institut de Mathématiques de Bordeaux
Université Bordeaux I
351, Cours de la Libération,
33405 Talence cedex, France

Résumé

Modélisation et simulation à l'échelle du pore de la récupération assistée des hydrocarbures par injection de polymères. Ce travail est motivé par la nécessité de mieux comprendre la technique de récupération du pétrole par injection de polymères à l'échelle du pore. On considère deux fluides immiscibles dans un réseau de microcanaux. A cette échelle, le diamètre des canaux est de l'ordre de quelques dizaines de micromètres tandis que la vitesse est de l'ordre du centimètre par seconde. Cela nous permet d'utiliser les équations de Stokes incompressible pour décrire l'écoulement des fluides. Le modèle Oldroyd-B est utilisé pour décrire l'écoulement du fluide viscoélastique. Afin d'effectuer des simulations numériques dans une géométrie complexe comme un réseau de microcanaux, une méthode de pénalisation est utilisée. Pour suivre l'interface entre les deux fluides, la méthode Level-set est employée. Le modèle pour la dynamique de la ligne triple est basé sur la loi de Cox. Enfin, on présente des résultats de simulations numériques avec des paramètres physiques réalistes.

Mots clés : microfluidique, écoulement diphasique, ligne triple, modèle de Cox, pénalisation, level-set, échelle du pore, polymères, Oldroyd-B

Pore-scale numerical simulation of Oil Recovery by polymer injection. This work is motivated by the need for better understanding the polymer Enhanced Oil Recovery (EOR) technique at the pore-scale. We consider two phase immiscible fluids in a microchannel network. In microfluidics, the diameter of the channels is of the order of a few tens of micrometers and the flow velocity is of the order of one centimeter per second. The incompressible Stokes equations are used to describe the fluid flow. The Oldroyd-B rheological model is used to capture the viscoelastic behavior. In order to perform numerical simulations in a complex geometry like a microchannel network, a penalization method is implemented. To follow the interface between the two fluids, the Level-Set method is employed. The dynamic contact line model used in this work is based on the Cox law. Finally, we perform simulations with realistic parameters.

Keywords : microfluidics, two-phase flow, triple contact line, Cox model, penalization, level-set, pore scale, polymer, Oldroyd-B

Remerciements

Je tiens en premier lieu à remercier mon directeur de thèse, Charles-Henri Bruneau, pour son encadrement bienveillant et sa disponibilité. Sa rigueur et sa motivation ont été moteurs tout au long de ce travail de recherche.

Je voudrais aussi remercier très chaleureusement Sandra Tancogne pour sa collaboration pendant la dernière année de ma thèse. Je la remercie pour son énorme patience, son aide, ses conseils et les nombreuses relectures de mon manuscrit.

Je remercie l'ensemble des membres du jury. Cédric Galusinski et Mazen Saad pour avoir acceptés d'être les rapporteurs de mon travail de thèse. Angelo Iollo en tant que président du jury, Hugues Bodiguel et Sandra Tancogne en tant qu'examineurs.

Je remercie Hugues Bodiguel et Annie Colin du LOF. Les réunions ainsi que les différents échanges m'ont permis de comprendre la loi de Cox et la dynamique du point triple.

Un grand merci à tout l'équipe de la cellule informatique de l'IMB pour la mise à disposition de moyens de calcul performants. Je remercie donc Phillipe Depouilly, Sandrine Layrisse, Christian Labesse, Sylvain Allemand. De même pour sa disponibilité permanente, j'exprime ma reconnaissance à Laurent Facq. Je remercie aussi très chaleureusement Khodor Khadra pour sa sympathie sans faille et pour tous les services rendus.

Merci à toutes les personnes que j'ai eu la chance de connaître à l'IMB. Je pense particulièrement à mes amis et collègues de bureau, Damiano et Alberto, qui m'ont soutenu pendant les périodes difficiles. Je pense aussi à Cédric, Karen, Joyce, Jade, Xiong, Michele, Peng, Marco, Armando, Adrien, Alice, Franck, Nicolas, Romain, Nastaran avec qui j'ai passé de très bons moments. Je pense à votre bon humour, aux pauses-café, aux pauses-déjeuner, à la fête de la pizza (grâce à l'influence italienne dans le groupe) et d'autres sorties pour se détendre. Damiano et Cédric, votre venue à ma soutenance m'a vraiment touchée.

Comment ne pas remercier aussi mes amis Louiza, Alex et Mónica pour avoir été si présents pendant ces années de thèse et pour avoir partagé de très bons moments.

Je souhaite remercier de tout mon cœur ma famille d'ici et d'ailleurs. Merci à mes parents, ma sœur et mon frère de m'avoir soutenu malgré les 8500 km de séparation. Une grande pensée à mes beaux-parents qui ont suivi de très près tout le déroulement de la thèse et qui ont su m'encourager dans les moments compliqués.

Pour finir, à Adrien, je lui exprime tout mon amour et ma reconnaissance, pour son soutien, son encouragement, sa patience et pour avoir supporté pendant de nombreuses fois des histoires par rapport au point triple.

Ce travail de recherche n'aurait pas pu être effectué sans le soutien de toutes ces personnes.

Table des matières

Introduction	17
1 État de l’art et modélisation physique	21
1.1 Modélisation à l’échelle du pore	21
1.1.1 Les différentes échelles de modélisation en milieu poreux . .	21
1.1.2 La microfluidique	23
1.1.3 Modélisation en microfluidique	24
1.1.4 Concept d’interface et tension superficielle	25
1.1.5 Relations de saut à l’interface	27
1.1.5.1 Loi de Laplace	27
1.1.5.2 Relations de saut	27
1.1.6 Le mouillage	29
1.1.6.1 Mouillage partiel et mouillage total	29
1.1.6.2 Ligne triple et angle de contact	29
1.1.6.3 Angle de contact dynamique	30
1.2 Modélisation de la dynamique de la ligne triple	32
1.2.1 État de l’art	32
1.2.2 Modèle de Cox	35
1.2.3 Interprétation du modèle de Cox	36
1.3 Les polymères en solution	38
1.3.1 Quelques définitions	38
1.3.2 Classification des fluides non newtoniens	39
1.3.3 Quelques phénomènes des fluides viscoélastiques	41
1.3.4 Modélisation du comportement viscoélastique	42
1.3.4.1 Équations de base	43
1.3.4.2 Modèle Oldroyd-B	45
1.4 Modèle physique	47
2 Modèle mathématique	49
2.1 Le modèle de Stokes monofluide	49
2.2 La Méthode Level Set	52
2.2.1 Méthodes de capture d’interface : état de l’art	52
2.2.2 La fonction Level-Set	56

2.2.3	Calcul de la normale et la courbure	58
2.2.4	Lissage des discontinuités	58
2.3	Formulation Level-Set	59
2.4	Méthode de pénalisation	60
2.5	Modèle final	62
2.6	Conditions aux limites	63
2.6.1	Condition d'entrée sur $\partial\Omega_e$	63
2.6.2	Conditions périodiques sur $\partial\Omega_g$ et $\partial\Omega_d$	64
2.6.3	Condition de sortie sur $\partial\Omega_s$	64
2.7	Conditions initiales	66
2.8	Mise sous forme adimensionnelle	66
3	Résolution numérique et validation	69
3.1	Algorithme de résolution	69
3.2	Méthode du Lagrangien Augmenté	70
3.3	Algorithme général	72
3.4	Condition de stabilité	73
3.5	Discrétisation en espace	73
3.5.1	Notations et positionnement des inconnues	73
3.5.2	Discrétisation de Stokes	75
3.5.2.1	Calcul des viscosités	76
3.5.2.2	Discrétisation du terme de tension de surface	77
3.5.2.3	Discrétisation du terme $\frac{\eta_p}{\lambda} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$	78
3.5.2.4	Schéma final	79
3.5.2.5	Validation du code : loi de Laplace	80
3.5.3	Traitement de la loi de comportement	81
3.5.3.1	Splitting première étape	81
3.5.3.2	Splitting deuxième étape	82
3.5.3.3	Validation du code : schéma pour le tenseur de confor- mation	84
3.5.3.4	Validation du code : Écoulement dans un canal, comparaison avec la solution analytique	86
3.5.4	Équation de Transport	88
3.6	Redistanciation	91
3.6.1	Méthode Fast Marching	91
3.6.2	Validation : test du serpent	93
3.7	Traitement du point triple	95
3.7.1	Détection d'un point triple	95
3.7.2	Calcul de l'angle de contact	97
3.7.3	Traitement de la vitesse du point triple	98
3.8	Traitement des conditions aux limites	101
3.8.1	Condition d'entrée	101
3.8.2	Conditions périodiques	101

3.8.3	Condition de sortie	102
4	Simulation des écoulements diphasiques newtonien/newtonien dans un canal	105
4.1	Description de la géométrie	105
4.2	Calcul de la vitesse relative	105
4.3	Résultats avec pénalisation à l'ordre 1	107
4.3.1	Forme du ménisque et rayon	110
4.3.2	Convergence de grille	111
4.3.3	Comportement de l'angle de contact et forme du ménisque pour différents nombres capillaires	114
4.4	Résultats avec une condition limite	117
4.4.1	Convergence de grille	120
4.4.2	Comportement de l'angle de contact et forme du ménisque pour différents nombres capillaires	122
4.5	Comparaison des deux méthodes et vérification de la Loi de Cox . .	125
5	Simulation des écoulements diphasiques newtonien/viscoélastique	129
5.1	Simulations dans un canal	129
5.2	Simulations dans un réseau de micro-canaux	133
5.2.1	Description de la géométrie	133
5.2.2	Test de symétrie	134
5.2.3	Simulation dans un réseau hétérogène	137
5.3	Simulations dans un réseau de micro-canaux avec un temps de relaxation élevé	143
	Conclusions et Perspectives	145
	A Solution analytique du modèle Oldroyd-B dans un canal	147
	B Interpolations pour calculer la vitesse dans le maillage deux fois plus fin	149
	Bibliographie	153

Table des figures

1.1	Illustration des différentes échelles	22
1.2	Exemple d'une puce microfluidique en verre et PDMS. Image tirée de www.lof.cnrs.fr	24
1.3	Schématisation de deux molécules d'un fluide avec leurs interactions respectives. La molécule à la surface perd la moitié de ses interactions	25
1.4	Exemples d'interfaces	26
1.5	Loi de Laplace : Géométrie de la séparation entre deux fluides permettant de définir les rayons de courbure principaux R_1 et R_2 (cf. [32])	27
1.6	Conditions à l'interface entre deux fluides notés 1 et 2	28
1.7	Les deux régimes de mouillage d'une goutte posée sur un substrat.	29
1.8	Détermination de θ_E en équilibrant les forces capillaires agissant sur la ligne triple.	30
1.9	Représentation schématique des quatre configurations possibles de mouillage.	30
1.10	Gouttes d'eau sur (a) une feuille de lotus ($\theta_E > \frac{\pi}{2}$) (b) une plaque de verre ($\theta_E < \frac{\pi}{2}$)	31
1.11	Schéma du film précurseur. Le film précurseur est devant la ligne triple. Image tirée de [22].	33
1.12	La longueur de glissement λ est la distance à la paroi à partir de laquelle la vitesse tangentielle s'annule.	34
1.13	Modèle pour la ligne triple de contact.	37
1.14	Fluides non newtoniens indépendants du temps	39
1.15	Fluides non newtoniens dépendants du temps	40
1.16	Effet Weissenberg	42
1.17	Effet siphon sans tube	42
1.18	Effet mémoire	43
1.19	Schéma unidimensionnel du modèle de Maxwell.	45
1.20	Domaine $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Sigma$	47
2.1	Domaine bifluide $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Sigma$	49
2.2	Schématisation des méthodes de suivi du front (front-tracking)	53

2.3	Maillage mobile utilisé dans [33] pour la simulation de la coalescence de deux gouttes sphériques.	54
2.4	Principe de la méthode VOF. (a) Fraction volumique ou fonction couleur (b) Reconstruction de l'interface méthode VOF-SLIC (c) Reconstruction de l'interface méthode VOF-PLIC	55
2.5	Fonction Level-Set	57
2.6	Plan du réseau de microcanaux utilisé au LOF pour la fabrication du micro-modèle. Il comprend trois zones : l'entrée, le milieu poreux et la sortie. Image tirée de [17].	61
2.7	Domaine $\Omega = \Omega_f \cup \Omega_s$	62
2.8	$\partial\Omega = \partial\Omega_e \cup \partial\Omega_s \cup \partial\Omega_g \cup \Omega_d$	63
3.1	Notations	73
3.2	Positionnement des inconnues : (a) Maillage MAC, localisation de $p_{i,j}$, $u_{i,j}$ et $v_{i,j}$ (b) Localisation des composantes du tenseur de conformation $\tau_{xx_{i,j}}$, $\tau_{xy_{i,j}}$, $\tau_{yy_{i,j}}$ (c) Localisation de $\phi_{i,j}$, $\eta_{i,j}$, $\eta_{p_{i,j}}$ et $\lambda_{i,j}$	74
3.3	Volumes de contrôle V_u (en rouge) et V_v (en bleu)	75
3.4	Vérification de la loi de Laplace : champ de pression. Les paramètres de la simulation sont : $R = 10 \mu m$, $\eta_1 = 55 mPa.s$, $\eta_2 = 305 mPa.s$, $\gamma = 32 mN/m$. Maillage : 256×256	80
3.5	Interpolations pour la première étape du splitting.	82
3.6	Interpolations pour la deuxième étape du splitting, première équation du système (3.32).	83
3.7	Interpolations pour la deuxième étape du splitting, deuxième équation du système (3.32).	84
3.8	Interpolations pour la deuxième étape du splitting, troisième équation du système (3.32).	84
3.9	Vérification de l'ordre de l'erreur commise lors de la résolution numérique de (3.32).	86
3.10	Solution stationnaire du modèle Oldroyd-B dans un canal. Profils de (a) $v(x)$, (b) τ_{xy} et (c) τ_{yy} pour une coupe horizontale au milieu du canal.	87
3.11	Maillage deux fois plus fin.	88
3.12	Description des ensembles pour la méthode Fast-marching	92
3.13	Test du serpentin : Champ de vitesse et profil de départ (cercle de rayon 0.2 et centré au point (0.25, 0.75).	93
3.14	Test du serpentin.	94
3.15	Détection du point triple dans un réseau de microcanaux. Dans ce réseau, six points triples sont présents : deux dans le canal horizontal à gauche, deux dans le canal horizontal à droite et deux dans le canal vertical supérieur	96

3.16	Détection du point triple (a) sur une paroi verticale, (b) sur une paroi horizontale, écoulement vers la gauche et (c) sur une paroi horizontale, écoulement vers la droite.	97
3.17	Calcul de l'angle de contact dans le cas où le point triple se trouve sur une paroi verticale.	98
3.18	Cas d'un point triple qui glisse sur une paroi verticale. La région colorée en gris correspond à la partie solide du domaine et les lignes pointillées correspondent au maillage deux fois plus fin. (a) Le point triple est au coin d'un volume de contrôle V_p (b) le point triple est au milieu de l'arête du volume de contrôle V_p	99
3.19	Imposition de la vitesse V_{cox} dans le cas d'un point triple qui glisse sur une paroi verticale. (a) Le point triple est au coin du volume de contrôle V_p (b) le point triple est au milieu de l'arête du volume de contrôle V_p	100
4.1	Schéma du domaine pour la simulation d'un écoulement diphasique dans un canal.	106
4.2	Simulation d'un écoulement diphasique entre deux fluides newtoniens : évolution de l'interface et champ de vitesse global. Vitesse du point triple imposée par pénalisation.	108
4.3	Front de l'interface (noir) et champ de vitesse relative (bleu) avec quelques lignes de courant.	108
4.4	Résultats avec la pénalisation à l'ordre 1.	109
4.5	Écoulement autour du point triple. (a) L'angle de contact n'a pas encore atteint sa valeur critique 140° . (b) L'angle de contact a dépassé la valeur critique et la vitesse du point triple est imposée sur quelques mailles.	109
4.6	Schéma pour le calcul du rayon. On cherche le point d'intersection entre les normales n_1 et n_2 prises sur le front de l'interface. Le rayon est la distance à ce point.	110
4.7	(a) Comparaison entre la forme du ménisque et un cercle de rayon $R = 0.56$. (b) Rayon en fonction du temps.	111
4.8	Convergence de grille avec la pénalisation à l'ordre 1 : position de l'interface à l'instant $t = 2.01$	112
4.9	Convergence de grille avec la pénalisation à l'ordre 1 : (a) angle de contact (b) vitesse du point triple.	113
4.10	Simulation d'un écoulement diphasique entre deux fluides newtoniens pour différents nombres capillaires : forme adoptée par le ménisque.	114
4.11	Simulation d'un écoulement diphasique entre deux fluides newtoniens pour différents nombres capillaires : évolution en temps du rayon	115
4.12	Simulation d'un écoulement diphasique de deux fluides newtoniens avec différents nombres capillaires.	116

4.13	Méthodes permettant d'imposer la vitesse de glissement V_{cox} . (a) Pénalisation à l'ordre 1 : V_{cox} est imposée sur le noeud de vitesse (i, j) (b) Condition limite : V_{cox} n'est pas imposée sur un noeud de vitesse.	117
4.14	Simulation d'un écoulement diphasique entre deux fluides newtoniens : évolution de l'interface et champ de vitesse globale. V_{cox} imposée comme une condition limite.	118
4.15	(a) Forme du ménisque (b) Évolution en temps du rayon de courbure	119
4.16	Évolution de (a) l'angle de contact et de (b) la vitesse du point triple en utilisant une condition limite à l'ordre 2 pour imposer la vitesse du point triple. L'angle se stabilise à 144° et la vitesse à 1.	119
4.17	Convergence avec la condition limite : position de l'interface à l'instant $t = 2.01$	120
4.18	Convergence de grille avec la condition limite : (a) angle de contact (b) vitesse du point triple.	121
4.19	Forme adoptée par le ménisque avec la méthode de la condition limite.	122
4.20	Évolution du rayon. La vitesse du point triple est imposée avec la condition limite.	123
4.21	Évolution de (a) l'angle de contact et de (b) la vitesse du point triple. La vitesse du point triple est imposée avec une condition limite. . .	124
4.22	Vérification de la loi de Cox. (a) Résultats avec la pénalisation à l'ordre 1. (b) Résultats avec la condition limite. La courbe continue en rouge a été tracée en utilisant l'équation (1.20) avec $\lambda = 1 \times 10^{-4}$.	126
4.23	Comparaison de V_{cl} et V_{cox} avec la méthode de pénalisation.	127
4.24	Comparaison de V_{cl} et V_{cox} avec la méthode de la condition limite. .	127
5.1	Simulation d'un écoulement diphasique newtonien/viscoélastique. Position de l'interface et norme de la vitesse à $t = 2.25$ pour différents temps de relaxation.	130
5.2	Simulation d'un écoulement diphasique newtonien/viscoélastique. Composante τ_{xx}	131
5.3	Simulation d'un écoulement diphasique newtonien/viscoélastique. Composante τ_{xy}	131
5.4	Simulation d'un écoulement diphasique newtonien/viscoélastique. Composante τ_{yy}	132
5.5	Schéma du domaine pour la simulation d'un écoulement diphasique dans un réseau.	133
5.6	Simulation d'un écoulement diphasique de deux fluides newtoniens dans un réseau de micro-canaux symétrique : test de symétrie. . . .	135
5.7	Champ de vitesse au voisinage des points triples détectés à l'instant $t = 6.875$	136
5.8	Écoulement diphasique newtonien/viscoélastique : lignes de courant et évolution de l'interface	138

5.9	Comparaison de la position de l'interface.	139
5.10	Comparaison de la position de l'interface.	140
5.11	Comparaison de la position de l'interface.	141
5.12	Contours du champ de vorticit� de la vitesse relative � l'instant $t = 14.06$	142
5.13	Sch�ma du domaine pour la simulation d'un �coulement diphasique dans un r�seau h�t�rog�ne.	143
5.14	Comparaison de la position de l'interface � l'instant $t = 17.5$	144
B.1	�tapes pour interpoler u dans le maillage deux fois plus fin. Les points en rouge sont les points � la vitesse est calcul�e � l'�tape actuelle. Les points en noir sont les vitesses d�j� calcul�es.	150
B.2	�tapes pour interpoler v dans le maillage deux fois plus fin. Les points en rouge sont les points � la vitesse est calcul�e � l'�tape actuelle. Les points en noir sont les vitesses d�j� calcul�es.	151

Introduction

Étapes de la récupération du pétrole

Le pétrole est à ce jour la première source mondiale d'énergie et une des matières premières les plus importantes. La formation du pétrole est un processus complexe qui prend des millions d'années. La matière organique, issue de la mort d'être vivants qui habitaient dans des milieux aquatiques, s'est déposée au fond des océans et des lacs. Pendant des millions d'années, cette matière organique s'est accumulée et s'est mélangée aux sédiments, pour former le *kérogène*, une substance intermédiaire entre la matière organique et les combustibles fossiles. Avec le temps, de nouveaux sédiments ont continué à s'accumuler, et le kérogène, a été donc soumis à des pressions et des températures de plus en plus élevées. Généralement situé entre 2500 et 5000 m, le kérogène se transforme en pétrole accompagné de gaz, sous l'action des hautes températures. Relativement léger, le pétrole a tendance à remonter vers la surface de la Terre. Il migre lentement à travers des couches géologiques poreuses. Parfois il reste piégé par une roche imperméable qui empêche sa diffusion à travers elle. Alors, un gisement est formé et il attend d'être découvert. Dans le cas contraire, il sort tout seul à la surface.

Une fois que le réservoir de pétrole a été localisé et les opérations de forage ont été faites, il vient l'étape de récupération. Au cours de la vie d'un puits, il existe trois manières de récupérer le pétrole. La *récupération primaire*, qui utilise la pression du gisement comme moteur de la production, permet d'extraire en moyenne 25% du pétrole en place. La récupération primaire se termine lorsque la pression du réservoir a beaucoup diminuée ou quand le puits produit des quantités importantes d'autres fluides comme de l'eau. Pour continuer la récupération vient l'étape de *récupération secondaire*, qui consiste à injecter dans le gisement des fluides moins coûteux que le pétrole, comme de l'eau, pour maintenir le gradient de pression. Ces fluides sont injectés par certains puits appelés *injecteurs* pour pousser le pétrole vers le puits *producteur*. Cette technique permet d'atteindre un taux de récupération de l'ordre de 25% à 35% du pétrole en place. Après les récupérations premières et secondaires, le gisement contient encore plus de 50% du pétrole initialement présent. Cela est dû au fait que l'efficacité des deux premières étapes est limitée par deux facteurs :

- à l'échelle du pore, le pétrole atteint une saturation résiduelle assez faible pour se retrouver sous forme de globules discontinus, piégés par les forces

capillaires,

- il y a des zones dans lesquelles le fluide injecté au cours de la récupération secondaire ne pénètre pas à cause de la faible perméabilité.

Augmenter le taux de récupération est donc un moyen d'accroître la production de manière plus rapide, plus sûre, et sans doute moins onéreuse que de lancer de nouvelles campagnes d'exploration. Alors, pour pouvoir récupérer le pétrole restant, il est nécessaire d'utiliser des procédés de *récupération tertiaire* ou récupération améliorée du pétrole (en anglais Enhanced Oil Recovery - EOR). Une de méthodes d'EOR consiste à injecter dans les puits un polymère soluble dans l'eau, comme la polyacrylamide, pour accroître la viscosité de l'eau et augmenter ainsi son pouvoir de balayage dans le réservoir. L'eau injectée devrait idéalement pousser l'huile tel un piston, mais parce qu'elle est plus mobile que l'huile, elle faillit souvent à cette mission, se faulant par les chemins de moindre résistance que lui offre le réservoir. Remédier à ce problème est, dans le principe, tout aussi simple : il s'agit de réduire la mobilité de l'eau en augmentant sa viscosité, de manière à rapprocher autant que possible ses propriétés de celles de l'huile cible [73].

Pour mieux comprendre les aspects de la récupération tertiaire, les entreprises d'exploitation du pétrole s'intéressent à l'étude du comportement de l'écoulement à l'échelle du pore. De telles études au niveau expérimental, sont menées actuellement au laboratoire LOF (Laboratory Of Futur) à Pessac. Pour effectuer ces expériences physiques, le LOF utilise des réseaux de microcanaux qui permettent de reconstruire les conditions de l'écoulement dans un milieu poreux à l'échelle du pore. Dans un réseau de microcanaux d'environ $40\mu m$ de diamètre, gravé dans la puce et rempli d'huile pour mimer l'hydrocarbure, une solution polymérique est injectée. Cela permet d'évaluer l'efficacité de la solution pour extraire l'huile des canaux.

Dans le but de mieux comprendre l'écoulement à cette échelle, nous nous intéressons à la simulation numérique des expériences menées au LOF. On parle alors de la modélisation des écoulements où deux phases sont présentes : l'huile (fluide newtonien) et une solution polymérique (fluide viscoélastique). En effet, la dynamique des fluides rencontrée à cette échelle est caractérisée par la prépondérance de la tension de surface et des écoulements à très faible vitesse conduisant à la résolution de problèmes où les temps de calcul sont prohibitifs. Une difficulté majeure lors de la simulation des écoulements diphasiques dans un réseau de microcanaux est la modélisation de la dynamique de la ligne triple. La difficulté vient en partie du fait que les équations classiques de l'hydrodynamique, couplées à la condition de non glissement à la paroi conduisent à un champ de vitesse multivalué. Ainsi, pour pouvoir mener des simulations le plus réalistes possibles, l'objectif de cette thèse est de développer des outils de simulation qui prennent en compte la physique particulière liée à cette échelle, la dynamique des deux fluides présents (un fluide newtonien et un fluide viscoélastique) et la dynamique de la ligne triple.

Objet de l'étude

L'objectif de ce travail est de modéliser l'écoulement diphasique entre un fluide newtonien et un fluide viscoélastique dans un réseau de microcanaux dans le but de mieux comprendre ce qui se passe à l'échelle microscopique dans la récupération assistée des hydrocarbures par injection de polymères. Pour ce faire, il faut tout d'abord, écrire une modélisation qui intègre au système d'équations représentant les écoulements à l'échelle du pore, les termes nécessaires à la prise en compte des propriétés rhéologiques de ces composés. Ensuite, mettre en place les approximations les plus efficaces pour discrétiser le système d'équations en tenant compte des caractéristiques des fluides et des conditions aux limites du domaine, enfin faire la simulation numérique. Les résultats sont confrontés aux résultats expérimentaux menés au LOF.

Le travail de recherche présenté ici a été réalisé au sein de l'équipe de Calcul Scientifique et Modélisation de l'IMB en collaboration avec le LOF. L'implémentation des outils numériques décrits dans cette thèse a été faite en partant d'un code de simulation séquentiel, développé par Sandra Tancogne dans son travail de thèse [71], écrit en fortran 90, pour la simulation d'écoulements diphasiques 3D en microfluidique. Nous avons implémenté les modules servant au traitement de la ligne triple dans un réseau de microcanaux (détection et modélisation avec la loi de Cox), du modèle Oldroyd-B pour les fluides viscoélastiques et à la parallélisation en MPI.

Plan du mémoire

Ce manuscrit est organisé en quatre chapitres.

Le premier chapitre est consacré aux notions physiques utiles à la compréhension de ce travail et à la présentation des équations du modèle à résoudre. Plus précisément, ce premier chapitre aborde la modélisation des écoulements diphasiques en microfluidique ainsi que la modélisation des fluides non newtoniens. Il traite aussi d'un aspect très important dans la récupération assistée des hydrocarbures : les propriétés de mouillage et la modélisation de la ligne triple.

Le deuxième chapitre expose les outils mathématiques nécessaires à l'approximation numérique du modèle. Tout d'abord, on fait un état de l'art des méthodes de capture d'interface et on décrit plus en détail la méthode choisie dans notre travail : La méthode Level-Set. Nous présentons aussi dans ce chapitre la méthode du Lagrangien augmenté qui sert à résoudre les équations de Stokes incompressible. Pour simuler l'écoulement dans un réseau de micro-canaux sans avoir besoin de créer un maillage a cette géométrie la méthode de pénalisation est utilisée. Le chapitre 2 finalise le système d'équations adimensionné à résoudre ainsi que les conditions initiales et les conditions limites.

Le troisième chapitre est dédié à la présentation des schémas numériques utilisés et à la validation du code. Le traitement numérique du point triple est détaillé : sa détection, le calcul de l'angle de contact et l'imposition de sa vitesse de déplacement couplée à la méthode de pénalisation.

Le quatrième chapitre expose les résultats des simulations numériques menées dans un micro-canal. Plus précisément, nous nous focalisons sur la comparaison des deux méthodes utilisées pour imposer la vitesse du point triple. Nous confrontons les résultats obtenus par les deux méthodes en étudiant la forme de l'interface à l'état stationnaire, le comportement de l'angle de contact, la vitesse de glissement du point triple, la convergence de grille et la vérification de la loi de Cox.

Dans le dernier chapitre nous présentons des simulations dans un réseau de microcanaux. La principale difficulté provient de la modélisation de plusieurs points triples au même instant et qui se déplacent dans différentes directions. Afin de vérifier la détection et modélisation des points triples dans un réseau, tout d'abord nous nous intéressons aux réseaux homogènes et symétriques. Puis nous passons à des réseaux hétérogènes. Pour ce dernier type de réseaux, le principal objectif est d'étudier l'influence du fluide viscoélastique comme fluide pousseur.

Chapitre 1

État de l'art et modélisation physique

Ce chapitre est consacré aux notions physiques utiles à la compréhension de ce travail et à la présentation des équations du modèle physique à résoudre. Nous nous intéressons tout d'abord à la modélisation des écoulements en microfluidique, constitués de deux phases. De fait, nous abordons les notions d'écoulements laminaires, les concepts d'interface et de tension superficielle, puis les propriétés de mouillage qui jouent un rôle majeur à cette échelle.

Dans un second temps, la modélisation de la ligne triple est abordée. Ce sujet est l'objet de nombreux travaux de recherche puisqu'il met en jeu des difficultés liées au couplage entre les équations de Stokes ou Navier-Stokes et d'une condition d'interface mobile le long d'une paroi solide. Après l'état de l'art des différents modèles existants pour traiter le déplacement de la ligne triple, le modèle de Cox est détaillé, puisqu'il s'agit du modèle retenu dans le cadre de cette thèse.

Dans ce travail, les deux fluides considérés sont respectivement newtonien et viscoélastique. Le but de la troisième section est de présenter la modélisation du fluide viscoélastique. Nous nous concentrons sur la dérivation du modèle Oldroyd-B. À la fin du chapitre, le modèle physique final est présenté.

1.1 Modélisation à l'échelle du pore

1.1.1 Les différentes échelles de modélisation en milieu poreux

Dans le contexte de la mécanique de fluides, un *milieu poreux* peut être défini comme un matériau au sein duquel existent des cavités interconnectées par des canaux, dans lesquels s'écoulent les fluides. Ces cavités sont appelées pores [67]. Le sol, le sable, la plupart des matériaux de construction, sont des exemples de

milieux poreux. La compréhension des mécanismes des écoulements monophasiques et polyphasiques en milieu poreux est très importante pour la récupération du pétrole. Par exemple, les techniques de récupération secondaire et tertiaire mettent en jeu le déplacement de l'hydrocarbure par un autre fluide. L'étude des écoulements en milieu poreux peut être faite à différentes échelles (cf. FIGURE 1.1) :

- **Échelle du pore** : la longueur caractéristique à cette échelle est le diamètre des pores ($1\mu m$ à $100\mu m$). Lorsque les pores ont de petites tailles, l'écoulement d'un fluide se fait à toute petite vitesse et l'approximation de Stokes est généralement valable. Pour la modélisation des écoulements diphasiques, il est nécessaire de regarder les effets de mouillage et de la capillarité.
- **Échelle locale ou échelle de Darcy** : à cette échelle le milieu poreux est traité comme un milieu continu. La dimension caractéristique est de l'ordre du cm . La loi de Darcy est le modèle le plus utilisé pour décrire l'écoulement à cette échelle.
- **Grande échelle** : la longueur caractéristique à cette échelle est de la taille des hétérogénéités. Les écoulements sont modélisés par des équations à grande échelle qui peuvent être obtenues par une prise de moyenne des équations à l'échelle locale [8].

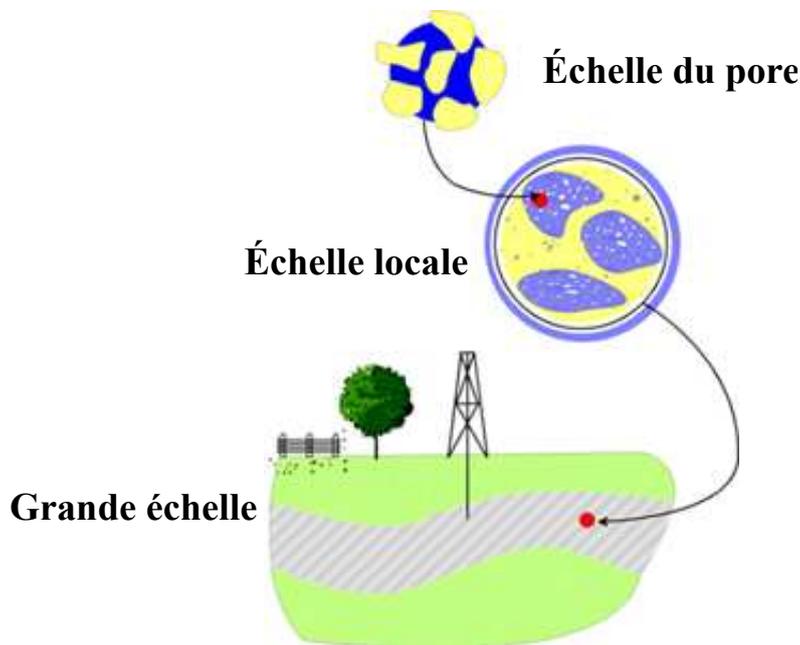


FIGURE 1.1 – Illustration des différentes échelles. Image tirée de www.treffe.u-bordeaux1.fr

Dans le cadre de cette thèse, on s'intéresse à la modélisation de la récupération assistée du pétrole à l'échelle du pore. Pour ce faire, les techniques en microfluidique

offrent l'opportunité de fabriquer des micromodèles de milieu poreux. Le milieu poreux est représenté par un réseau de microcanaux interconnectés. En construisant des réseaux de micro-canaux, il est possible de reconstituer les conditions d'un écoulement dans un milieu poreux. Ces systèmes ont l'avantage d'être transparents, il est donc facile de visualiser et de contrôler les écoulements, en plus, la géométrie du milieu poreux est aussi très bien contrôlée. En fonction des matériaux choisis pour la réalisation des micromodèles, il est possible de modifier et de contrôler les propriétés de mouillage grâce à des techniques de traitement de surfaces [16]. Pour plus de détails sur les micromodèles de milieux poreux, voir [16] et [17]. La section suivante donne une courte introduction à la microfluidique.

1.1.2 La microfluidique

Par définition, la *microfluidique* est la science et la technologie qui manipule des quantités extrêmement faibles de fluide (de l'ordre 10^{-9} à 10^{-18} litres) en utilisant des canaux qui mesurent quelques dizaines de micromètres (1 micromètre = $1\mu m = 10^{-6}m$). En tant que science, elle étudie le comportement des fluides dans des micro-canaux ; en tant que technologie elle s'occupe de la fabrication de dispositifs microfluidiques pour les laboratoires sur puces. La capacité à utiliser de très petites quantités d'échantillons, des réactifs et des procédés avec une haute résolution et sensibilité, ainsi que le faible coût et les courtes périodes nécessaires pour l'analyse sont quelques uns des avantages qu'offre la microfluidique [78].

La plupart des microcanaux sont élaborés en PDMS (PolyDiMéthylSiloxane), un élastomère transparent, biocompatible, déformable, facile à mouler et à coller sur du verre. Les dimensions caractéristiques des canaux sont de l'ordre de la centaine de microns. Pour plus de détails sur la fabrication, voir [49] et [70]. Une puce microfluidique est un réseau de micro-canaux gravés dans un matériau, verre par exemple, interconnectés entre eux de manière à réaliser une fonction voulue (mélanges, pompage, redirection, réactions chimiques). Ce réseau de micro-canaux enfermé dans la puce microfluidique est relié à l'extérieur par des entrées et des sorties percées à travers la puce. La FIGURE 1.2 montre un exemple d'une puce microfluidique.

En tant que discipline, la microfluidique est apparue à la fin des années 60 mais son développement était très lent en raison de difficultés liées à l'utilisation de puces en silicium. Actuellement, la microfluidique est un domaine de recherche très dynamique en plein développement. Le dynamisme de la microfluidique est relié à quatre thématiques principales : l'analyse chimique, la biodéfense, la biologie moléculaire et la micro-électronique [78]. En effet, c'est tout d'abord la nécessité de disposer d'outils d'*analyse chimique* (chromatographie en phase gazeuse (GPC), chromatographie liquide à haute pression (HPLC) et électrophorèse capillaire (EC)) qui a

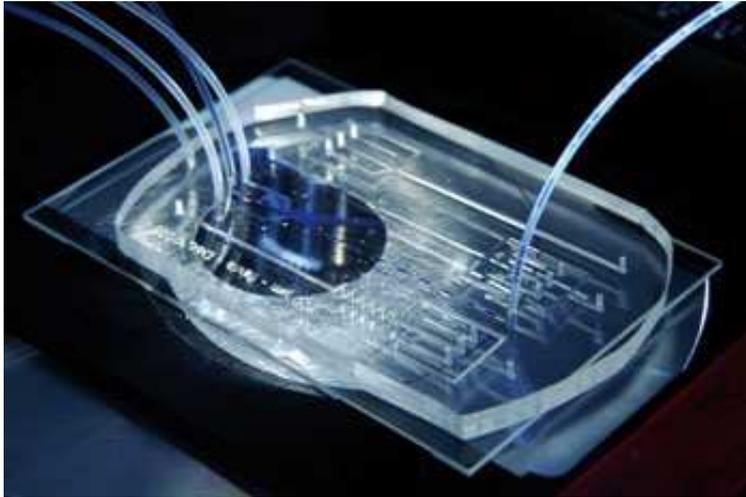


FIGURE 1.2 – Exemple d’une puce microfluidique en verre et PDMS. Image tirée de www.lof.cnrs.fr

favorisé l’émergence de la microfluidique. La deuxième motivation pour le développement de la microfluidique, la *biodéfense*, est arrivée en 1990 après la guerre froide; l’agence pour les projets de recherche avancée de défense aux Etats Unis, DARPA, a soutenu une série de programmes visant à développer des technologies en microfluidique destinées à répondre au risque des menaces chimiques et biologiques. D’autre part, la *biologie moléculaire* a contribué aussi au développement de la microfluidique; l’explosion de la génomique dans les années 80 a rendu nécessaire le développement d’outils d’analyse haut débit hautement parallélisables. Et finalement, la microfluidique a connu un grand développement dans les années 1990, lorsque des techniques de fabrication issues de la *microélectronique* ont été utilisées pour essayer de réaliser des ”laboratoires-sur-puce”. Aujourd’hui, il existe suffisamment de méthodes de fabrication et une gamme suffisante de composants pour appliquer la microfluidique à la compréhension de beaucoup de phénomènes (cf. [41] et [70]).

1.1.3 Modélisation en microfluidique

On souhaite étudier l’écoulement incompressible d’un fluide. Les équations de Navier-Stokes qui décrivent le mouvement d’un fluide newtonien visqueux incompressible sont :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \\ \rho \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} \right) + \nabla p - \nabla \cdot \mathbf{T} = 0, \end{cases} \quad (1.1)$$

où \mathbf{U} représente la vitesse du fluide, p la pression, ρ la densité et \mathbf{T} le tenseur de

contraintes. Si le fluide est newtonien, le tenseur des contraintes \mathbf{T} dépend linéairement du tenseur des déformations \mathbf{D} . Cela se traduit par :

$$\mathbf{T} = 2\eta\mathbf{D}, \quad (1.2)$$

où η est la viscosité du fluide et \mathbf{D} est défini par :

$$\mathbf{D} = \frac{\nabla\mathbf{U} + (\nabla\mathbf{U})^t}{2}. \quad (1.3)$$

Pour les écoulements rencontrés en microfluidique, le diamètre des canaux est de l'ordre de quelques dizaines de micromètres tandis que la vitesse est de l'ordre du centimètre par seconde. Ces écoulements atteignent rapidement un régime stationnaire et les effets visqueux dominent les effets inertiels. En conséquence, le système (1.1) devient le problème de Stokes stationnaire :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{T} = \nabla p. \end{cases} \quad (1.4)$$

Dans ce travail, on s'intéresse à des écoulements en microfluidique, constitués de deux phases. Maintenant on va présenter des aspects sur la tension de surface et les effets du mouillage.

1.1.4 Concept d'interface et tension superficielle

A l'échelle microscopique, un fluide se compose d'un ensemble de molécules qui interagissent entre elles. Dans le cas de deux fluides non miscibles, on discerne une couche de séparation où ces interactions sont modifiées. Cette zone de séparation s'appelle *interface* (cf. FIGURE 1.3). On peut citer par exemple, l'interface eau/air dans le déferlement plongeant d'une vague ou l'interface eau/huile qui se forme lorsque l'on met en contact ces deux fluides (cf. FIGURE 1.4).

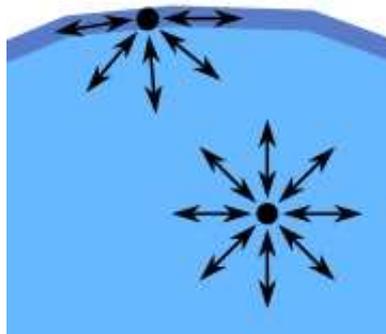


FIGURE 1.3 – Schématisation de deux molécules d'un fluide avec leurs interactions respectives. La molécule à la surface perd la moitié de ses interactions

Les interfaces sont mobiles et capables de se déformer pour minimiser leur énergie de surface [28]. Le fait que les petites gouttes d'eau dans l'air et les petites bulles de gaz dans l'eau prennent une forme sphérique, peut être expliqué par l'hypothèse que l'interface est le siège d'une forme particulière d'énergie proportionnelle à la surface de l'interface [3]. Cette énergie par unité de surface est appelée *tension de surface*, notée γ . Généralement, lorsque l'une des deux phases est un gaz, on parle de *tension superficielle* alors que le terme de *tension interfaciale* est utilisé dans les autres cas. Cet effet permet par exemple aux insectes de marcher sur l'eau, à un objet léger de se maintenir à la surface d'un liquide, à la rosée de ne pas s'étaler sur les pétales de fleurs et explique aussi la formation des bulles de savon.



(a) Déferlement plongeant d'une vague : interface eau/air (b) Gouttes d'huile dans de l'eau : interface eau/huile



(c) Ménisque entre de l'eau et de l'huile dans un tube capillaire : interface eau/huile

FIGURE 1.4 – Exemples d'interfaces

Conceptuellement, γ représente l'énergie à fournir pour augmenter la surface d'une unité [$J \cdot m^{-2}$], ou de façon équivalente, la force à appliquer le long de la normale à l'interface pour déformer la surface à l'équilibre [$N \cdot m^{-1}$]. La tension superficielle dépend du liquide, du milieu qui surmonte sa surface libre et de la température. Par exemple, pour une interface qui sépare l'air de l'eau pure à 20°C , $\gamma = 73 \times 10^{-3} N \cdot m^{-1}$ alors qu'à 50°C , $\gamma = 67.91 \times 10^{-3} N \cdot m^{-1}$.

1.1.5 Relations de saut à l'interface

1.1.5.1 Loi de Laplace

Si on considère deux milieux non miscibles, notés 1 et 2, séparés par une interface, dès que cette interface est courbée, il y a une différence de pression entre les deux milieux. Lorsque les deux milieux sont au repos et qu'il n'y a pas de transfert de matière à travers l'interface, la différence de pression entre les deux milieux s'écrit :

$$p_1 - p_2 = \gamma\kappa = \gamma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right). \quad (1.5)$$

L'équation (1.5) est connue sous le nom de *Loi de Laplace*. p_1 et p_2 sont les pressions dans les milieux 1 et 2 respectivement, κ est la courbure définie par $\kappa = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}$, R_1 et R_2 sont les deux rayons de courbure principaux (cf. FIGURE 1.5) et γ est le coefficient de tension de surface. Cette loi établit que la différence de pression nécessaire pour maintenir la forme d'une interface entre deux fluides est proportionnelle à la courbure.

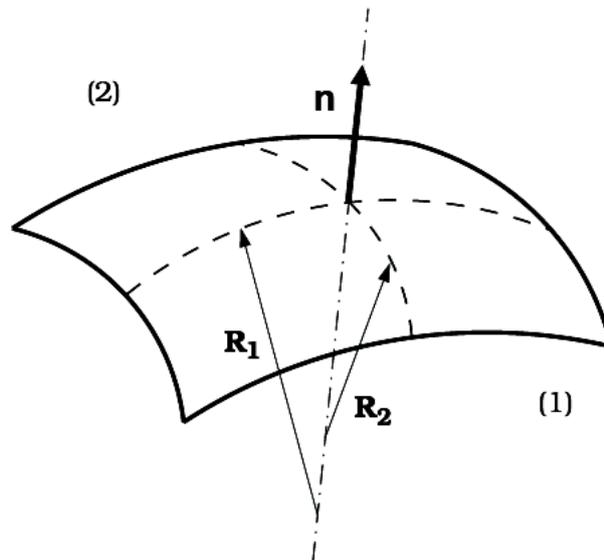


FIGURE 1.5 – Loi de Laplace : Géométrie de la séparation entre deux fluides permettant de définir les rayons de courbure principaux R_1 et R_2 (cf. [32])

1.1.5.2 Relations de saut

Soient \mathbf{n} et \mathbf{t} les vecteurs normal et tangent à l'interface respectivement (cf. FIGURE 1.6), $\boldsymbol{\sigma}$ le tenseur de contraintes total du fluide 1 et $\boldsymbol{\delta}$ le tenseur de contraintes total du fluide 2 définis de la manière suivante :

$$\boldsymbol{\sigma} = -p_1 \mathbf{I} + \eta_1 (\nabla \mathbf{U}_1 + (\nabla \mathbf{U}_1)^t), \quad (1.6)$$

$$\boldsymbol{\delta} = -p_2 \mathbf{I} + \eta_2 (\nabla \mathbf{U}_2 + (\nabla \mathbf{U}_2)^t) + \mathbf{T}_{p_2}, \quad (1.7)$$

où \mathbf{U}_i est la vitesse du fluide i , p_i est la pression dans le fluide i , η_i est la viscosité dynamique du fluide i et \mathbf{T}_{p_2} est le tenseur polymérique. Lorsque l'interface est en mouvement et dans le cas de fluides non miscibles, où il n'y a pas d'échange de masse entre les deux fluides, les trois conditions de saut à l'interface s'écrivent :

– le saut de contraintes normales :

$$((\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} = \gamma \kappa, \quad (1.8)$$

– l'équilibre des contraintes tangentielles :

$$((\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{t} = \mathbf{0}, \quad (1.9)$$

– la continuité de la vitesse à l'interface :

$$\mathbf{U}_1 = \mathbf{U}_2. \quad (1.10)$$

Si la contrainte normale (1.8) est liée seulement à la pression, nous retrouvons la loi de Laplace énoncée précédemment. La condition (1.10) traduit aussi le fait qu'à l'interface, il n'y a pas de glissement d'un fluide par rapport à l'autre.

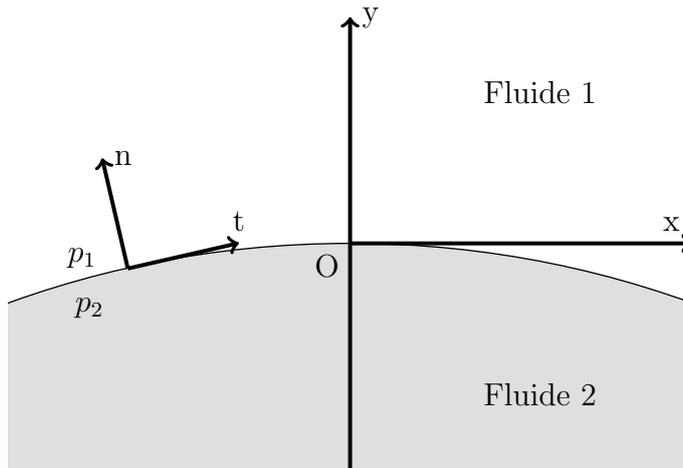


FIGURE 1.6 – Conditions à l'interface entre deux fluides notés 1 et 2

1.1.6 Le mouillage

Le *mouillage* est l'étude de l'étalement d'un liquide déposé sur un substrat solide ou liquide [29]. Ce phénomène touche de nombreux domaines comme l'industrie chimique (préparation de peintures, ancre, insecticides,...), l'automobile (traitement des pneumatiques qui doivent adhérer sur une surface mouillée), la cosmétique (étalement de crèmes, shampoings) mais aussi dans les sciences de la vie (la montée de la sève dans un arbre, la motricité d'un insecte sur l'eau). Lors de la récupération assistée des hydrocarbures, il est très important de comprendre les propriétés du mouillage. Par exemple, dans les réservoirs dits mouillables à l'huile, l'extraction du pétrole est très difficile, en raison de sa forte affinité avec la roche. Dans d'autres réservoirs dits mouillables à l'eau, la récupération semble plus aisée.

1.1.6.1 Mouillage partiel et mouillage total

Lorsque l'on dépose une goutte d'un liquide sur un substrat solide ou fluide, lisse et homogène, il peut se produire deux situations : soit la goutte ne s'étale pas et forme un angle avec le substrat, alors on parle de *mouillage partiel*, soit la goutte s'étale pour former un film macroscopique et uniforme sur le substrat, on parle alors de *mouillage total* (cf. FIGURE 1.7).

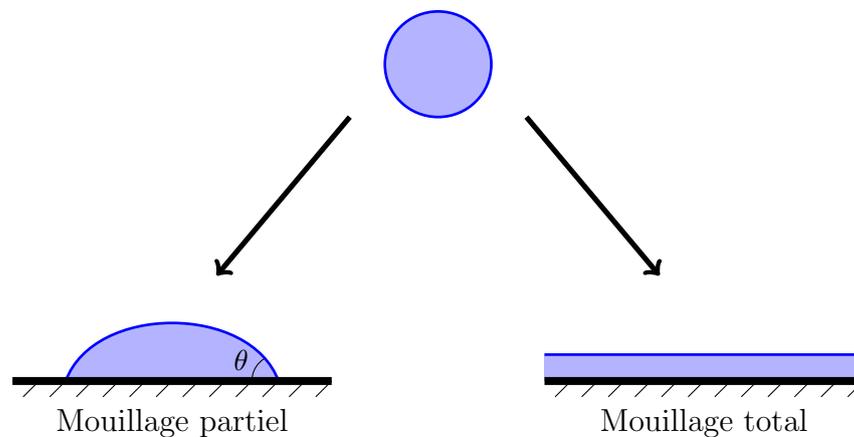


FIGURE 1.7 – Les deux régimes de mouillage d'une goutte posée sur un substrat.

1.1.6.2 Ligne triple et angle de contact

On considère deux fluides immiscibles en contact avec un surface solide (cf. FIGURE 1.8). La ligne où se coupent les trois interfaces (solide/fluide 1, fluide 1/fluide 2 et fluide 2/ solide) est appelée *ligne triple de contact*. En deux dimensions, on parle de *point triple*. A l'équilibre, l'interface fluide/fluide et la surface solide forment un angle caractéristique qui est appelé *angle de contact à l'équilibre*, que l'on note θ_E . Cet angle est déterminé par un bilan des forces agissant sur la ligne

triple. En projetant l'équilibre des forces sur le plan solide, on obtient la relation de Young :

$$-\gamma_{S2} + \gamma_{S1} - \gamma_{12} \cos \theta_E = 0, \quad (1.11)$$

où γ_{S2} , γ_{S1} et γ_{12} sont les tensions superficielles associées respectivement aux interfaces solide/fluide 2, solide/fluide 1 et fluide 1/fluide 2.

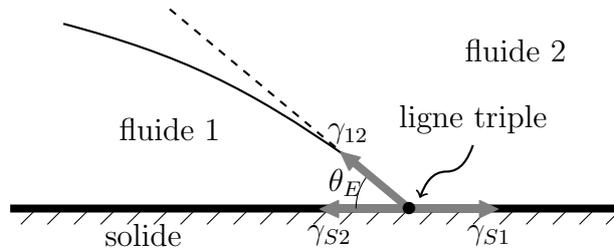


FIGURE 1.8 – Détermination de θ_E en équilibrant les forces capillaires agissant sur la ligne triple.

Dans le cas de mouillage total, l'angle de contact θ_E est nul. Dans le cas de mouillage partiel, si $\theta_E < \frac{\pi}{2}$, on dit que le liquide est *mouillant* et si $\theta_E > \frac{\pi}{2}$, le liquide est dit *non mouillant*. On parle de mouillage nul quand $\theta_E = \pi$. La FIGURE 1.9 illustre ces différentes situations. Dans la nature, une situation de liquide non mouillant peut être retrouvé lorsque une goutte d'eau est posée sur une feuille de lotus. Par contre, si une goutte d'eau est posée sur une plaque de verre, l'eau mouille partiellement le verre (cf. FIGURE 1.10).

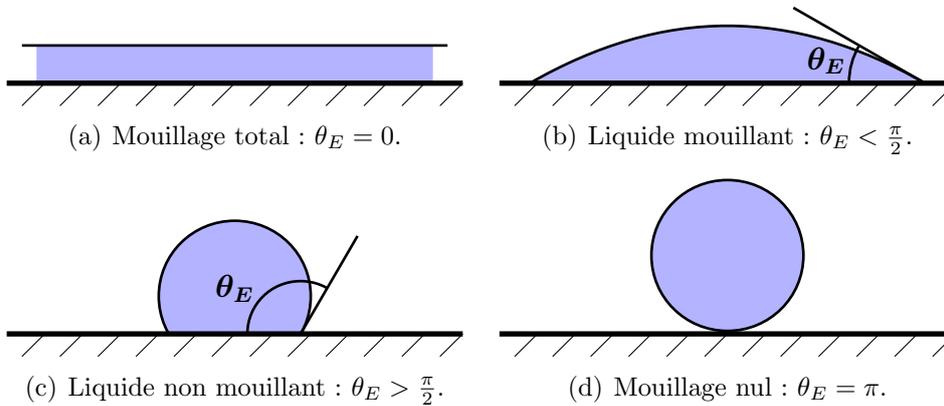


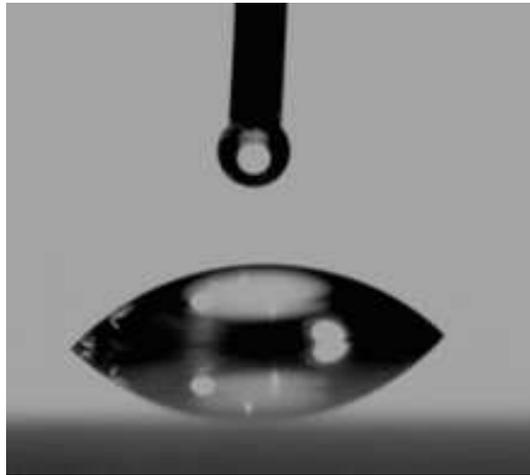
FIGURE 1.9 – Représentation schématique des quatre configurations possibles de mouillage.

1.1.6.3 Angle de contact dynamique

L'angle de contact θ_E que l'on a défini pour un substrat solide correspond à une valeur d'équilibre. Lorsque l'interface fluide 1/fluide 2 est déformée au voisinage de



(a) Gouttes d'eau sur une feuille de lotus. $\theta_E > \frac{\pi}{2}$, l'eau ne mouille pas la feuille de lotus.



(b) Goutte d'eau sur une plaque de verre. $\theta_E < \frac{\pi}{2}$, l'eau mouille partiellement le verre.

FIGURE 1.10 – Gouttes d'eau sur (a) une feuille de lotus ($\theta_E > \frac{\pi}{2}$) (b) une plaque de verre ($\theta_E < \frac{\pi}{2}$)

la ligne triple, l'angle de contact θ_d est différent de θ_E et la ligne bouge. Si $\theta_d > \theta_E$, la ligne avance et si $\theta_d < \theta_E$, elle recule. Alors la force qui tire ou qui pousse la ligne triple est donnée par :

$$F(\theta_d) = -\gamma_{S2} + \gamma_{S1} - \gamma_{12} \cos \theta_E. \quad (1.12)$$

Notre but est de considérer des situations où la force F est non nulle, et où le point triple se déplace avec une certaine vitesse.

1.2 Modélisation de la dynamique de la ligne triple

1.2.1 État de l'art

La modélisation de la dynamique de la ligne triple reste encore un sujet très étudié [57]. La difficulté vient en partie du fait que les équations classiques de l'hydrodynamique, couplées à la condition de non glissement à la paroi conduisent à un champ de vitesse multivalué, c'est-à-dire, la vitesse n'est pas correctement définie au point triple. De part et d'autre du point triple, la condition d'adhérence du fluide doit être satisfaite (vitesse nulle à la paroi), le point triple quant à lui, est animé d'une vitesse non nulle. De nombreux modèles ont été proposés pour traiter cette singularité (cf. [56], [9], [57], [54], [7] pour une revue). On liste ces modèles à la suite :

- **Modèle du film précurseur** : Ce modèle propose l'existence d'un film précurseur devant la ligne triple, telle qu'elle a été détectée dans les expériences [21]. Sur la FIGURE 1.11, l'idée du film précurseur est présentée. Le film précurseur remplace la ligne triple par une couche très mince du fluide, ce qui finalement permet d'éliminer le contact entre l'interface fluide/fluide et la paroi solide. En plus, la condition de non glissement à la paroi peut être conservée sans empêcher que la ligne triple avance. Un aspect important dans la simulation numérique, est que le pas en espace doit être beaucoup plus petit que l'épaisseur du film. Ce modèle peut être interprété comme un artefact numérique, avec un sens physique, pour éliminer la ligne triple [22]. Pour plus de détails sur la simulation numérique de la ligne triple avec cette méthode, voir [22], [11], [61] [46], [50]. La principale limitation de cette approche est le grand coût de calcul : la précision des résultats s'améliore en réduisant l'épaisseur du film précurseur, cependant, cela nécessite une résolution spatiale très fine [27]. Il faut alors utiliser des techniques de maillage adaptatives pour réduire le coût de calcul.
- **Modèles d'interface diffuse** : Les modèles d'interface diffuse traitent l'interface comme une zone d'épaisseur finie à travers laquelle les propriétés des fluides varient fortement, mais en continu. Cela permet à la ligne triple de se déplacer naturellement grâce aux flux diffusifs même si une condition de non glissement est imposée. Le modèle d'interface diffuse le plus utilisé pour traiter des problèmes avec lignes triples est le modèle de Cahn-Hilliard (CH) (cf. [13], [23], [39], [42], [62]). Les équations de Navier-Stokes et le modèle de Cahn-Hilliard s'écrivent :

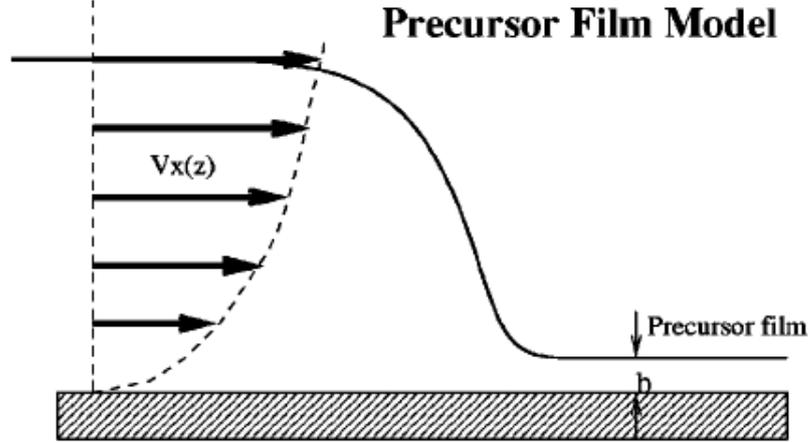


FIGURE 1.11 – Schéma du film précurseur. Le film précurseur est devant la ligne triple. Image tirée de [22].

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (1.13)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T)] + G \nabla \phi, \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot (\gamma \nabla G) \quad (1.15)$$

où la fonction ϕ variant entre 0 et 1 représente la fraction volumique de chaque phase contenue à l'intérieur d'une maille. L'équation de Cahn-Hilliard (1.15) décrit la convection-diffusion de deux fluides, avec un flux diffusif proportionnel à ∇G , γ est le coefficient de mobilité et G le potentiel chimique.

- **Modèle de glissement** : l'autre solution, consiste à remplacer la condition au bord d'adhérence ou de non glissement (no-slip) par un modèle de glissement (slip model) au voisinage de la ligne triple, [68], [37]. Les modèles de glissement ont la particularité d'introduire un paramètre appelé *longueur de glissement* (slip length), que l'on note λ . La longueur de glissement est définie comme la distance à la paroi à partir de laquelle la vitesse tangentielle s'annule (cf. FIGURE 1.12). Parmi ces modèles de glissement, on a :
 - *Condition au bord de Navier* : cette condition au bord proposée par Navier en 1823 est un de modèles les plus utilisés pour traiter la singularité. La vitesse de glissement du point triple est prise proportionnelle à la composante tangentielle du tenseur taux de déformation, le facteur de proportionnalité est la longueur de glissement :

$$V_{cl} = \lambda \hat{n} \cdot \mathbf{D} \cdot \hat{\tau}, \quad (1.16)$$

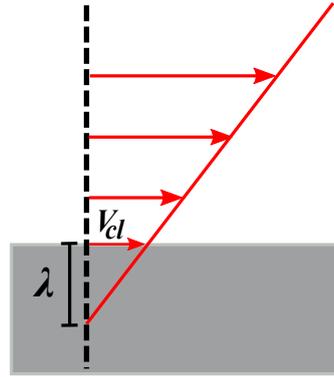


FIGURE 1.12 – La longueur de glissement λ est la distance à la paroi à partir de laquelle la vitesse tangentielle s'annule.

où V_{cl} est la vitesse de glissement du point triple, λ est la longueur de glissement, \mathbf{D} le tenseur taux de déformation, \hat{n} est le vecteur unitaire normal à la paroi et $\hat{\tau}$ est le vecteur unitaire tangentiel à la paroi.

- *la condition au bord stress-free* : d'autres auteurs imposent la condition stress-free, $\partial_{\hat{n}}v = 0$, au voisinage du point triple, avec v la composante tangentielle de la vitesse à la paroi [57].
- *Le profil de glissement prescrit* : pour une géométrie Couette, les auteurs de [72] proposent la condition suivante

$$V_{cl} = V_w(1 - \exp(-r \ln(2/\lambda))), \quad (1.17)$$

avec V_{cl} la vitesse de glissement du point triple, V_w la vitesse de la paroi et r la distance à la ligne triple.

- *Le modèle de Cox* : Cox [19] a développé un modèle macroscopique qui relie la vitesse du point triple à l'angle de contact dynamique. Ce modèle fait l'objet de la section suivante.
- *Autres* : d'autres modèles de glissement sont proposés dans la littérature, par exemple, le modèle de Blake [7], la condition de Navier généralisée [55], [30] ou le modèle utilisé par Spelt [68].

Tous les modèles cités ci-dessus servent à traiter le problème de la ligne triple, alors il est naturel de se demander quel modèle décrit le mieux le comportement de la ligne de contact et lequel choisir pour ce travail. Le modèle développé par Cox, a été anticipé à la fois par le travail expérimental de Hoffman [38] et le travail analytique de Dussan [24]. Ce modèle a été aussi confirmé dans différents travaux de simulations numériques [1], [68], [65],[72], [80]. Pour ces raisons, le modèle de Cox [19] est le modèle choisi dans le cadre de ce travail et fait l'objet de la section suivante.

1.2.2 Modèle de Cox

Cox [19] a développé un modèle macroscopique qui relie la vitesse du point triple à l'angle de contact dynamique θ_d . Le modèle de Cox considère deux phases non miscibles en contact avec une phase solide homogène le long de laquelle la ligne triple se déplacera à une vitesse V_{cox} .

Soit U la vitesse caractéristique de l'écoulement quand le fluide 1 (de viscosité η_1) est déplacé par le fluide 2 (de viscosité η_2). On se place dans le cas des écoulements pilotés par la tension de surface, si bien que, le nombre capillaire $Ca = \frac{\eta_1 U}{\gamma} \ll 1$. Dans [19], Cox a effectué une analyse asymptotique de l'hydrodynamique du modèle et il a trouvé la relation suivante :

$$Ca_{cl} = \frac{g(\theta_d, q) - g(\theta_E, q)}{Ln\left(\frac{L}{\lambda}\right)}, \quad (1.18)$$

où θ_E est l'angle de contact à l'équilibre, θ_d l'angle de contact dynamique, L une longueur macroscopique, λ la longueur de glissement, $q = \frac{\eta_2}{\eta_1}$ et la fonction $g(\theta, q)$ est définie par :

$$g(\theta, q) = \int_0^\theta \frac{d\theta}{f(\theta, q)}, \quad (1.19)$$

avec

$$f(\theta, q) = \frac{2 \sin \theta (q^2 (\theta^2 - \sin^2 \theta) + 2q (\theta (\pi - \theta) + \sin^2 \theta) + ((\pi - \theta)^2 - \sin^2 \theta))}{q (\theta^2 - \sin^2 \theta) ((\pi - \theta) + \cos \theta \sin \theta) + ((\pi - \theta)^2 - \sin^2 \theta) (\theta - \cos \theta \sin \theta)}.$$

La vitesse du point triple, V_{cox} est donnée par :

$$V_{cox} = \frac{\gamma Ca_{cl}}{\eta_2}. \quad (1.20)$$

Dans le cas particulier où le rapport de viscosités q est nul, par exemple, dans le cas des écoulements diphasiques air/fluide, $g(\theta)$ devient :

$$g(\theta) = \int_0^\theta \frac{x - \sin x \cos x}{2 \sin x} dx \quad (1.21)$$

De plus, si $\theta_d < \frac{3\pi}{4}$, $g(\theta) \approx \theta^3/9$ et l'équation (1.18) devient :

$$Ca_{cl} = \frac{\theta_d^3 - \theta_E^3}{9Ln\left(\frac{L}{\lambda}\right)} \quad (1.22)$$

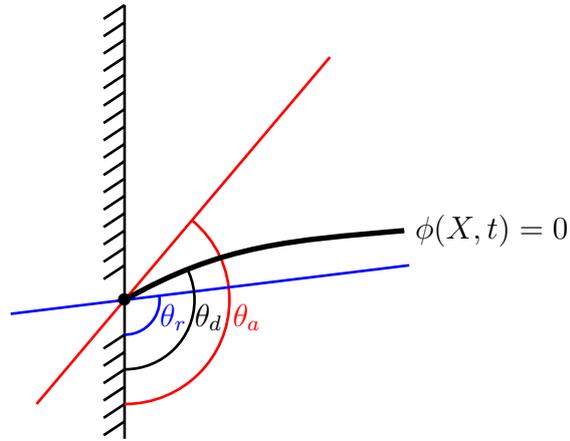
1.2.3 Interprétation du modèle de Cox

Au point triple, où l'interface fluide/fluide recoupe le solide, on pourrait utiliser une condition d'adhérence à la paroi. Dans ce cas là, le point triple resterait fixe et au cours de la simulation on verrait l'interface former une longue goutte qui reste attachée à la paroi. Dans ce travail, on veut simuler la dynamique de la ligne triple en relaxant la condition de non glissement au voisinage du point triple une fois que l'angle critique est atteint. Le modèle de Cox [19] est utilisé pour imposer cette condition à la paroi.

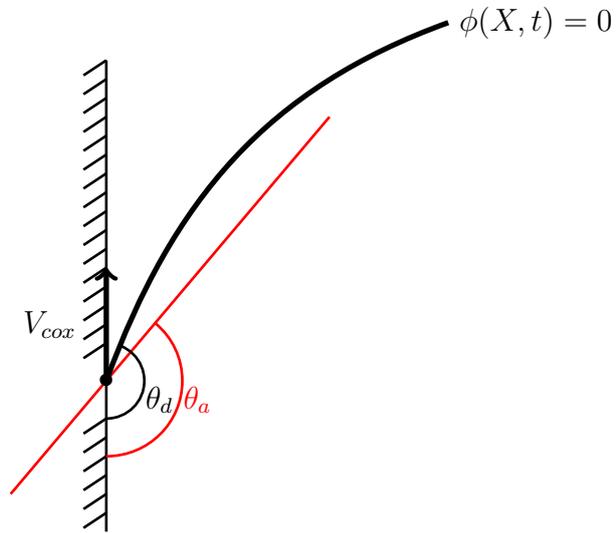
Notons par θ_d l'angle formé par l'interface fluide/fluide et la paroi solide, θ_a l'angle critique d'avancée et θ_r l'angle critique de reculée. Les angles θ_a et θ_r sont des paramètres dans nos simulations, ils dépendent des deux fluides et de la surface solide. Au cours de la simulation, l'interface se déforme et l'angle θ_d change. La dynamique du point triple est modélisée de la manière suivante :

- quand l'angle θ_d dépasse l'angle θ_a , le point triple se déplace à une vitesse V_{cox} dans la direction normale à l'interface, c'est à dire, vers le fluide 1,
- inversement, si θ_d devient inférieur à θ_r , le point triple se déplace à une vitesse V_{cox} dans la direction opposée à la normale de l'interface, c'est à dire, vers le fluide 2,
- et dans les autres cas, le point triple ne se déplace pas.

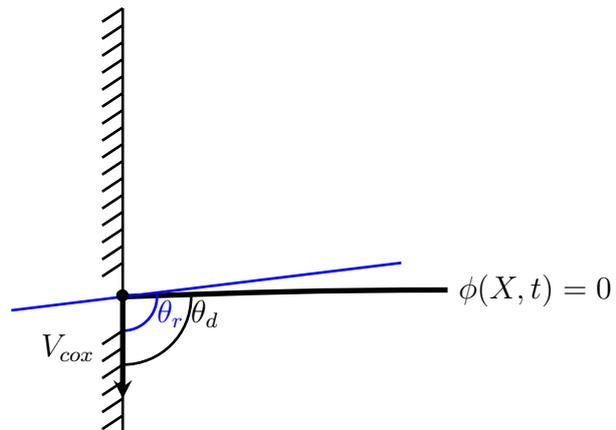
La FIGURE 1.13 montre un point triple dans les trois cas décrits précédemment. Notons que dans ce modèle, le point triple reste immobile quand $\theta_r < \theta_d < \theta_a$ et qu'il bouge quand $\theta_d < \theta_r$ ou $\theta_d > \theta_a$. Dans le cas où $\theta_r < \theta_d < \theta_a$, la condition au bord sera une condition d'adhérence aux parois. Si le point triple est autorisé à se déplacer ($\theta_d < \theta_r$ ou $\theta_d > \theta_a$), la condition de non glissement est changée par une condition de glissement imposée au voisinage du point triple et sa vitesse notée V_{cox} est calculée avec la loi de Cox (1.18). Dans la section 3.7 la façon dont cette vitesse de glissement est imposée sera détaillée.



(a) $\theta_r < \theta_d < \theta_a$. Le point triple ne se déplace pas.



(b) $\theta_d > \theta_a$. Le point triple se déplace vers le fluide 1.



(c) $\theta_d < \theta_r$. Le point triple se déplace vers le fluide 2.

FIGURE 1.13 – Modèle pour la ligne triple de contact.

1.3 Les polymères en solution

1.3.1 Quelques définitions

Un *polymère* est une macromolécule constituée de la répétition d'une unité chimique appelée monomère. Un polymère peut être naturel comme l'ADN ou synthétique comme le polystyrène. Les solutions de polymères exhibent fréquemment un comportement viscoélastique [5], c'est-à-dire, qu'elles ont un comportement intermédiaire entre celui d'un solide élastique et celui d'un fluide visqueux. Les fluides viscoélastiques font partie d'une classe plus importante de fluides appelés *fluides non newtoniens*. Probablement, la caractéristique la plus importante des polymères en solution est qu'ils possèdent une viscosité dépendante du taux de cisaillement. On se propose maintenant de donner quelques définitions pour mieux comprendre le comportement des polymères en solution.

Tout d'abord, on s'intéresse à la *viscosité* d'un fluide, qui peut être définie comme la résistance d'un fluide à l'écoulement : lorsque la viscosité augmente, la capacité du fluide à s'écouler diminue. La plupart des liquides montrent une forte variation de la viscosité avec la température [3]. Lorsque la température augmente, la viscosité a une tendance à diminuer. Contrairement aux gaz, dont la viscosité augmente lorsque la température augmente. Voici quelques ordres de grandeur : la viscosité dynamique de l'eau à 20°C est de $1 \times 10^{-3} Pa \cdot s$; l'air est à peu près 100 fois moins visqueux, sa viscosité est $1.8 \times 10^{-5} Pa \cdot s$ et la viscosité de l'huile à 20°C est environ $80 \times 10^{-3} Pa \cdot s$.

Un *fluide newtonien* à une température et pression constantes a sa contrainte de cisaillement \mathbf{T} qui dépend linéairement du taux de cisaillement \mathbf{D} (ou taux de déformation). La constante de proportionnalité est appelée viscosité dynamique, que l'on note η . En d'autres termes, pour un fluide newtonien, la viscosité du fluide est indépendante des forces extérieures qui agissent sur lui. L'eau et l'air sont des exemples de fluides newtoniens.

Dans la nature et dans les processus industriels, il existe un grand nombre de fluides qui exhibent un comportement où la relation entre \mathbf{T} et \mathbf{D} n'est pas linéaire et dépend parfois de l'histoire de l'écoulement. Ces fluides sont appelés *fluides non newtoniens*. Souvent, la présence d'objets de grande taille (macromolécules dans les solutions polymères, ou des particules dans les suspensions, ou encore des gouttelettes dans les émulsions [32]) par rapport à l'échelle atomique, confère au fluide cette propriété. Voici quelques exemples de fluides non newtoniens que l'on côtoie régulièrement :

- dans la nature : les boues, le sang,
- dans l'industrie alimentaire : le ketchup, la mayonnaise, le yaourt, le fromage et le miel,

- dans les procédés industriels : les polymères en solution, les solutions savonneuses, les émulsions.

1.3.2 Classification des fluides non newtoniens

Afin de caractériser un écoulement, il est important de comprendre la réponse d'un fluide vis à vis d'une contrainte imposée. C'est l'objet de la *rhéologie*. Chhabra [14] classe les fluides non newtoniens, selon leur réponse à une contrainte imposée, en trois grands groupes : *fluides indépendants du temps*, *fluides dépendants du temps* et *fluides viscoélastiques*. Voici, une description rapide de chacun de ces fluides.

1. **Les fluides indépendants du temps** sont les fluides non newtoniens pour lesquels le taux de déformation en un point donné est uniquement dépendant de la contrainte de cisaillement appliquée au point. Cette catégorie regroupe les fluides suivants (cf. FIGURE 1.14) :

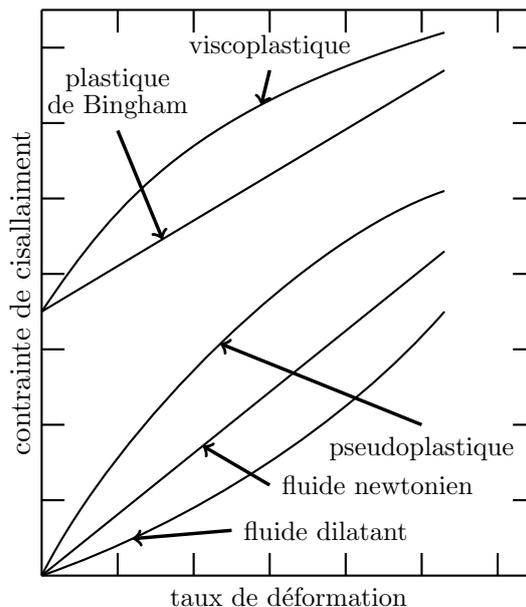


FIGURE 1.14 – Fluides non newtoniens indépendants du temps

- **Fluides pseudo-plastiques ou rhéofluidifiants** : (en anglais *shear thinning fluids*). Les fluides pseudo-plastiques sont caractérisés par une viscosité apparente qui diminue lorsque la contrainte de cisaillement augmente. Cela donne un système de plus en plus fluide, ce qui justifie le nom "rhéofluidifiant". La plupart des solutions polymériques, la moutarde, la colle, le savon et le sang exhibent ce comportement.

- **Fluides viscoplastiques** : Le comportement viscoplastique est caractérisé par l'existence d'une contrainte de cisaillement seuil τ_0 , au delà de laquelle le fluide commence à se déformer et à s'écouler. Une fois cette contrainte dépassée, le fluide peut se comporter comme un fluide newtonien (pour $\tau > \tau_0$, η est constante) ou comme un fluide rhéofluidifiant. En général, tous les fluides viscoplastiques exhibent un comportement rhéofluidifiant pour $\tau > \tau_0$, dans le cas où le comportement est newtonien, alors le fluide s'appelle **fluide plastique de Bingham**. Exemples : dentifrice, mayonnaise.
 - **Fluides dilatants ou rhéoépaississants** : (en anglais *shear thickening fluids*). Le comportement des fluides dilatants est caractérisé par une viscosité apparente qui augmente lorsque la contrainte de cisaillement augmente. On retrouve ce type de comportement dans les suspensions très concentrées, les empois et certains miels.
2. **Les fluides dépendants du temps** sont les fluides non newtoniens pour lesquels le taux de déformation n'est pas seulement dépendant de la magnitude de la contrainte appliquée, il est aussi dépendant de la durée de cette contrainte. On peut les classer en deux groupes (cf. FIGURE 1.15) :

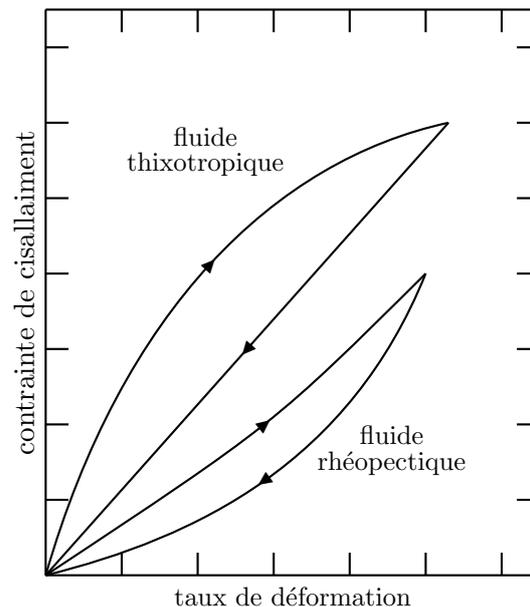


FIGURE 1.15 – Fluides non newtoniens dépendants du temps

- **Fluides thixotropiques** : Les fluides thixotropiques ont une viscosité apparente qui diminue quand le fluide est soumis à une contrainte de cisaillement constante. Il ne faut pas confondre la thixotropie avec la rhéofluidification, même si dans les deux cas il y a une diminution de la viscosité

apparente, dans la thixotropie, la contrainte de cisaillement se maintient *constante* et dans la rhéofluidification, la contrainte de cisaillement *augmente* au cours du temps.

- **Fluides rhéopectiques** : La rhéopexie est le phénomène inverse de la thixotropie : la viscosité du fluide augmente quand il est soumis à une contrainte de cisaillement constante (exemple : la crème fouettée ou les suspensions aqueuses de gypse).
- 3. **Fluides viscoélastiques** : La viscoélasticité correspond à un comportement intermédiaire entre celui d'un solide élastique (déformation proportionnelle à la contrainte et reliée à celle-ci par les coefficients d'élasticité) et celui d'un liquide (taux de déformation croissant avec la contrainte). Les solutions aqueuses de polymères, la pâte à pain, les fibres textiles artificielles sont des exemples de fluides viscoélastiques. Dans cette thèse, on s'intéresse à la modélisation de ce type de fluides. La section suivante donne plus de détails sur les fluides viscoélastiques.

1.3.3 Quelques phénomènes des fluides viscoélastiques

On s'appuie sur les ouvrages de référence [5], [43], [51], [32]. Comme on l'a dit dans la section précédente, les fluides viscoélastiques sont des fluides non newtoniens qui ont un comportement intermédiaire entre un fluide visqueux et un solide élastique. Les solutions polymériques exhibent un comportement viscoélastique. Voici quelques phénomènes typiques des fluides viscoélastiques :

- *L'effet Weissenberg* : une tige en rotation est placée dans un récipient contenant un fluide viscoélastique. Dans la FIGURE 1.16, on observe que le fluide commence à grimper le long de la tige en rotation. Si l'expérience est faite avec un fluide newtonien, on observe que le fluide a tendance à se creuser sous l'effet des forces centrifuges. Le comportement du fluide viscoélastique est lié à l'existence des différences de contraintes normales.
- *L'effet de siphon sans tube* (cf. FIGURE 1.17) : Le siphon, amorcé dans le fluide viscoélastique continue la vidange du récipient après suppression du contact avec la surface du liquide. On voit alors une colonne d'eau monter en l'air sans que rien ne la supporte. Cet effet est lié à l'existence d'une viscosité en élongation très importante.
- *L'effet mémoire* : un polymère fondu extrudé à travers une filière à partir d'un réservoir conserve une mémoire des déformations subies lors du passage de la contraction. En effet, le fluide garde une mémoire de son état initial (cf. FIGURE 1.18).

Pour plus de détails sur ces phénomènes et pour connaître d'autres comportements typiques des fluides viscoélastiques, voir [5] et [43]. Focalisons nous maintenant sur la modélisation des polymères en solution.

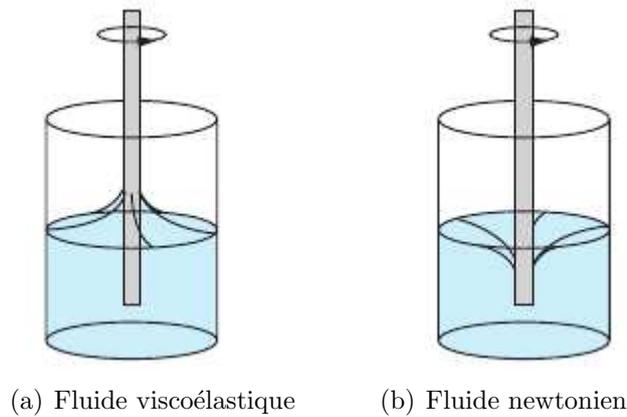


FIGURE 1.16 – Effet Weissenberg

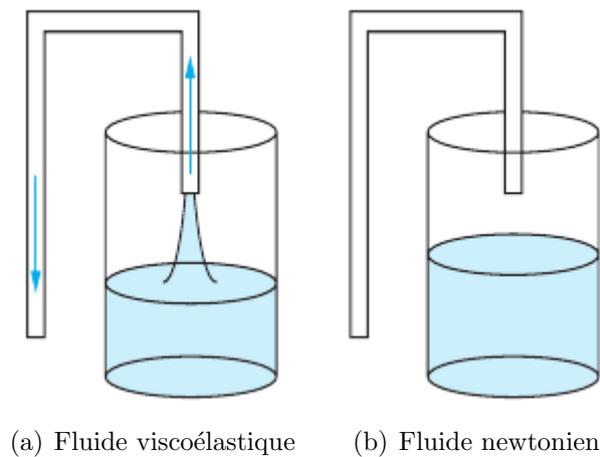
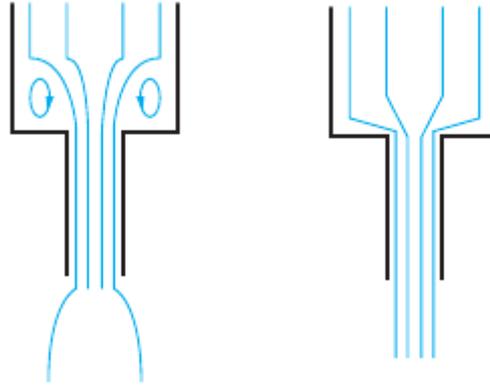


FIGURE 1.17 – Effet siphon sans tube

1.3.4 Modélisation du comportement viscoélastique

La modélisation du comportement viscoélastique d'un fluide nécessite de résoudre des équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et une équation constitutive qui décrit le comportement viscoélastique. Dans la littérature, on peut trouver deux approches pour décrire ce comportement viscoélastique : une approche microscopique et une approche macroscopique. L'approche microscopique considère les relations entre la structure à l'échelle de chaînes polymériques



(a) Fluide viscoélastique (b) Fluide newtonien

FIGURE 1.18 – Effet mémoire

et les grandeurs énergétiques (cf. [6], [43] et le travail de thèse de Lelièvre [45]). L'approche macroscopique est basée sur la mécanique des milieux continus. Dans le cadre de cette thèse, l'approche macroscopique est considérée.

1.3.4.1 Équations de base

On considère l'écoulement isotherme d'un fluide incompressible. Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement (la gravité et les forces volumiques extérieures sont négligées), s'écrivent respectivement :

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \quad (1.23)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} \right) - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}, \quad (1.24)$$

où \mathbf{U} correspond au champ de vitesse de l'écoulement, ρ est la densité du fluide et $\boldsymbol{\sigma}$ le *tenseur de contraintes total de Cauchy* défini par :

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \mathbf{T}. \quad (1.25)$$

p est le champ de pression, \mathbf{I} le tenseur unité et \mathbf{T} est le *tenseur d'extra contraintes* où *contrainte de cisaillement*. Pour fermer le système, il reste à établir une relation entre le tenseur d'extra contraintes \mathbf{T} et le taux de déformation, cette relation est appelée *équation constitutive*.

En tenant compte des équations (1.3) et (1.25), on obtient l'expression suivante pour $\boldsymbol{\sigma}$ dans le cas d'un fluide newtonien :

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \eta (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^t). \quad (1.26)$$

En remplaçant (1.26) dans (1.24), on obtient les équations dites de Navier-Stokes pour un écoulement incompressible et isotherme d'un fluide newtonien :

$$\begin{cases} \rho \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} \right) + \nabla p - \eta \Delta \mathbf{U} = \mathbf{0}, \\ \nabla \cdot \mathbf{U} = 0. \end{cases} \quad (1.27)$$

Le système d'équations (1.27) permet de modéliser l'écoulement d'un grand nombre de fluides, comme par exemple l'eau ou les huiles à faibles viscosités. Ces fluides ont la caractéristique que leur viscosité, ne dépend que de la température, de la pression ou de la composition chimique du fluide, et non des forces agissant sur eux.

Dans le cas d'un fluide viscoélastique, on décompose le tenseur d'extra contraintes \mathbf{T} en deux parties : une contribution newtonienne du solvant \mathbf{T}_s et une contribution du polymère, \mathbf{T}_p . On obtient :

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_s + \mathbf{T}_p. \quad (1.28)$$

La contribution newtonienne se calcule par (1.3). Alors, le tenseur d'extra contraintes \mathbf{T} s'écrit :

$$\mathbf{T} = 2\eta \mathbf{D}(\mathbf{U}) + \mathbf{T}_p, \quad (1.29)$$

où η est la viscosité du solvant. Finalement, le tenseur de contraintes total, défini dans l'équation (1.25), s'écrit de la manière suivante :

$$\boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + \eta (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^t) + \mathbf{T}_p. \quad (1.30)$$

On injecte (1.30) dans l'équation de conservation du mouvement (1.24), ce qui nous amène au système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \rho \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} \right) + \nabla p - \eta \Delta \mathbf{U} - \nabla \cdot \mathbf{T}_p = \mathbf{0}, \\ \nabla \cdot \mathbf{U} = 0. \end{cases} \quad (1.31)$$

Il reste encore à définir une équation pour \mathbf{T}_p . Des nombreux modèles "appropriés" pour \mathbf{T}_p sont proposés dans la littérature (voir [5], [6], [43]). Pour bien choisir le modèle à utiliser, il faut tenir compte de différents facteurs, tels que le type d'écoulement, le polymère considéré ou la concentration du polymère dans la solution [43]. Dans ce travail le modèle Oldroyd-B est utilisé pour la modélisation du polymère en solution. Le modèle Oldroyd-B est un modèle de viscoélasticité linéaire qui s'adapte bien à la modélisation de solutions de polymères dilués [43].

1.3.4.2 Modèle Oldroyd-B

Le modèle Oldroyd-B est un modèle de viscosité non linéaire basé sur le modèle de Maxwell. Dans le modèle de Maxwell, on représente le fluide par un ressort de module élastique G et un amortisseur de viscosité η , montés en série, (cf. FIGURE 1.19).

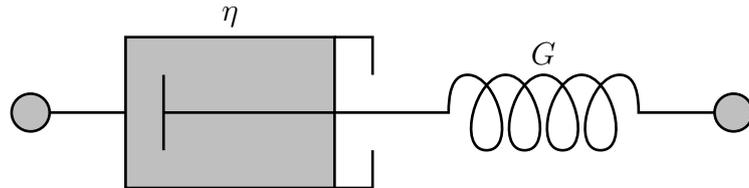


FIGURE 1.19 – Schéma unidimensionnel du modèle de Maxwell.

L'amortisseur représente le comportement visqueux et le ressort le caractère élastique du fluide. Dans cette configuration, lorsque une contrainte axiale est appliquée, la *déformation totale du système* γ est la somme de chacun des éléments :

$$\gamma = \gamma_R + \gamma_A, \quad (1.32)$$

tandis que la contrainte τ est la même pour tous :

$$\tau = \tau_R = \tau_A. \quad (1.33)$$

Dans le cas du ressort, la contrainte est proportionnelle à la déformation et la constante de proportionnalité est le *module de Young* G , ce qui se traduit par la loi de Hooke :

$$\tau_R = G\gamma_R. \quad (1.34)$$

La contrainte dans l'amortisseur est proportionnelle à la vitesse de déformation et la constante de proportionnalité est la viscosité η . Cela se traduit par la loi linéaire de Newton :

$$\tau_A = \eta\dot{\gamma}_A, \quad (1.35)$$

avec

$$\dot{\gamma} = \frac{d\gamma}{dt}.$$

Alors, la vitesse de déformation totale est donnée par l'équation différentielle ordinaire suivante :

$$\frac{d\gamma}{dt} = \frac{d\gamma_R}{dt} + \frac{d\gamma_A}{dt} = \frac{1}{G} \frac{d\tau}{dt} + \frac{\tau}{\eta}. \quad (1.36)$$

Qu'on peut réécrire sous la forme :

$$\lambda \frac{d\tau}{dt} + \tau = \eta\dot{\gamma}, \quad (1.37)$$

avec $\lambda = \frac{\eta}{G}$ le *temps caractéristique*.

Pour passer à un modèle de Maxwell tensoriel, il faut remplacer la dérivée temporelle dans l'équation constitutive (1.37) par une dérivée convective dans un tenseur. Il existe différents types de dérivées convectives [5], le modèle Oldroyd-B utilise la dérivée sur-convectée (en anglais upper-convected derivative). La dérivée sur-convectée d'un tenseur \mathbf{A} , notée $\overset{\nabla}{\mathbf{A}}$ est définie de la manière suivante :

$$\overset{\nabla}{\mathbf{A}} = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \mathbf{A} - (\nabla \mathbf{U}) \mathbf{A} - \mathbf{A} (\nabla \mathbf{U})^t. \quad (1.38)$$

Alors, (1.37) devient le *modèle de Maxwell* convecté (appelé aussi UCM pour Upper-Convected-Maxwell) :

$$\lambda \overset{\nabla}{\mathbf{T}}_p + \mathbf{T}_p = 2\eta_p \mathbf{D}, \quad (1.39)$$

avec η_p la contribution du polymère à la viscosité de la solution. Au final le modèle complet d'Oldroyd-B s'écrit de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \\ \rho \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} \right) + \nabla p - \eta \Delta \mathbf{U} - \nabla \cdot \mathbf{T}_p = \mathbf{0}, \\ \mathbf{T}_p + \lambda \left(\frac{\partial \mathbf{T}_p}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{T}_p - (\nabla \mathbf{U}) \mathbf{T}_p - \mathbf{T}_p (\nabla \mathbf{U})^t \right) = \eta_p (\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^t). \end{array} \right. \quad (1.40)$$

On introduit le tenseur de conformation $\boldsymbol{\tau}$ qui est relié au tenseur d'extra contraintes de la manière suivante :

$$\mathbf{T}_p = \frac{\eta_p}{\lambda} (\boldsymbol{\tau} - \mathbf{I}), \quad (1.41)$$

$\boldsymbol{\tau}$ est symétrique, défini positif. En remplaçant (1.41) dans (1.40), on obtient le modèle Oldroyd-B en fonction du tenseur de conformation

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \\ \rho \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{U} \right) + \nabla p - \eta \Delta \mathbf{U} - \frac{\eta_p}{\lambda} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \mathbf{0}, \\ \frac{\boldsymbol{\tau} - \mathbf{I}}{\lambda} + \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \boldsymbol{\tau} - (\nabla \mathbf{U}) \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} (\nabla \mathbf{U})^t = \mathbf{0}. \end{array} \right. \quad (1.42)$$

1.4 Modèle physique

Il convient ici d'écrire le modèle physique final qui modélise la récupération assistée du pétrole à l'échelle du pore. Pour ce faire, l'écoulement diphasique entre un fluide viscoélastique et un fluide newtonien à l'échelle du pore sera modélisé : un fluide newtonien en place dans un milieu poreux sera déplacé par un fluide viscoélastique. Le milieu poreux est représenté par un réseau de microcanaux interconnectés. En microfluidique, le nombre de Reynolds est généralement très inférieur à 1, alors le modèle de Stokes est utilisé pour décrire l'écoulement d'un fluide à cette échelle.

On considère un écoulement incompressible et isotherme de deux fluides immiscibles. Un des fluides est newtonien et l'autre est viscoélastique, ils seront notés respectivement fluide 1 et fluide 2. On note Ω le domaine, Ω_1 le sous-domaine occupé par le fluide 1 et Ω_2 le sous-domaine occupé par le fluide 2 tels que $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Sigma$, où l'interface entre les deux fluides est notée Σ (cf. Figure 1.20).

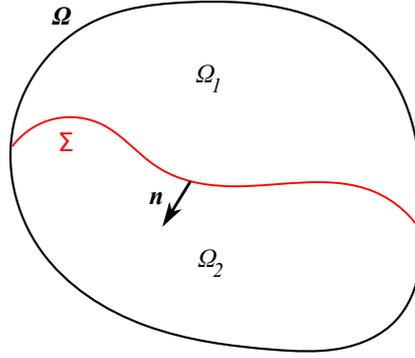


FIGURE 1.20 – Domaine $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Sigma$

Le fluide 1 est un fluide newtonien, l'écoulement de ce fluide est gouverné par l'équation de Stokes incompressible :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{U}_1 = 0, \\ -\nabla p_1 + \nabla \cdot (2\eta_1 \mathbf{D}_1) = \mathbf{0}. \end{cases} \quad (1.43)$$

Le modèle Oldroyd-B modélise le caractère viscoélastique du fluide 2. En tenant compte des hypothèses évoquées précédemment, la dynamique du fluide 2 est gouvernée par :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{U}_2 = 0, \\ -\nabla p_2 + \nabla \cdot (2\eta_2 \mathbf{D}_2) + \frac{\eta_{p2}}{\lambda_2} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_2 = \mathbf{0}, \\ \frac{\boldsymbol{\tau}_2 - \mathbf{I}}{\lambda_2} + \frac{\partial \boldsymbol{\tau}_2}{\partial t} + (\mathbf{U}_2 \cdot \nabla) \boldsymbol{\tau}_2 - (\nabla \mathbf{U}_2) \boldsymbol{\tau}_2 - \boldsymbol{\tau}_2 (\nabla \mathbf{U}_2)^t = \mathbf{0}. \end{cases} \quad (1.44)$$

Dans les équations ci-dessus, \mathbf{D}_i est le tenseur de déformations dans le fluide i , \mathbf{U}_i est la vitesse du fluide i , p_i est la pression du fluide i , η_1 est la viscosité dynamique du fluide 1, η_2 est la viscosité dynamique du solvant du fluide 2, $\boldsymbol{\tau}_2$ est le tenseur de conformation du fluide 2, λ_2 est le temps de relaxation du fluide 2 et η_{p2} est la contribution du polymère à la viscosité de la solution.

Afin de compléter la modélisation de l'écoulement diphasique, il faut ajouter les conditions de saut à l'interface données dans la section 1.1.5.2 :

$$((\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} = \gamma \kappa, \quad (1.45)$$

$$((\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{t} = \mathbf{0}, \quad (1.46)$$

$$\mathbf{U}_1 = \mathbf{U}_2, \quad (1.47)$$

avec γ le coefficient de tension de surface, \mathbf{n} et \mathbf{t} les vecteurs normal et tangent à l'interface respectivement, $\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}$ la courbure de l'interface et

$$\boldsymbol{\sigma} = -p_1 \mathbf{I} + 2\eta_1 \mathbf{D}_1, \quad (1.48)$$

$$\boldsymbol{\delta} = -p_2 \mathbf{I} + 2\eta_2 \mathbf{D}_2 + \frac{\eta_{p2}}{\lambda_2} (\boldsymbol{\tau}_2 - \mathbf{I}). \quad (1.49)$$

Pour la modélisation de la dynamique de la ligne triple, le modèle de Cox est utilisé de la manière expliquée dans la section 1.2.3.

Au cours des analyses mathématiques et numériques qui vont suivre, nous allons adopter le modèle dit à un fluide, présenté dans le chapitre suivant.

Chapitre 2

Modèle mathématique

Nous présentons maintenant la construction du modèle mathématique qui nous permettra de faire la simulation d'un écoulement diphasique entre un fluide newtonien et un fluide viscoélastique dans un réseau de microcanaux. Partant du modèle physique présenté dans le chapitre 1, nous commençons par la construction du modèle dit à un fluide. Pour simuler l'écoulement dans un réseau de microcanaux sans avoir besoin de créer un maillage adapté à la géométrie, la méthode de pénalisation est utilisée. Ensuite nous nous intéressons à la présentation de la méthode Level-Set, qui nous servira à localiser l'interface et à calculer la normale et la courbure à l'interface.

2.1 Le modèle de Stokes monofluide

Afin de résoudre les deux systèmes d'équations (1.43) et (1.44), couplés aux conditions à l'interface (1.45), (1.46) et (1.47), le problème est reformulé en un seul système d'équations qui modélise l'ensemble de deux fluides. Une telle formulation, appelée *modèle mono-fluide*, est présentée dans [12] et [66].

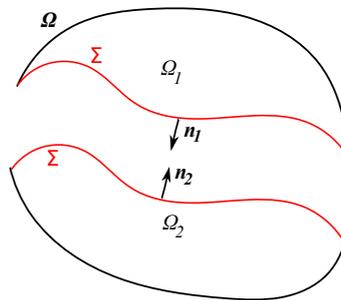


FIGURE 2.1 – Domaine bifluide $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Sigma$.

Détaillons maintenant l'obtention de cette formulation. D'abord, on réécrit les équations de quantité de mouvement en termes des tenseurs de contraintes total

définis dans (1.48) et (1.49) :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \quad \text{dans } \Omega_1, \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\delta} = \mathbf{0} \quad \text{dans } \Omega_2. \quad (2.2)$$

Soit $\psi \in \mathcal{D}(\Omega)$ tel que $\psi = 0$ sur $\partial\Omega$. En multipliant (2.1) et (2.2) par ψ et en intégrant sur Ω_1 et sur Ω_2 respectivement, on obtient :

$$\int_{\Omega_1} \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \psi d\mathbf{x} = \int_{\Sigma} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_1 \psi ds - \int_{\Omega_1} \boldsymbol{\sigma} \nabla \psi d\mathbf{x} = 0, \quad (2.3)$$

$$\int_{\Omega_2} \nabla \cdot \boldsymbol{\delta} \psi d\mathbf{x} = \int_{\Sigma} \boldsymbol{\delta} \cdot \mathbf{n}_2 \psi ds - \int_{\Omega_2} \boldsymbol{\delta} \nabla \psi d\mathbf{x} = 0. \quad (2.4)$$

En faisant la somme de (2.3) et (2.4) et comme $\mathbf{n} = \mathbf{n}_1 = -\mathbf{n}_2$ (cf. FIGURE 2.1), il vient :

$$\int_{\Sigma} (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{n} \psi ds - \int_{\Omega_1} \boldsymbol{\sigma} \nabla \psi d\mathbf{x} - \int_{\Omega_2} \boldsymbol{\delta} \nabla \psi d\mathbf{x} = 0. \quad (2.5)$$

Maintenant, on introduit la notation suivante :

$$\mathbf{S} = \begin{cases} \boldsymbol{\sigma} & \text{dans } \Omega_1, \\ \boldsymbol{\delta} & \text{dans } \Omega_2. \end{cases}$$

En utilisant cette notation dans (2.5), on obtient :

$$\int_{\Omega} \mathbf{S} \nabla \psi d\mathbf{x} - \int_{\Sigma} (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\delta}) \cdot \mathbf{n} \psi ds = 0. \quad (2.6)$$

Les conditions de saut (1.45) et (1.46), permettent de réécrire (2.6) sous la forme :

$$\int_{\Omega} \psi \nabla \cdot \mathbf{S} d\Omega - \int_{\Sigma} \gamma \kappa \mathbf{n} \psi dS = 0. \quad (2.7)$$

On peut remplacer l'intégrale surfacique de (2.7) par une intégrale volumique :

$$\int_{\Sigma} \gamma \kappa \mathbf{n} \psi dS = \int_{\Omega} \gamma \kappa \mathbf{n} \delta_{\Sigma} \psi d\Omega, \quad (2.8)$$

avec δ_{Σ} la fonction de Dirac

$$\delta_{\Sigma}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \in \Sigma, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Il vient alors :

$$\int_{\Omega} \psi \nabla \cdot \mathbf{S} d\mathbf{x} - \int_{\Omega} \gamma \kappa \mathbf{n} \delta_{\Sigma} \psi d\mathbf{x} = 0. \quad (2.9)$$

On procède de la même manière pour l'équation de conservation de la masse. On multiplie par ψ les équations de conservation de la masse pour chaque fluide et on intègre sur Ω_1 et Ω_2 . Il vient,

$$\int_{\Omega_1} \nabla \cdot \mathbf{U}_1 \psi d\mathbf{x} = - \int_{\Omega_1} \mathbf{U}_1 \cdot \nabla \psi d\mathbf{x} + \int_{\Sigma} \mathbf{U}_1 \cdot \mathbf{n}_1 \psi ds = 0 \quad (2.10)$$

$$\int_{\Omega_2} \nabla \cdot \mathbf{U}_2 \psi d\mathbf{x} = - \int_{\Omega_2} \mathbf{U}_2 \cdot \nabla \psi d\mathbf{x} + \int_{\Sigma} \mathbf{U}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \psi ds = 0 \quad (2.11)$$

On fait la somme de (2.10) et (2.11) et on utilise la condition de continuité de la vitesse à l'interface (1.47), alors on obtient :

$$\int_{\Omega_1} \mathbf{U}_1 \cdot \nabla \psi d\mathbf{x} + \int_{\Omega_2} \mathbf{U}_2 \cdot \nabla \psi d\mathbf{x} = 0 \quad (2.12)$$

On introduit la notation suivante :

$$\mathbf{U} = \begin{cases} \mathbf{U}_1 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_1, \\ \mathbf{U}_2 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_2. \end{cases}$$

On utilise cette notation dans (2.12) et on obtient :

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{U} \psi d\mathbf{x} = 0 \quad (2.13)$$

Les équations (2.9) et (2.13) constituent la formulation à un fluide au sens de distributions :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{S} - \gamma \kappa \mathbf{n} \delta_{\Sigma} = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \end{cases} \quad (2.14)$$

Pour récapituler, le système d'équations monofluide qui modélise un écoulement diphasique incompressible, entre un fluide newtonien et un autre viscoélastique, s'écrit de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad \text{dans } (0, T) \times \Omega \\ -\nabla p + \nabla \cdot (2\eta \mathbf{D}) + \nabla \cdot \left(\frac{\eta_p}{\lambda} \boldsymbol{\tau} \right) - \gamma \kappa \mathbf{n} \delta_\Sigma = \mathbf{0} \quad \text{dans } (0, T) \times \Omega \\ \frac{\boldsymbol{\tau} - \mathbf{I}}{\lambda} + \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \boldsymbol{\tau} - (\nabla \mathbf{U}) \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} (\nabla \mathbf{U})^t = \mathbf{0} \quad \text{dans } (0, T) \times \Omega \end{array} \right. \quad (2.15)$$

où η , η_p et λ sont donnés respectivement par :

$$\eta = \begin{cases} \eta_1 & \text{dans } \Omega_1, \\ \eta_2 & \text{dans } \Omega_2. \end{cases} \quad (2.16)$$

$$\eta_p = \begin{cases} 0 & \text{dans } \Omega_1, \\ \eta_{p2} & \text{dans } \Omega_2. \end{cases} \quad (2.17)$$

$$\lambda = \begin{cases} 0 & \text{dans } \Omega_1, \\ \lambda_2 & \text{dans } \Omega_2. \end{cases} \quad (2.18)$$

2.2 La Méthode Level Set

2.2.1 Méthodes de capture d'interface : état de l'art

De nombreuses techniques numériques ont été développées pour localiser précisément l'interface entre deux fluides. Des revues de ces méthodes peuvent être trouvées dans [76], [58], [60] et les travaux de thèse [18], [48], [74] et [77]. Ces techniques peuvent être classées en deux grandes catégories : Les *méthodes de suivi du front* (en anglais *front tracking*) et les *méthodes de capture du front* (en anglais *front capturing*). Nous nous proposons maintenant de donner un peu plus de détails sur ces méthodes.

Méthodes de suivi du front

Les méthodes du *front-tracking* réalisent un *suivi explicite* de l'interface, en utilisant des marqueurs ou particules sans masse. Les marqueurs sont transportés par la vitesse de l'écoulement suivant l'équation différentielle :

$$\frac{dX^l}{dt} = \mathbf{U}(X^l), \quad \text{pour } X^l \in \text{interface.} \quad (2.19)$$

où $\mathbf{U}(X^l)$ est la vitesse de la particule, interpolée à partir du maillage fixe dans la position de la particule. Cet ensemble de points forme un maillage non structuré qui se déplace à travers une grille eulérienne où la vitesse et la pression du fluide sont calculées.

Les marqueurs peuvent être distribués dans tout le volume de l'une des phases comme sur la FIGURE 2.2(a), on parle alors de *marqueurs de volume* (volume tracking). Cette méthode a été introduite par Harlow et Welch [34]. L'interface peut être repérée en déduisant qu'une cellule contenant de marqueurs ayant une cellule voisine n'en contenant aucun, est forcément traversée par l'interface. Le principal problème de cette méthode est que la localisation de l'interface n'est pas très précise car elle est conditionnée par la présence des marqueurs dans les zones proches de l'interface. Puisque la localisation de l'interface est imprécise les propriétés géométriques (normale, courbure) sont difficiles à obtenir. Un autre inconvénient est qu'au cours de la simulation, la répartition de marqueurs devient non uniforme, alors il faut mettre en œuvre des algorithmes pour redistribuer les marqueurs de façon uniforme.

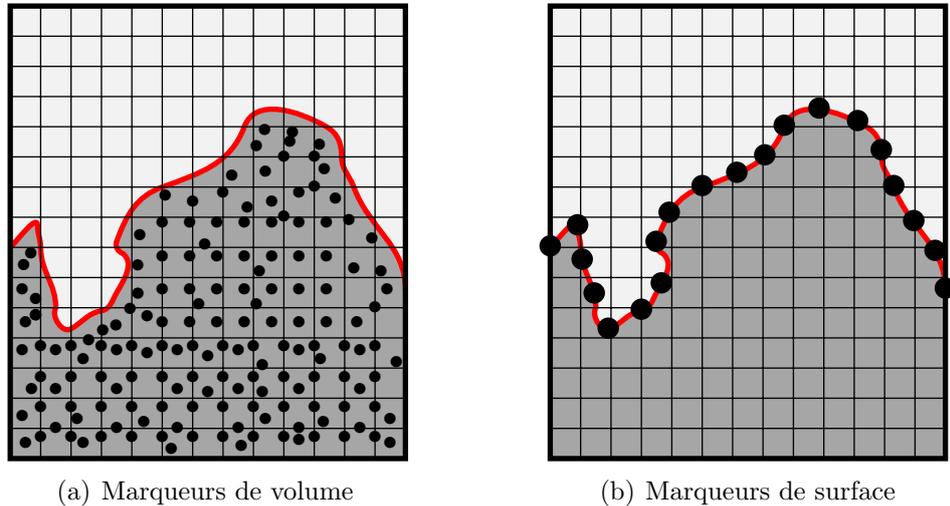


FIGURE 2.2 – Schématisation des méthodes de suivi du front (front-tracking)

Une amélioration des marqueurs en volume appelée méthode de *marqueurs de surface* (surface tracking) a été proposée par Daly [20]. Avec cette technique, les marqueurs sont distribués seulement sur l'interface et ils sont connectés entre eux par des interpolations qui représentent l'interface (cf. FIGURE 2.2(b)). L'avantage de cette méthode est la connaissance de la position de l'interface de manière précise ce qui permet aussi de bien représenter les propriétés géométriques. Cependant, cette méthode présente plusieurs inconvénients. Par exemple, la gestion des changements topologiques devient un peu fastidieuse car il faut continuellement renuméroter et repositionner les marqueurs. Avec cette méthode, le traitement de phénomènes de rupture et coalescence d'interfaces devient un peu difficile, il faut mettre en place des algorithmes complexes et parfois coûteux en temps de calcul. La méthode de marqueurs de surface a été notamment utilisée par Glimm [31] et Trygvason & Unverdi [52], [75], [76].

Il existe aussi des méthodes de front tracking sur *maillage mobile*. Ces méthodes consistent à mailler le domaine de calcul de telle sorte que l'interface constitue les frontières des mailles. Alors, les points du maillage correspondant sont ensuite suivis dans un cadre de référence lagrangien. L'avantage de ces méthodes est qu'elles peuvent intégrer très précisément les conditions de saut à l'interface. Cependant, elles peuvent être très coûteuses en temps de simulation, car elles demandent de remailler à chaque pas de temps. Leur utilisation reste limitée aux écoulements où l'interface ne subit pas de grandes déformations. Les méthodes de maillage mobile sont souvent utilisées pour la simulation des bulles supposées sphériques [44], [33]. Dans la FIGURE 2.3, on montre le maillage utilisé dans [33] pour la simulation de la coalescence de deux gouttes.

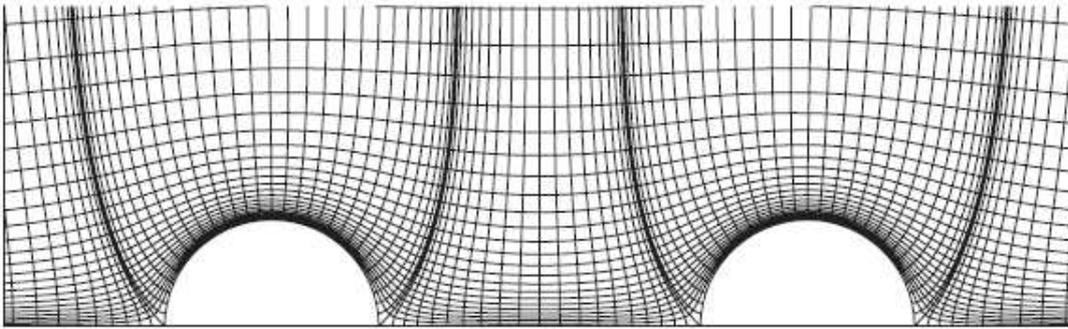


FIGURE 2.3 – Maillage mobile utilisé dans [33] pour la simulation de la coalescence de deux gouttes sphériques.

Méthodes de capture du front

Les méthodes de *front-capturing* capturent l'interface de *manière implicite* en utilisant une fonction scalaire définie sur tout le domaine de calcul. Une équation de transport est utilisée pour transporter cette fonction et implicitement faire évoluer l'interface. Il existe deux approches pour la méthode de capture du front : la méthode *VOF* (*Volume Of Fluid*) et la méthode de lignes de niveau *Level-Set*.

Les méthodes *Volume of Fluid* ont été introduites en 1981 par Hirt et Nichols [36] pour capturer le front de l'interface sur une grille eulérienne. Actuellement, elles sont très largement utilisées et de nombreuses améliorations ont été proposées (cf. [53] et [60] pour un revue). Le principe de la méthode est d'utiliser une fonction fractionnelle C , appelée *fonction couleur*, qui varie entre 0 et 1 et qui est transportée par la vitesse de l'écoulement suivant l'équation :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla C = 0. \quad (2.20)$$

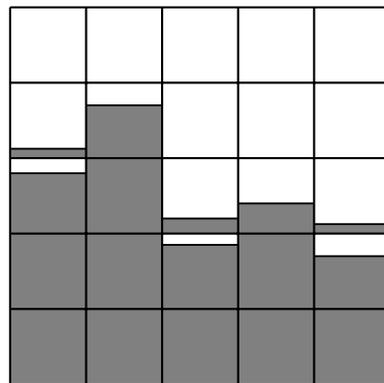
De manière discrète, la fonction C représente la fraction volumique d'une des phases contenue à l'intérieur d'une maille, d'où le nom "Volume Of Fluid". Par

exemple, si C représente la fraction du volume occupé par le fluide 1 et qu'elle vaut 1 dans une cellule, alors la cellule est remplie du fluide 1 ; si C vaut 0, la cellule est remplie du fluide 2. Les cellules où C vaut entre 0 et 1 déterminent la position de l'interface comme l'illustre la FIGURE 2.4(a). La reconstruction de l'interface est faite à partir de ces cellules où C prend des valeurs entre 0 et 1. Cette étape de reconstruction de l'interface a fait l'objet de nombreux travaux (cf. [60] pour une revue très complète de ces méthodes), parmi eux, les plus connus sont :

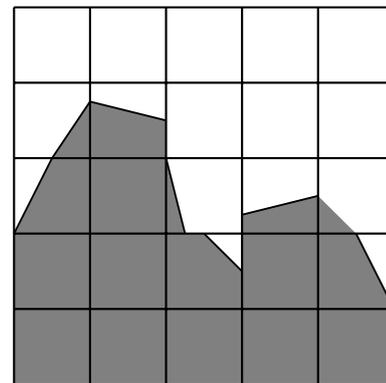
- la méthode VOF-SLIC (Simple Line Interface Calculation) : représente l'interface avec de segments parallèles au maillage (cf. FIGURE 2.4(b)),
- la méthode VOF-PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation) : l'interface est reconstruite par des segments obtenus grâce au calcul de la normale (cf. FIGURE 2.4(c)).

0	0	0	0	0
0.1	0.7	0	0	0
0.8	1	0.2	0.4	0.1
1	1	0.9	1	0.7
1	1	1	1	1

(a) Fraction volumique



(b) Méthode VOF-SLIC



(c) Méthode VOF-PLIC

FIGURE 2.4 – Principe de la méthode VOF. (a) Fraction volumique ou fonction couleur (b) Reconstruction de l'interface méthode VOF-SLIC (c) Reconstruction de l'interface méthode VOF-PLIC

Les méthodes VOF gèrent bien les changements topologiques et les ruptures de

l'interface. En plus, elles assurent la conservation de la masse. Néanmoins, le principal inconvénient de ces méthodes réside dans la reconstruction de l'interface qui peut amener à des imprécisions dans le calcul des grandeurs géométriques (normale et courbure).

Et finalement, l'autre méthode de capture du front, la méthode de *lignes de niveau* ou *Level-Set*, introduite par Osher et Sethian en 1988. Dès lors, la méthode a été très utilisée pour différents applications : croissance des cristaux, combustion, imagerie médicale, mécanique de fluides, etc. Une revue de la théorie, l'approximation numérique et les applications de la méthode Level-Set peuvent être trouvés dans [64]. Le principe de base de cette méthode est de définir l'interface comme l'iso-contour zéro d'une fonction distance signée ϕ . Le signe dépend de la phase où l'on se trouve. La fonction est mise en mouvement en résolvant l'équation hyperbolique de transport :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi = 0, \quad (2.21)$$

où \mathbf{U} est la vitesse de l'écoulement. L'équation (2.21) est une équation classique de transport d'un champ scalaire continu, ce qui facilite la discrétisation par rapport à l'équation 2.20 de la méthode VOF. Grâce à la définition de distance signée la méthode Level-Set présente de nombreux avantages :

- la fonction Level Set gère bien les changements topologiques (fusion ou séparation de l'interface),
- les calculs de la normale et de la courbure sont directs avec les équations (2.31) et (2.32) ci-dessous,
- la localisation de l'interface Σ ne nécessite pas une étape de reconstruction géométrique,
- le fait de signer la fonction permet d'éliminer la discontinuité à l'interface, ce qui facilite la discrétisation de l'équation de transport,
- le passage d'un problème bidimensionnel à un problème tridimensionnel est immédiat.

Cependant, le défaut majeur de la méthode Level-Set est qu'elle ne conserve pas bien la masse ; des schémas très élevés ont permis de remédier à ce défaut. Un autre problème est la perte de propriété distance signée au cours d'une simulation, cependant il est possible de corriger cette propriété en utilisant des algorithmes de redistanciation.

2.2.2 La fonction Level-Set

On considère un domaine $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \Sigma$ occupé par deux fluides immiscibles. Soit Ω_1 le sous-domaine occupé par le fluide 1 et Ω_2 le sous-domaine occupé par le

fluide 2. $\Sigma = \partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2$, désigne l'interface entre les deux fluides. Ici, $\partial\Omega_i$ est le bord du sous-domaine Ω_i où $i = \{1, 2\}$.

Dans la méthode Level Set, l'interface Σ est représentée par l'isocontour zéro d'une fonction distance signée que l'on note ϕ et qui est appelée *Fonction Level Set* (cf FIGURE 2.5). Alors, à un instant t ,

$$\Sigma(t) = \{\mathbf{x} = (x, y) \mid \phi(\mathbf{x}, t) = 0\}, \quad (2.22)$$

où

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} -d(\mathbf{x}) & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_1, \\ +d(\mathbf{x}) & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_2, \end{cases} \quad (2.23)$$

et $d(\mathbf{x})$ est la distance euclidienne du point $\mathbf{x} = (x, y)$ à l'interface Σ , telle que pour tout $\mathbf{x}_\Sigma \in \Sigma$, on a

$$d(\mathbf{x}) = \begin{cases} -\min |\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Sigma| & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_1, \\ +\min |\mathbf{x} - \mathbf{x}_\Sigma| & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_2. \end{cases} \quad (2.24)$$

À partir de (2.23), on remarque que la fonction Level Set ϕ est une variété d'isocountours où l'interface Σ est définie de façon implicite et chaque point du maillage connaît à chaque instant sa distance à l'interface et la phase à laquelle il appartient grâce au signe de ϕ . En d'autres termes, il vient

$$\begin{cases} \phi(\mathbf{x}, t) < 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_1, \\ \phi(\mathbf{x}, t) > 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega_2, \\ \phi(\mathbf{x}, t) = 0 & \text{si } \mathbf{x} \in \Sigma. \end{cases} \quad (2.25)$$

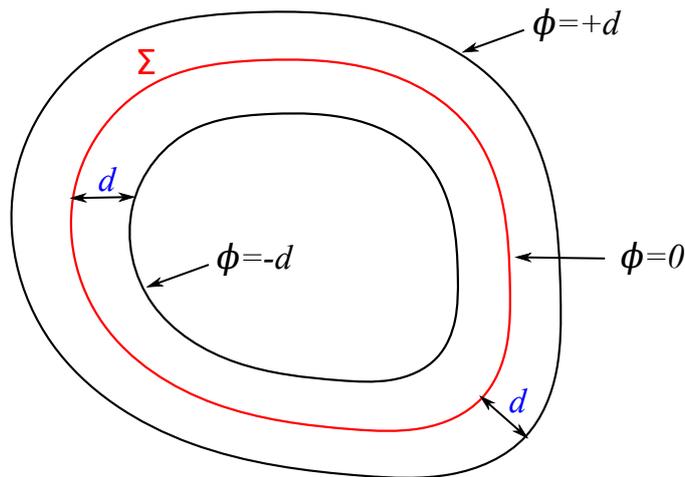


FIGURE 2.5 – Fonction Level-Set

Les champs discontinus $\eta(\phi)$, $\eta_p(\phi)$ et $\lambda(\phi)$ sont définis par,

$$\eta(\phi) = \eta_1 + (\eta_2 - \eta_1)H(\phi), \quad (2.26)$$

$$\eta_p(\phi) = \eta_{p1} + (\eta_{p2} - \eta_{p1})H(\phi), \quad (2.27)$$

$$\lambda(\phi) = \lambda_1 + (\lambda_2 - \lambda_1)H(\phi), \quad (2.28)$$

où $H(\phi)$ est la fonction de Heaviside définie par :

$$H(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{si } \phi \leq 0, \\ 1 & \text{si } \phi > 0. \end{cases} \quad (2.29)$$

2.2.3 Calcul de la normale et la courbure

La représentation implicite de l'interface permet de calculer de manière directe la normale et la courbure. Le gradient de la fonction Level-Set ϕ étant défini par

$$\nabla\phi = \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}, \frac{\partial\phi}{\partial y} \right), \quad (2.30)$$

est perpendiculaire aux isocontours de ϕ . En conséquence, si \mathbf{x}_0 est un point sur l'iso-contour zéro, c'est à dire sur l'interface, alors $\nabla\phi(\mathbf{x}_0)$ est un vecteur qui pointe dans la même direction que la *normale unitaire* extérieure à l'interface, notée \mathbf{n} . Alors, \mathbf{n} peut être calculée par :

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}. \quad (2.31)$$

La *courbure moyenne* de l'interface est définie par :

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}. \quad (2.32)$$

En remplaçant (2.31) dans (2.32), on a :

$$\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \right). \quad (2.33)$$

Grâce à la fonction ϕ , \mathbf{n} et κ peuvent être déterminées sur tout le domaine considéré.

2.2.4 Lissage des discontinuités

Les changements abruptes de η , η_p et λ à travers l'interface peuvent poser des difficultés numériques. En pratique, on effectue une régularisation des quantités présentant un saut à l'interface en introduisant une fonction Heaviside lissée H_ϵ :

$$H_\epsilon(\phi) = \begin{cases} 1 & \text{si } \phi < -\epsilon, \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\phi}{\epsilon} + \frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\phi}{\epsilon}\right) \right] & \text{si } |\phi| \leq \epsilon, \\ 0 & \text{si } \phi > \epsilon, \end{cases} \quad (2.34)$$

où ϵ est un paramètre qui détermine l'épaisseur numérique de l'interface. Typiquement si Δx est le pas d'espace, $\epsilon \in [\Delta x, 2\Delta x]$.

Sachant que $\delta_\epsilon(\phi) = \frac{dH_\epsilon}{d\phi}$, on a

$$\delta_\epsilon(\phi) = \begin{cases} 0 & \text{si } \phi < -\epsilon, \\ \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\epsilon} + \frac{1}{\epsilon} \cos\left(\frac{\pi\phi}{\epsilon}\right) \right] & \text{si } |\phi| \leq \epsilon, \\ 0 & \text{si } \phi > \epsilon. \end{cases} \quad (2.35)$$

En remplaçant $H(\phi)$ par $H_\epsilon(\phi)$ dans (2.26), (2.27) et (2.28), on obtient les versions lissées de η , η_p , et λ respectivement :

$$\eta_\epsilon(\phi) = \eta_1 + (\eta_2 - \eta_1)H_\epsilon(\phi), \quad (2.36)$$

$$\eta_{p\epsilon}(\phi) = \eta_{p1} + (\eta_{p2} - \eta_{p1})H_\epsilon(\phi), \quad (2.37)$$

$$\lambda_\epsilon(\phi) = \lambda_1 + (\lambda_2 - \lambda_1)H_\epsilon(\phi). \quad (2.38)$$

2.3 Formulation Level-Set

On cherche à réécrire les équations de Stokes du système (2.15) en faisant intervenir la fonction Level-Set ϕ . Tout d'abord, l'équation de conservation de mouvement du système (2.15) est réécrite sous sa forme intégrale :

$$- \int_{\Omega} \nabla p \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \nabla \cdot (2\eta \mathbf{D}) \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \nabla \cdot \left(\frac{\eta_p}{\lambda} \boldsymbol{\tau} \right) \, d\mathbf{x} - \int_{\Sigma} \gamma \kappa \mathbf{n} \, dS = \mathbf{0}. \quad (2.39)$$

En remplaçant la normale par son expression (2.31), le terme de tension de surface se lit :

$$\int_{\Sigma} \gamma \kappa \mathbf{n} \, dS = \int_{\Sigma} \gamma \kappa \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \, dS. \quad (2.40)$$

Grâce à la propriété de la fonction Dirac suivante [66],

$$\int g(x) \delta(f(x)) \, d\mathbf{x} = \frac{g(0)}{|f'(0)|}, \quad (2.41)$$

appliquée à la fonction $\phi(x)$,

$$\int_{\Omega} g(x)\delta(\phi(x)) d\mathbf{x} = \int_{\Sigma} \frac{g(0)}{|\nabla\phi(0)|} dS, \quad (2.42)$$

l'intégrale de contour (2.40) peut être exprimée comme une intégrale de volume :

$$\int_{\Sigma} \gamma\kappa \mathbf{n} dS = \int_{\Omega} \gamma\kappa(\phi)\nabla\phi\delta(\phi) d\mathbf{x}. \quad (2.43)$$

Alors, l'équation de conservation de quantité de mouvement du système (2.15) devient :

$$-\nabla p + \nabla \cdot (2\eta(\phi)\mathbf{D}) + \nabla \cdot \left(\frac{\eta_p(\phi)}{\lambda(\phi)} \boldsymbol{\tau} \right) - \gamma\kappa(\phi)\delta(\phi)\nabla\phi = \mathbf{0}. \quad (2.44)$$

Dans l'équation (2.44), la tension de surface apparaît comme une force localisée sur l'interface grâce à la fonction de Dirac. La dérivation de cette formulation peut être trouvée dans [12].

2.4 Méthode de pénalisation

Pour effectuer des expériences physiques à l'échelle du pore, le LOF utilise des réseaux de micro-canaux qui permettent de reconstruire les conditions de l'écoulement dans un milieu poreux. La FIGURE 2.6 montre un plan du réseau de micro-canaux utilisé lors de la fabrication du micromodèle. Des résultats expérimentaux d'écoulements diphasiques dans un réseau composé de microcanaux avec certaines hétérogénéités, peuvent être trouvés dans [17]. La FIGURE 2.7 montre un domaine de calcul avec un réseau de microcanaux utilisé lors des simulations effectuées pour ce travail. Ce réseau est composé de micro-canaux de différents diamètres séparés par des distances non uniformes. Afin de s'affranchir de la difficulté d'imposer des conditions au bord de microcanaux, qui obligerait à créer des maillages adaptés à la géométrie, nous utilisons une *méthode de pénalisation* [2].

Considérons Ω le domaine présenté sur la FIGURE 2.7. On note Ω_f la partie fluide et Ω_s la réunion des obstacles solides. Au lieu de résoudre le système d'équations (2.15) sur Ω_f , un problème équivalent est résolu dans Ω en pénalisant la vitesse dans la partie solide. La méthode consiste à ajouter dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement le terme $\frac{\mathbf{U}}{K}$. Alors, le système d'équations (2.15) devient :

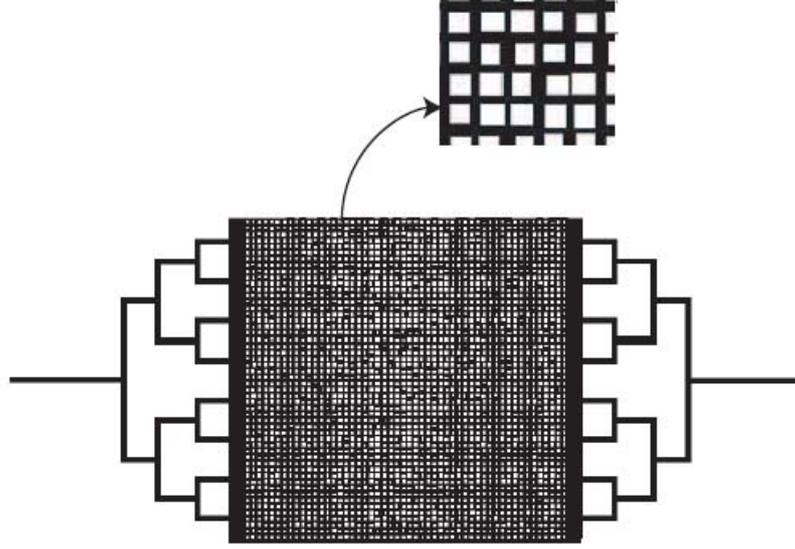
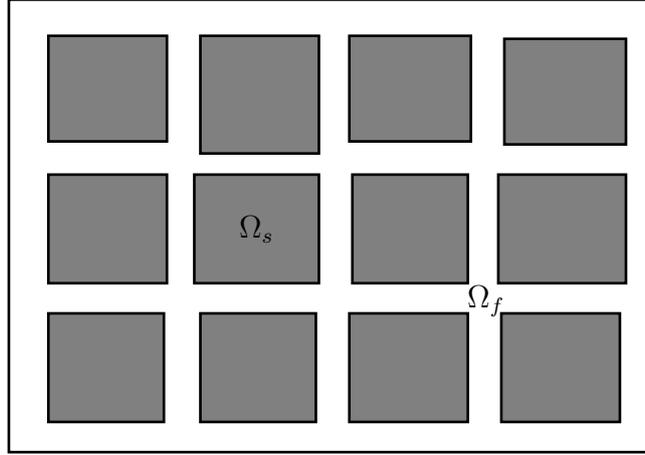


FIGURE 2.6 – Plan du réseau de microcanaux utilisé au LOF pour la fabrication du micro-modèle. Il comprend trois zones : l'entrée, le milieu poreux et la sortie. Image tirée de [17].

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad \text{dans}(0, T) \times \Omega, \\ -\nabla p + \nabla \cdot (2\eta \mathbf{D}) + \nabla \cdot \left(\frac{\eta_p}{\lambda} \boldsymbol{\tau} \right) - \gamma \kappa \mathbf{n} \delta_\Sigma + \frac{\mathbf{U}}{K} = \mathbf{0} \quad \text{dans}(0, T) \times \Omega, \\ \frac{\boldsymbol{\tau} - \mathbf{I}}{\lambda} + \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \boldsymbol{\tau} - (\nabla \mathbf{U}) \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} (\nabla \mathbf{U})^t + \frac{\boldsymbol{\tau}}{K} = \mathbf{0} \quad \text{dans}(0, T) \times \Omega, \end{array} \right. \quad (2.45)$$

où K peut être interprété comme un coefficient de perméabilité adimensionnel. La valeur de K sera très grande dans la partie fluide (e.g. 10^{16}) et très petite dans la partie solide (e.g. 10^{-8}). En conséquence, on récupère les équations initiales de Stokes dans la partie fluide et on impose une vitesse nulle dans la partie solide. Dans l'équation du tenseur, il n'est pas nécessaire d'ajouter le terme $\frac{\boldsymbol{\tau}}{K}$ pour pénaliser le tenseur dans la partie solide. Cependant, les résultats sont plus stables lorsque ce terme est ajouté, car une de plus grandes difficultés de la simulation est de capturer le fort gradient au voisinage des parois solides [79].

Le système d'équations (2.45) nécessite l'utilisation d'une méthode pour le suivi de l'interface entre les deux fluides. Dans la littérature, plusieurs méthodes sont proposées pour ce faire. Dans la section suivante, nous faisons un état de l'art des différentes méthodes de suivi d'interface, puis on s'intéresse à la méthode choisie pour ce travail : La méthode Level-Set.

FIGURE 2.7 – Domaine $\Omega = \Omega_f \cup \Omega_s$

2.5 Modèle final

Finalement, le système d'équations à résoudre pour la modélisation d'un écoulement diphasique newtonien/viscoélastique dans un réseau de microcanaux, s'écrit de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad \text{dans } (0, T) \times \Omega \\ -\nabla p + \nabla \cdot (2\eta(\phi)\mathbf{D}) + \nabla \cdot \left(\frac{\eta_p(\phi)}{\lambda(\phi)} \boldsymbol{\tau} \right) - \gamma \kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla \phi + \frac{\mathbf{U}}{K} = \mathbf{0} \quad \text{dans } (0, T) \times \Omega \\ \frac{\boldsymbol{\tau} - \mathbf{I}}{\lambda(\phi)} + \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \boldsymbol{\tau} - (\nabla \mathbf{U}) \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} (\nabla \mathbf{U})^t + \frac{\boldsymbol{\tau}}{K} = \mathbf{0} \quad \text{dans } (0, T) \times \Omega \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi = 0 \quad \text{dans } (0, T) \times \Omega \end{array} \right. \quad (2.46)$$

Où \mathbf{U} est le champ de vitesse, p la pression et $\boldsymbol{\tau}$ le tenseur de conformation. \mathbf{D} est le tenseur taux de déformations défini dans (1.3) et γ est le coefficient de tension de surface. Les termes $\frac{\mathbf{U}}{K}$ et $\frac{\boldsymbol{\tau}}{K}$ sont les termes de pénalisation (cf. section 2.4). La fonction Level-set ϕ est telle que :

$$\phi \left\{ \begin{array}{l} < 0 \quad \text{sur } \Omega_1, \\ = 0 \quad \text{sur l'interface } \Sigma, \\ > 0 \quad \text{sur } \Omega_2, \end{array} \right. \quad (2.47)$$

la normale à l'interface et sa courbure ainsi qu'à toute isosurface de ϕ sont données respectivement par :

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}, \quad \text{et } \kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}.$$

Il reste encore à définir les conditions initiales et les conditions aux limites pour ce système d'équations. Cela fait l'objet des deux sections suivantes.

2.6 Conditions aux limites

Soit Ω un domaine borné en \mathbb{R}^2 de bord $\partial\Omega$ (cf. FIGURE 2.8). On note $\partial\Omega_e$ la partie du bord où le fluide 2 sera injecté, $\partial\Omega_s$ le bord de sortie sur lequel sont imposées des conditions limites artificielles et $\partial\Omega_g$ et Ω_d la partie du bord où des conditions périodiques sont spécifiées. Grâce à la méthode de pénalisation (cf. section 2.4), il n'est pas nécessaire de fixer des conditions au bord sur les parois des obstacles.

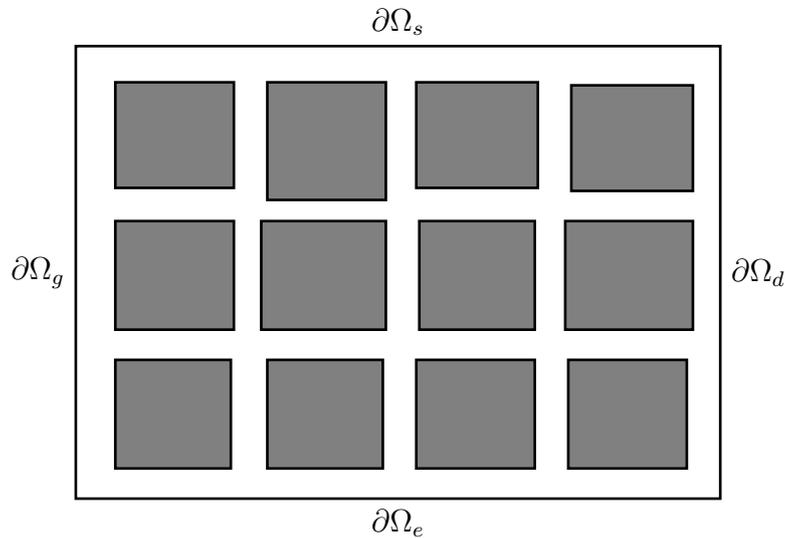


FIGURE 2.8 – $\partial\Omega = \partial\Omega_e \cup \partial\Omega_s \cup \partial\Omega_g \cup \Omega_d$

2.6.1 Condition d'entrée sur $\partial\Omega_e$

Au bord d'entrée $\partial\Omega_e$, le débit Q est fixé, ce qui revient à imposer une condition de Dirichlet non homogène sur la vitesse.

$$\begin{cases} u|_{\partial\Omega_e} = 0, \\ v|_{\partial\Omega_e} = v_{inj}, \end{cases} \quad (2.48)$$

car

$$Q = \int_{\partial\Omega_e} \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} dS. \quad (2.49)$$

On remplace (2.48) dans les équations du tenseur de conformation et on obtient :

$$\begin{cases} \tau_{xx}|_{\partial\Omega_e} = 1, \\ \tau_{xy}|_{\partial\Omega_e} = 0, \\ \tau_{yy}|_{\partial\Omega_e} = 1. \end{cases} \quad (2.50)$$

2.6.2 Conditions périodiques sur $\partial\Omega_g$ et $\partial\Omega_d$

Sur les bords gauche et droit, Ω_g et Ω_d , les conditions aux limites périodiques s'écrivent :

$$\begin{cases} \mathbf{U}|_{\partial\Omega_g} = \mathbf{U}|_{\partial\Omega_d}, \\ \boldsymbol{\tau}|_{\partial\Omega_g} = \boldsymbol{\tau}|_{\partial\Omega_d}. \end{cases} \quad (2.51)$$

2.6.3 Condition de sortie sur $\partial\Omega_s$

Pour $\partial\Omega_s$, on utilise des conditions aux limites artificielles [10]. Cette condition peut être vue comme une condition de type Neumann qui laisse sortir l'écoulement et l'interface sans créer des réflexions.

Dans le cas du fluide 1 (newtonien), on dérive cette condition, en suivant la méthodologie ci-dessus. L'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}, p) + \frac{\mathbf{U}}{K} = \mathbf{0}, \quad (2.52)$$

avec $\boldsymbol{\sigma}$ défini dans (1.48).

Si $(\mathbf{U}^{ref}, p^{ref})$ est une solution de référence dans Ω , alors les variables $\mathbf{W} = \mathbf{U} - \mathbf{U}^{ref}$, $q = p - p^{ref}$, vérifient l'équation :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{W}, q) + \frac{\mathbf{W} + \mathbf{U}^{ref}}{K} = \mathbf{0}. \quad (2.53)$$

La formulation faible de l'équation permet de dériver la condition de sortie pour le fluide 1, à savoir :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{W}, q)\mathbf{n} = 0, \quad (2.54)$$

d'où,

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}, p)\mathbf{n} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{U}^{ref}, p^{ref})\mathbf{n}, \quad (2.55)$$

avec \mathbf{n} la normale sortante du domaine. La condition au bord (2.55) peut être explicitée, à savoir :

$$\begin{pmatrix} -p + 2\eta \frac{\partial u}{\partial x} & \eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & -p + 2\eta \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -p^{ref} + 2\eta \frac{\partial u^{ref}}{\partial x} & \eta \left(\frac{\partial u^{ref}}{\partial y} + \frac{\partial v^{ref}}{\partial x} \right) \\ \eta \left(\frac{\partial u^{ref}}{\partial y} + \frac{\partial v^{ref}}{\partial x} \right) & -p^{ref} + 2\eta \frac{\partial v^{ref}}{\partial y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Alors, on obtient les deux équations suivantes :

$$\begin{cases} \eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) = \eta \left(\frac{\partial u^{ref}}{\partial y} + \frac{\partial v^{ref}}{\partial x} \right), \\ -p + 2\eta \frac{\partial v}{\partial y} = -p^{ref} + 2\eta \frac{\partial v^{ref}}{\partial y}. \end{cases} \quad (2.56)$$

Dans le cas du fluide 2 (viscoélastique), l'équation de conservation de mouvement en termes du tenseur de contraintes s'écrit :

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\delta}(\mathbf{U}, p, \boldsymbol{\tau}) + \frac{\mathbf{U}}{K} = \mathbf{0}, \quad (2.57)$$

avec $\boldsymbol{\delta}$ défini dans (1.49).

Si $(\mathbf{U}^{ref}, p^{ref}, \boldsymbol{\tau}^{ref})$ est une solution de référence dans Ω , alors les variables $\mathbf{W} = \mathbf{U} - \mathbf{U}^{ref}$, $q = p - p^{ref}$, $\boldsymbol{\chi} = \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}^{ref}$ vérifient les équations :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{\delta}(\mathbf{W}, q, \boldsymbol{\chi}) + \frac{\mathbf{W} + \mathbf{U}^{ref}}{K} = \mathbf{0}, \\ \frac{(\boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{\tau}^{ref}) - \mathbf{I}}{\lambda} + \frac{\partial \boldsymbol{\chi}}{\partial t} + ((\mathbf{W} + \mathbf{U}^{ref}) \cdot \nabla)(\boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{\tau}^{ref}) \\ - (\nabla(\mathbf{W} + \mathbf{U}^{ref}))(\boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{\tau}^{ref}) - (\boldsymbol{\chi} + \boldsymbol{\tau}^{ref})(\nabla(\mathbf{W} + \mathbf{U}^{ref}))^t = \mathbf{0}, \end{cases} \quad (2.58)$$

En suivant la même procédure que pour le fluide newtonien, la condition de sortie pour le fluide viscoélastique est [79] :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\delta}(\mathbf{U}, p)\mathbf{n} = \boldsymbol{\delta}(\mathbf{U}^{ref}, p^{ref})\mathbf{n}, \\ \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}^{ref} = \mathbf{0}. \end{cases} \quad (2.59)$$

La condition au bord (2.59) peut être explicitée de la manière suivante :

$$\begin{cases} \eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\eta_p}{\lambda} \tau_{xy} = \eta \left(\frac{\partial u^{ref}}{\partial y} + \frac{\partial v^{ref}}{\partial x} \right) + \frac{\eta_p}{\lambda} \tau_{xy}^{ref} \\ -p + 2\eta \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\eta_p}{\lambda} (\tau_{yy} - 1) = -p^{ref} + 2\eta \frac{\partial v^{ref}}{\partial y} + \frac{\eta_p}{\lambda} (\tau_{yy}^{ref} - 1) \\ \tau_{xx} = \tau_{xx}^{ref} \\ \tau_{xy} = \tau_{xy}^{ref} \\ \tau_{yy} = \tau_{yy}^{ref} \end{cases}$$

2.7 Conditions initiales

Les conditions initiales utilisées pour chaque variable de notre système d'équations à résoudre sont :

$$\left\{ \begin{array}{ll} u(\mathbf{x}, 0) = 0 & \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ v(\mathbf{x}, 0) = v_{inj} & \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega_e \\ \tau_{xx}(\mathbf{x}, 0) = 1 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_f \\ \tau_{xx}(\mathbf{x}, 0) = 0 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_s \\ \tau_{xy}(\mathbf{x}, 0) = 0 & \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ \tau_{yy}(\mathbf{x}, 0) = 1 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_f \\ \tau_{yy}(\mathbf{x}, 0) = 0 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_s \\ \phi(\mathbf{x}, 0) = \phi_0 & \forall \mathbf{x} \in \Omega \end{array} \right. \quad (2.60)$$

2.8 Mise sous forme adimensionnelle

On se propose de réécrire le système (2.46) sous forme adimensionnelle. Soient la vitesse, la longueur et la viscosité caractéristiques notées U_c , L_c et η_c respectivement. Ainsi il vient,

$$\begin{aligned} x &= L_c x', & y &= L_c y', & t &= \frac{L_c}{U_c} t', \\ p &= \frac{\eta_c U_c}{L_c} p', & \mathbf{U} &= U_c \mathbf{U}', & \eta &= \eta_c \eta', \\ & & \eta_p &= \eta_c \eta'_p, & \lambda &= \frac{L_c}{U_c} \lambda'. \end{aligned}$$

Les variables avec l'apostrophe désignent les quantités adimensionnées. En pratique, la vitesse caractéristique est la vitesse d'injection et la longueur caractéristique est la largeur du canal où le fluide viscoélastique est injecté. La viscosité caractéristique sera toujours η_1 . En appliquant ces adimensionnements au système d'équations (2.46) on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla' \cdot \mathbf{U}' = 0 \\ -\nabla' p' + \nabla' \cdot (2\eta'(\phi)\mathbf{D}') + \nabla' \cdot \left(\frac{\eta'_p(\phi)}{\lambda'(\phi)} \boldsymbol{\tau}' \right) - \frac{1}{Ca} \kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla \phi + \frac{\mathbf{U}'}{K} = \mathbf{0} \\ \frac{\boldsymbol{\tau}' - \mathbf{I}}{\lambda'(\phi)} + \frac{\partial \boldsymbol{\tau}'}{\partial t'} + (\mathbf{U}' \cdot \nabla') \boldsymbol{\tau}' - (\nabla \mathbf{U}') \boldsymbol{\tau}' - \boldsymbol{\tau}' (\nabla' \mathbf{U}')^t + \frac{\boldsymbol{\tau}'}{K} = \mathbf{0} \\ \frac{\partial \phi'}{\partial t'} + \mathbf{U}' \cdot \nabla' \phi = 0 \end{array} \right. \quad (2.61)$$

avec Ca le nombre capillaire défini par $Ca = \frac{\eta_c U_\epsilon}{\gamma}$. Les rapports de viscosités et le temps de relaxation adimensionnés sont donnés par :

$$\eta'(\phi) = \frac{\eta_1}{\eta_c} + \left(\frac{\eta_2}{\eta_c} - \frac{\eta_1}{\eta_c} \right) H_\epsilon(\phi) \quad (2.62)$$

$$\eta'_p(\phi) = \frac{\eta_{p1}}{\eta_c} + \left(\frac{\eta_{p2}}{\eta_c} - \frac{\eta_{p1}}{\eta_c} \right) H_\epsilon(\phi) \quad (2.63)$$

$$\lambda'(\phi) = \lambda'_1 + (\lambda'_2 - \lambda'_1) H_\epsilon(\phi) \quad (2.64)$$

Il convient ici de faire quelques remarques par rapport au système d'équations adimensionné. Dans le cas de la modélisation d'un écoulement diphasique où le fluide 1 est un fluide newtonien et le fluide 2 est en fluide viscoélastique, on aura $\eta_{p1} = 0$.

Chapitre 3

Résolution numérique et validation

On cherche à résoudre numériquement le système d'équations adimensionné :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad \text{dans } (0, T) \times \Omega \\ -\nabla p + \nabla \cdot (2\eta(\phi)\mathbf{D}) + \nabla \cdot \left(\frac{\eta_p(\phi)}{\lambda(\phi)} \boldsymbol{\tau} \right) - \frac{1}{Ca} \kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla \phi + \frac{\mathbf{U}}{K} = \mathbf{0} \quad \text{dans } (0, T) \times \Omega \\ \frac{\boldsymbol{\tau} - \mathbf{I}}{\lambda(\phi)} + \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \boldsymbol{\tau} - (\nabla \mathbf{U}) \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} (\nabla \mathbf{U})^t + \frac{\boldsymbol{\tau}}{K} = \mathbf{0} \quad \text{dans } (0, T) \times \Omega \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \phi = 0 \quad \text{dans } (0, T) \times \Omega \end{array} \right. \quad (3.1)$$

couplé aux conditions aux limites et conditions initiales décrites dans les sections 2.6 et 2.7 respectivement. Ce chapitre est dédié à la présentation des techniques numériques pour résoudre le système (3.1).

3.1 Algorithme de résolution

On note $(\mathbf{U}^n, p^n, \boldsymbol{\tau}^n, \phi^n)$ l'approximation de $(\mathbf{U}, p, \boldsymbol{\tau}, \phi)$ à l'instant $t^n = n\Delta t$ où $n \in \mathbb{N}$ et Δt est le pas de temps. D'abord on calcule $(\mathbf{U}^{n+1}, p^{n+1})$, puis $\boldsymbol{\tau}^{n+1}$ et enfin ϕ^{n+1} . Dans les équations de Stokes, les termes $\frac{1}{Ca} \kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla \phi$ et $\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$ sont traités de manière explicite. Ce qui donne pour l'équation de conservation de la masse et de la quantité de mouvement :

$$\nabla \cdot \mathbf{U}^{n+1} = 0, \quad (3.2)$$

et

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (2\eta(\phi^n)\mathbf{D}(\mathbf{U}^{n+1})) + \frac{\mathbf{U}^{n+1}}{K} = \\ \nabla p^{n+1} + \frac{1}{Ca}\kappa(\phi^n)\delta(\phi^n)\nabla\phi^n - \nabla \cdot \left(\frac{\eta_p(\phi^n)}{\lambda(\phi^n)}\boldsymbol{\tau}^n \right). \end{aligned} \quad (3.3)$$

La loi de comportement est résolue en deux demi-temps, l'un prenant en compte le terme de convection et l'autre les termes de la dérivée convective. On sépare donc la résolution de la loi de comportement en la résolution de deux problèmes via un splitting :

1. Étape 1 :

$$\frac{\boldsymbol{\tau}^{n+1/2} - \boldsymbol{\tau}^n}{\Delta t} + (\mathbf{U}^{n+1} \cdot \nabla)\boldsymbol{\tau}^n = \mathbf{0}. \quad (3.4)$$

2. Étape 2 :

$$\frac{(\boldsymbol{\tau}^{n+1} - \mathbf{I})}{\lambda(\phi^n)} + \frac{\boldsymbol{\tau}^{n+1} - \boldsymbol{\tau}^{n+1/2}}{\Delta t} - (\nabla\mathbf{U}^{n+1})\boldsymbol{\tau}^{n+1} - \boldsymbol{\tau}^{n+1}(\nabla\mathbf{U}^{n+1})^T = \mathbf{0}. \quad (3.5)$$

L'équation de transport de la Level-Set est discrétisée en temps par un schéma d'Euler explicite de la manière suivante :

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} + (\mathbf{U}^{n+1} \cdot \nabla)\phi^n = 0. \quad (3.6)$$

3.2 Méthode du Lagrangien Augmenté

La résolution de (3.3) couplée à (3.2) pour obtenir $(\mathbf{U}^{n+1}, p^{n+1})$ est effectuée par la méthode du Lagrangien Augmenté [25]. Par simplicité, on se place dans le cas d'un écoulement stationnaire incompressible :

$$\begin{cases} -\nabla p + \eta\Delta\mathbf{U} = f \text{ dans } \Omega \in \mathbf{R}^2, \\ \nabla \cdot \mathbf{U} = 0, \\ \mathbf{U}|_{\partial\Omega} = 0. \end{cases} \quad (3.7)$$

Notons,

$$H^1(\Omega) = \left\{ f; f \in L^2(\Omega), \frac{\partial f}{\partial x_i} \in L^2(\Omega), i = 1, 2 \right\}.$$

$$H_0^1(\Omega) = \{ f; f \in H^1(\Omega), f|_{\partial\Omega} = 0 \}.$$

À partir de la formulation faible de (3.7), on construit une fonctionnelle $J(\mathbf{V})$ pour $\mathbf{f} \in L^2(\Omega)$ et $\mathbf{V} \in H_0^1(\Omega)$:

$$J(\mathbf{V}) = \frac{\eta}{2} a(\mathbf{V}, \mathbf{V}) - (\mathbf{f}, \mathbf{V}), \quad (3.8)$$

avec

$$a(\mathbf{U}, \mathbf{V}) = \sum_{i,j=1}^2 \int_{\Omega} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} dx,$$

et

$$(\mathbf{f}, \mathbf{V}) = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{V} dx.$$

La fonctionnelle $J(\mathbf{V})$ doit être minimisée sous la contrainte :

$$M = \{ \mathbf{V} \in H_0^1(\Omega) \text{ tel que } \nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \}.$$

Cela correspond à trouver $\mathbf{U} \in M$ solution de :

$$J(\mathbf{U}) = \min_{\mathbf{V} \in M} J(\mathbf{V}). \quad (3.9)$$

Le problème (3.9) correspond à un problème de minimisation sous contrainte. Ce problème est transformé en un problème de minimisation sans contrainte en introduisant un multiplicateur de Lagrange q . Afin d'améliorer la convergence, on introduit aussi un terme de pénalisation $\frac{1}{2}r |\nabla \cdot \mathbf{V}|^2$, $r \in \mathbb{R}$. Alors, le Lagrangien Augmenté s'écrit :

$$\begin{aligned} L_r(\mathbf{V}, q) &= J(\mathbf{V}) - (q, \nabla \cdot \mathbf{V}) + \frac{r}{2} |\nabla \cdot \mathbf{V}|^2 \\ &= \frac{\eta}{2} a(\mathbf{V}, \mathbf{V}) - (\mathbf{f}, \mathbf{V}) - (q, \nabla \cdot \mathbf{V}) + \frac{r}{2} |\nabla \cdot \mathbf{V}|^2. \end{aligned}$$

où $q \in L^2(\Omega)$. Le problème de minimisation consiste à trouver le point selle $(\mathbf{U}, p) \in H_0^1(\Omega) \times L^2(\Omega)$ du Lagrangien (3.10), c'est à dire :

$$L_r(\mathbf{U}, q) \leq L_r(\mathbf{U}, p) \leq L_r(\mathbf{V}, p) \quad \forall \mathbf{V} \in H_0^1(\Omega), \forall q \in L^2(\Omega). \quad (3.10)$$

En revenant à la formulation forte du problème, le point selle est aussi solution de :

$$\begin{cases} -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{U} + r \nabla(\nabla \cdot \mathbf{U}) = f \text{ dans } \Omega \\ \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \end{cases} \quad (3.11)$$

La recherche du point selle de (3.11) est effectuée par l'algorithme itératif d'Uzawa. Finalement, on revient à notre problème original, qui consiste à résoudre (3.3) couplée à (3.2) pour obtenir $(\mathbf{U}^{n+1}, p^{n+1})$. L'algorithme du Lagrangien Augmenté pour notre problème s'écrit :

1. A l'instant t^n , on connaît : \mathbf{U}^n , p^n , ϕ^n et τ^n .
2. On résout le système linéaire suivant pour obtenir $\mathbf{U}^{n+\frac{k}{L}}$, avec $1 \leq k \leq L$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left(2\eta^n \mathbf{D}(\mathbf{U}^{n+\frac{k}{L}}) \right) + r \nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{U}^{n+\frac{k}{L}} \right) + \frac{\mathbf{U}^{n+\frac{k}{L}}}{K} = \\ \nabla p^{n+\frac{k-1}{L}} + \frac{1}{Ca} \kappa(\phi^n) \delta(\phi^n) \nabla \phi^n - \frac{\eta_p(\phi^n)}{\lambda(\phi^n)} \nabla \cdot \tau^n. \end{aligned} \quad (3.12)$$

On actualise la pression via :

$$p^{n+\frac{k}{L}} = p^{n+\frac{k-1}{L}} - s \left(\nabla \cdot \mathbf{U}^{n+\frac{k}{L}} \right). \quad (3.13)$$

3. On itère (2) et (3) jusqu'à que le critère suivant soit atteint :

$$\nabla \cdot \mathbf{U}^{n+\frac{k}{L}} < \epsilon. \quad (3.14)$$

4. Quand le critère est atteint, on fait $\mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^{n+\frac{k}{L}}$ et $p^{n+1} = p^{n+\frac{k}{L}}$.

Dans l'algorithme ci-dessus, r et s sont les coefficients du Lagrangien Augmenté. On prend ici pour l'équation de Stokes $r = 1$ et $s = 1$. La précision requise pour ϵ est 10^{-4} .

3.3 Algorithme général

La résolution du système d'équations (3.1) se déroule de la manière suivante :

1. A l'instant t^n on connaît : U^n , p^n , ϕ^n , η^n , η_p^n , λ^n et τ^n .
2. On calcul U^{n+1} et p^{n+1} avec la méthode du Lagrangien Augmenté décrite dans la Section (3.2).
3. On calcul τ^{n+1} en deux demi-temps. D'abord on résout (3.4) et après (3.5).
4. On trouve ϕ^{n+1} à l'aide de l'équation de transport (3.6).
5. Avec ϕ^{n+1} connue, η^{n+1} , η_p^{n+1} et λ^{n+1} peuvent être actualisées en utilisant (2.62), (2.63) et (2.64), respectivement.

La résolution de ces étapes nécessite la discrétisation de différents opérateurs spatiaux. Dans la section (3.5.2), on détaille les méthodes numériques employées pour cette discrétisation spatiale.

3.4 Condition de stabilité

Dans les équations de Stokes, le traitement explicite du terme associé à la tension de surface nécessite un critère de stabilité sur le pas de temps. Dans le cadre de cette thèse, la condition de stabilité proposée par Galusinski et Vigneaux dans [26] est utilisée :

$$\Delta t \leq c \frac{\min(\eta_1, \eta_2)}{\gamma} \Delta x. \quad (3.15)$$

Cette condition de stabilité peut être très restrictive dans certains cas où la vitesse de l'écoulement est trop petite comparé à $\frac{\gamma}{\eta}$, cependant cette constante c peut être plus grande que 1 [26]. Les tests numériques montrent que $c = 6$ est la valeur maximale pour que la méthode numérique reste stable.

3.5 Discrétisation en espace

3.5.1 Notations et positionnement des inconnues

On se place sur un maillage cartésien structuré composé de mailles rectangulaires. Le schéma de discrétisation utilisé est le schéma de Volumes Finis sur un maillage décalé, comme dans la méthode MAC (Marker and Cell). Celui-ci est constitué d'une grille pour la pression et d'une grille pour chaque composante de la vitesse. On note Δx et Δy , les pas de discrétisation en espace dans les directions x et y , respectivement. Les points (x_i, y_j) sont les centres des mailles définis par :

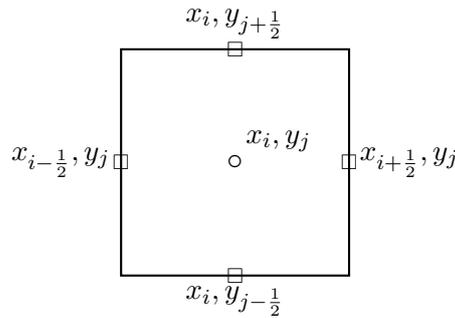


FIGURE 3.1 – Notations

$$(x_i, y_j) = \left(\left(i - \frac{1}{2}\right) \Delta x, \left(j - \frac{1}{2}\right) \Delta y \right) \quad \text{pour } i = 1, \dots, Nx \text{ et } j = 1, \dots, Ny$$

La pression p , les viscosités η et η_p , le temps de relaxation λ et les éléments de la diagonale du tenseur de conformation τ_{xx} et τ_{yy} sont pris au centre de mailles tandis que τ_{xy} est localisée aux sommets des mailles. Les composantes u et v de la

vitesse sont prises au milieu des arêtes (cf. FIGURE 3.2). Alors, les notations sont les suivantes :

$$\begin{aligned}
 u_{i,j} &= u(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j) \\
 v_{i,j} &= v(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}) \\
 p_{i,j} &= p(x_i, y_j) \\
 \phi_{i,j} &= \phi(x_i, y_j) \\
 \eta_{i,j} &= \eta(x_i, y_j) \\
 \eta_{p_{i,j}} &= \eta_p(x_i, y_j) \\
 \lambda_{i,j} &= \lambda(x_i, y_j) \\
 \tau_{xx_{i,j}} &= \tau_{xx}(x_i, y_j) \\
 \tau_{xy_{i,j}} &= \tau_{xy}(x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}) \\
 \tau_{yy_{i,j}} &= \tau_{yy}(x_i, y_j)
 \end{aligned}$$

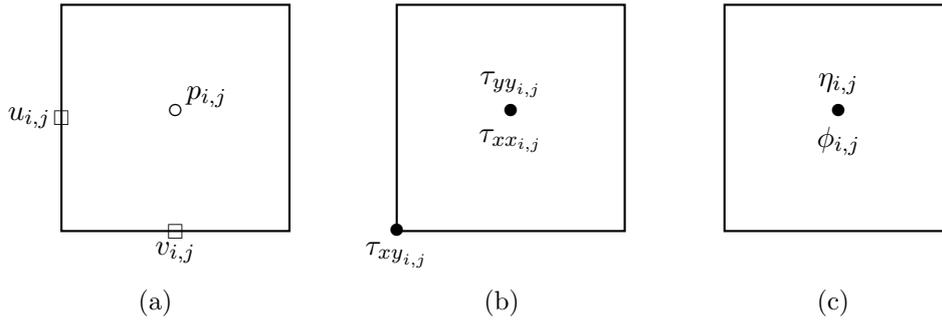


FIGURE 3.2 – Positionnement des inconnues : (a) Maillage MAC, localisation de $p_{i,j}$, $u_{i,j}$ et $v_{i,j}$ (b) Localisation des composantes du tenseur de conformation $\tau_{xx_{i,j}}$, $\tau_{xy_{i,j}}$, $\tau_{yy_{i,j}}$ (c) Localisation de $\phi_{i,j}$, $\eta_{i,j}$, $\eta_{p_{i,j}}$ et $\lambda_{i,j}$

On note V_u le volume de contrôle centré sur la composante u , V_v le volume de contrôle centré sur v et V_p le volume de contrôle centré sur la pression p qui correspond à la maille (cf. FIGURE 3.3) . Les bords de V_u et V_v sont notés ∂V_u et ∂V_v respectivement. On introduit aussi la notation suivante pour les bords :

$$\begin{aligned}
 \partial V_u &= \partial V_u^x \cup \partial V_u^y \\
 &= \partial V_u^{x+} \cup \partial V_u^{x-} \cup \partial V_u^{y+} \cup \partial V_u^{y-}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \partial V_v &= \partial V_v^x \cup \partial V_v^y \\
 &= \partial V_v^{x+} \cup \partial V_v^{x-} \cup \partial V_v^{y+} \cup \partial V_v^{y-}
 \end{aligned}$$

où V_u^{x+} la face orientée dans le sens des x positifs pour le volume de contrôle V_u .

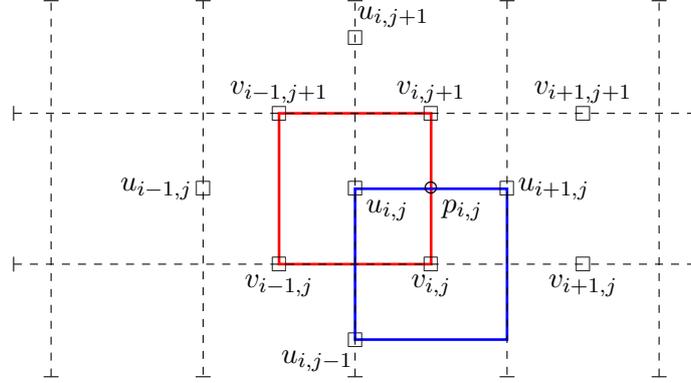


FIGURE 3.3 – Volumes de contrôle V_u (en rouge) et V_v (en bleu)

3.5.2 Discrétisation de Stokes

On rappelle que le tenseur des déformations est défini de la manière suivante :

$$\mathbf{D}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) & \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix}$$

En développant l'équation (3.12) et en utilisant le fait que $\nabla H(\phi) = \delta(\phi)\nabla\phi$, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(2\eta \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) + r \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = \\ \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\eta_p}{\lambda} \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right) + \frac{1}{Ca} \kappa(\phi) \frac{\partial H(\phi)}{\partial x} \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(2\eta \frac{\partial v}{\partial y} \right) + r \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) = \\ \frac{\partial p}{\partial y} - \frac{\eta_p}{\lambda} \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \right) + \frac{1}{Ca} \kappa(\phi) \frac{\partial H(\phi)}{\partial y} \end{aligned} \quad (3.17)$$

Pour alléger les notations, dans (3.16) et (3.17) les indices liés à la discrétisation temporelle et aux itérations du lagrangien augmenté ont été omis. En intégrant (3.16) sur le volume de contrôle V_u et en utilisant le théorème de la divergence, on

obtient :

$$\begin{aligned}
& \int_{V_u^{x^+}} 2\eta \frac{\partial u}{\partial x} dy - \int_{V_u^{x^-}} 2\eta \frac{\partial u}{\partial x} dy \\
& + \int_{V_u^{y^+}} \eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) dx - \int_{V_u^{y^-}} \eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) dx \\
& + r \int_{V_u^{x^+}} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) dy - r \int_{V_u^{x^-}} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) dy \\
& = \int_{V_u} \frac{\partial p}{\partial x} dx dy + \int_{V_u} \frac{1}{Ca} \kappa(\phi) \frac{\partial H(\phi)}{\partial y} dx dy - \int_{V_u} \frac{\eta_p}{\lambda} \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right) dx dy.
\end{aligned}$$

De la même manière, en intégrant (3.17) sur le volume de contrôle V_v , on obtient

$$\begin{aligned}
& \int_{V_v^{x^+}} \eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) dy - \int_{V_v^{x^-}} \eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) dy \\
& \int_{V_v^{y^+}} 2\eta \frac{\partial v}{\partial y} dx - \int_{V_v^{y^-}} 2\eta \frac{\partial v}{\partial y} dx \\
& + r \int_{V_v^{y^+}} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) dx - r \int_{V_v^{y^-}} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) dx \\
& = \int_{V_v} \frac{\partial p}{\partial y} dx dy + \int_{V_v} \frac{1}{Ca} \kappa(\phi) \frac{\partial H(\phi)}{\partial y} dx dy - \int_{V_v} \frac{\eta_p}{\lambda} \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \right) dx dy.
\end{aligned}$$

En intégrant l'équation (3.13) sur la maille V_p on obtient :

$$\int_{V_p} p^{k+1} dx dy = \int_{V_p} p^k - s(\nabla \cdot \mathbf{U})^{k+1}. \quad (3.18)$$

3.5.2.1 Calcul des viscosités

Pour calculer les viscosités sur les arêtes des volumes de contrôle V_u et V_v , on fait une moyenne arithmétique de deux moyennes harmoniques. Ce choix permet d'assurer la continuité des flux par direction (équivalent 1D). En 1D, la conservation du flux est assurée si la viscosité est prise comme la moyenne harmonique des viscosités voisines. En ce qui concerne le problème 2D, il n'existe pas, à notre connaissance d'autres solutions. C'est un choix arbitraire qui reproduit le cas 1D. On utilise la notation suivante :

$$\eta_{i,j}^{u,y} = \frac{\eta_{i,j} \eta_{i,j-1}}{\eta_{i,j} + \eta_{i,j-1}} + \frac{\eta_{i-1,j} \eta_{i-1,j-1}}{\eta_{i-1,j} + \eta_{i-1,j-1}}, \quad (3.19)$$

$$\eta_{i,j}^{v,x} = \frac{\eta_{i-1,j-1} \eta_{i,j-1}}{\eta_{i-1,j-1} + \eta_{i,j-1}} + \frac{\eta_{i-1,j} \eta_{i,j}}{\eta_{i-1,j} + \eta_{i,j}}. \quad (3.20)$$

3.5.2.2 Discrétisation du terme de tension de surface

On se concentre ici sur la discrétisation du terme de tension de surface intégré sur le volume de contrôle V_u :

$$\int_{V_u} \frac{1}{Ca} \kappa(\phi) \frac{\partial H}{\partial x}(\phi) dx dy.$$

Pour cela, on suit la procédure présentée par Vigneaux [77] dans son travail de thèse, en utilisant l'expression de $\kappa(\phi)$ (2.32).

$$\begin{aligned} \int_{V_u} \frac{1}{Ca} \kappa(\phi) \frac{\partial H}{\partial x}(\phi) dx dy &= \frac{1}{Ca} \int_{V_u} \nabla \cdot \mathbf{n} \frac{\partial H}{\partial x}(\phi) dx dy \approx \\ &\frac{1}{Ca} \frac{\int_{V_u} \nabla \cdot \mathbf{n} dx dy}{\Delta x \Delta y} \int_{V_u} \frac{\partial H}{\partial x}(\phi) dx dy. \end{aligned}$$

Avec un calcul direct, la deuxième intégrale donne :

$$\int_{V_u} \frac{\partial H}{\partial x}(\phi) dx dy \approx \Delta y (H(\phi_{i,j}) - H(\phi_{i-1,j})).$$

Maintenant, on s'occupe de la première intégrale. En utilisant la formule de la divergence, on obtient :

$$\int_{V_u} \nabla \cdot \mathbf{n} dx dy = \int_{\partial V_u} \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_u dS.$$

Où \mathbf{n}_u est la normale extérieur au volume de contrôle V_u . Pour calculer l'intégrale, on introduit la notation suivante :

- $\mathbf{n}(\phi_{i,j}) = (n^x(\phi_{i,j}), n^y(\phi_{i,j}))$, la normale calculée au point (x_i, y_j) .
- $\tilde{\mathbf{n}}(\phi_{i,j}) = (\tilde{n}^x(\phi_{i,j}), \tilde{n}^y(\phi_{i,j}))$, la normale calculée au point $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}})$.

En tenant compte de ces notations, on a :

$$\begin{aligned} \int_{\partial V_u} \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_u dS &= \int_{V_u^{x^+}} n^x dy - \int_{V_u^{x^-}} n^x dy + \int_{V_u^{y^+}} n^y dx - \int_{V_u^{y^-}} n^y dx \\ &\approx (n^x(\phi_{i,j}) - n^x(\phi_{i-1,j})) \Delta y + (\tilde{n}^y(\phi_{i,j+1}) - \tilde{n}^y(\phi_{i,j})) \Delta x. \end{aligned}$$

Les composantes de la normale sont calculées de la manière suivante :

$$n^x(\phi_{i,j}) = \frac{(\partial_x \phi)_{x_i, y_j}}{\left((\partial_x \phi)_{x_i, y_j}^2 + (\partial_y \phi)_{x_i, y_j}^2 \right)^{\frac{1}{2}}}, \quad (3.21)$$

$$\tilde{n}^y(\phi_{i,j}) = \frac{(\partial_y \phi)_{x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}}}{\left((\partial_x \phi)_{x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}}^2 + (\partial_y \phi)_{x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}}^2 \right)^{\frac{1}{2}}} . \quad (3.22)$$

Où,

$$(\partial_x \phi)_{x_i, y_j} = \frac{\phi_{i+1, j}^u - \phi_{i, j}^u}{\Delta x} , \quad (\partial_y \phi)_{x_i, y_j} = \frac{\phi_{i, j+1}^v - \phi_{i, j}^v}{\Delta y} ,$$

$$(\partial_x \phi)_{x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}} = \frac{\phi_{i, j}^v - \phi_{i-1, j}^v}{\Delta x} \quad \text{et} \quad (\partial_y \phi)_{x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}} = \frac{\phi_{i, j}^u - \phi_{i, j-1}^u}{\Delta y} . \quad (3.23)$$

Les termes $\phi_{i,j}^u$ et $\phi_{i,j}^v$, correspondent aux valeurs de ϕ aux points $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j)$ et $(x_i, y_{j-\frac{1}{2}})$ respectivement. À la différence de [77], il n'est pas nécessaire de faire une interpolation pour le calcul de ces valeurs, elles seront récupérées à partir du maillage deux fois plus fin qui est utilisé pour résoudre l'équation de transport.

3.5.2.3 Discrétisation du terme $\frac{\eta_p}{\lambda} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$

Maintenant on se concentre sur la discrétisation du terme $\frac{\eta_p}{\lambda} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$ qui est aussi traité de manière explicite. Pour calculer les intégrales

$$\int_{V_u} \frac{\eta_p}{\lambda} \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right) dx dy \quad \text{et} \quad \int_{V_v} \frac{\eta_p}{\lambda} \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \right) dx dy, \quad (3.24)$$

l'approximation de second ordre suivante est utilisée :

$$\int_{V_c} q dx dy = \bar{q} \Delta x \Delta y \approx q|_{V_c} \Delta x \Delta y.$$

Où $q|_{V_c}$ est la valeur de la quantité q au centre du volume de contrôle V_c . Alors, on a :

$$\int_{V_u} \frac{\eta_p}{\lambda} \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right) dx dy \approx \frac{\eta_p}{\lambda} \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right) \Big|_{V_u} \Delta x \Delta y,$$

$$\int_{V_v} \frac{\eta_p}{\lambda} \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \right) dx dy \approx \frac{\eta_p}{\lambda} \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \right) \Big|_{V_v} \Delta x \Delta y.$$

Comme η_p et λ sont définies au centre de mailles, des interpolations linéaires sont nécessaires pour les calculer aux points $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j)$ et $(x_i, y_{j-\frac{1}{2}})$. On introduit

la notation suivante :

$$\begin{aligned}\eta_{p_{i,j}}^u &= \eta_p \left(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j \right) = \frac{\eta_{p_{i,j}} + \eta_{p_{i-1,j}}}{2}, \\ \lambda_{i,j}^u &= \lambda \left(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j \right) = \frac{\lambda_{i,j} + \lambda_{i-1,j}}{2}, \\ \eta_{p_{i,j}}^v &= \eta_p \left(x_i, y_{j-\frac{1}{2}} \right) = \frac{\eta_{p_{i,j}} + \eta_{p_{i,j-1}}}{2}, \\ \lambda_{i,j}^v &= \lambda \left(x_i, y_{j-\frac{1}{2}} \right) = \frac{\lambda_{i,j} + \lambda_{i,j-1}}{2}.\end{aligned}$$

On doit approcher aussi $\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x}$ et $\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y}$ au point $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j)$ et $\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x}$ et $\frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y}$ en $(x_i, y_{j-\frac{1}{2}})$. Grâce à la localisation de τ_{xx} , τ_{xy} , τ_{yy} , le calcul des dérivées est direct :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \left(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j \right) &= \frac{\tau_{xx_{i,j}} - \tau_{xx_{i-1,j}}}{\Delta x}, \\ \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \left(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j \right) &= \frac{\tau_{xy_{i,j+1}} - \tau_{xy_{i,j}}}{\Delta y}, \\ \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} \left(x_i, y_{j-\frac{1}{2}} \right) &= \frac{\tau_{xy_{i+1,j}} - \tau_{xy_{i,j}}}{\Delta x}, \\ \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \left(x_i, y_{j-\frac{1}{2}} \right) &= \frac{\tau_{yy_{i,j}} - \tau_{yy_{i,j-1}}}{\Delta y}.\end{aligned}$$

3.5.2.4 Schéma final

Finalement, la discrétisation volumes-finis pour l'équation de quantité de mouvement intégrée sur le volume de contrôle V_u s'écrit :

$$\begin{aligned}& \left(2\eta_{i,j} \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} - 2\eta_{i-1,j} \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} \right) \Delta y \\ & + \eta_{i,j+1}^{u,y} \left(\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta y} + \frac{v_{i,j+1} - v_{i-1,j+1}}{\Delta x} \right) \Delta x \\ & - \eta_{i,j}^{u,y} \left(\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y} + \frac{v_{i,j} - v_{i-1,j}}{\Delta x} \right) \Delta x \\ & + r \left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{\Delta y} \right) \Delta y - r \left(\frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} + \frac{v_{i-1,j+1} - v_{i,j}}{\Delta y} \right) \Delta y \\ & = (p_{i,j} - p_{i-1,j}) \Delta y \\ & + \frac{1}{Ca} \frac{1}{\Delta x \Delta y} \left((n_{i,j}^x - n_{i-1,j}^x) \Delta y + (\tilde{n}_{i,j+1}^y - \tilde{n}_{i,j}^y) \Delta x \right) \Delta y (H(\phi_{i,j}) - H(\phi_{i-1,j})) \\ & - \frac{\eta_{p_{i,j}}^u}{\lambda_{i,j}^u} (\tau_{xx_{i,j}} - \tau_{xx_{i-1,j}}) \Delta y - \frac{\eta_{p_{i,j}}^u}{\lambda_{i,j}^u} (\tau_{xx_{i,j+1}} - \tau_{xy_{i,j}}) \Delta x\end{aligned}\tag{3.25}$$

Sur le volume de contrôle V_v :

$$\begin{aligned}
& +\eta_{i+1,j}^{v,x} \left(\frac{v_{i+1,j} - v_{i,j}}{\Delta x} + \frac{u_{i+1,j} - u_{i+1,j-1}}{\Delta y} \right) \Delta y \\
& -\eta_{i,j}^{v,x} \left(\frac{v_{i,j} - v_{i-1,j}}{\Delta x} + \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y} \right) \Delta y \\
& + \left(2\eta_{i,j} \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{\Delta y} - 2\eta_{i,j-1} \frac{v_{i,j} - v_{i,j-1}}{\Delta y} \right) \Delta x \\
& + r \left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{\Delta y} \right) \Delta y - r \left(\frac{u_{i+1,j-1} - u_{i,j-1}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j} - v_{i,j-1}}{\Delta y} \right) \Delta y \\
& = (p_{i,j} - p_{i,j-1}) \Delta x \\
& + \frac{1}{Ca} \frac{1}{\Delta x \Delta y} \left((\tilde{n}_{i+1,j}^{\phi,x} - \tilde{n}_{i,j}^{\phi,x}) \Delta y + (n_{i,j}^y - n_{i,j-1}^y) \Delta x \right) \Delta y (H(\phi_{i,j}) - H(\phi_{i,j-1})) \\
& - \frac{\eta_{p_{i,j}}^v}{\lambda_{i,j}^v} (\tau_{xy_{i+1,j}} - \tau_{xy_{i,j}}) \Delta y - \frac{\eta_{p_{i,j}}^v}{\lambda_{i,j}^v} (\tau_{yy_{i,j}} - \tau_{yy_{i,j-1}}) \Delta x
\end{aligned} \tag{3.26}$$

3.5.2.5 Validation du code : loi de Laplace

On se propose de vérifier numériquement la loi de Laplace qui établit que la différence de pression nécessaire pour maintenir la forme d'une interface entre deux fluides est proportionnelle à la courbure. En considérant une goutte statique, de forme circulaire à l'intérieur d'un canal bidimensionnel la loi de Laplace s'écrit :

$$\Delta P = \frac{\gamma}{R},$$

où ΔP est le saut de pression, γ est le coefficient de tension de surface et R est le rayon de courbure de l'interface.

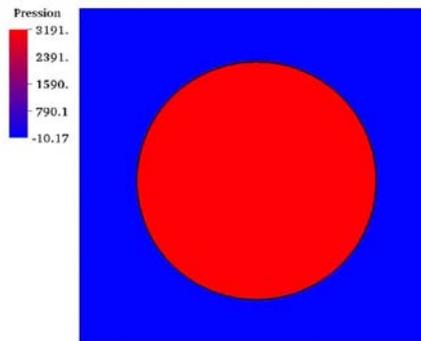


FIGURE 3.4 – Vérification de la loi de Laplace : champ de pression. Les paramètres de la simulation sont : $R = 10 \mu m$, $\eta_1 = 55 mPa.s$, $\eta_2 = 305 mPa.s$, $\gamma = 32 mN/m$. Maillage : 256×256 .

La viscosité du fluide à l'intérieur de la goutte est $\eta_1 = 55 \text{ mPa.s}$ et celle du fluide extérieur est de $\eta_2 = 305 \text{ mPa.s}$. Le débit d'injection est nul, le rayon de la goutte est $R = 10 \mu\text{m}$ et la tension de surface est $\gamma = 32 \text{ mN/m}$. Le maillage utilisé pour la simulation est de 256×256 mailles. La FIGURE 3.4 donne le champ de pression obtenue. La valeur théorique de la différence de pression donnée par la loi de Laplace est de 3200 Pa et la valeur numérique obtenue dans la simulation est 3201.17 Pa . Ce cas test nous permet de constater que le calcul de la courbure est satisfaisant.

3.5.3 Traitement de la loi de comportement

3.5.3.1 Splitting première étape

La loi de comportement est traitée en deux étapes, comme cela a été décrit dans la section 3.1. La première étape nécessite la résolution d'un problème de transport par chaque composante du tenseur de conformation $\boldsymbol{\tau}$, comme on peut le voir quand on développe le gradient bidimensionnel de (3.4) :

$$\begin{cases} \frac{\tau_{xx}^{n+1} - \tau_{xx}^n}{\Delta t} + u^{n+1} \frac{\partial \tau_{xx}^n}{\partial x} + v^{n+1} \frac{\partial \tau_{xx}^n}{\partial y} = 0, \\ \frac{\tau_{xy}^{n+1} - \tau_{xy}^n}{\Delta t} + u^{n+1} \frac{\partial \tau_{xy}^n}{\partial x} + v^{n+1} \frac{\partial \tau_{xy}^n}{\partial y} = 0, \\ \frac{\tau_{yy}^{n+1} - \tau_{yy}^n}{\Delta t} + u^{n+1} \frac{\partial \tau_{yy}^n}{\partial x} + v^{n+1} \frac{\partial \tau_{yy}^n}{\partial y} = 0. \end{cases} \quad (3.27)$$

La discrétisation spatiale de cette première étape est faite à l'aide du schéma WENO-5 qui est décrit de manière détaillée dans la section 3.5.4. Pour utiliser le schéma WENO-5, il est nécessaire de déterminer la vitesse dans les points où sont définies les variables à transporter. Pour cela, les interpolations linéaires suivantes sont nécessaires (cf. FIGURE 3.5) :

- Dans le cas des composantes τ_{xx} et τ_{yy} , il faut déterminer la vitesse au point (x_i, y_j) :

$$u_{i,j}^c = u(x_i, y_j) = \frac{u_{i,j} + u_{i+1,j}}{2}, \quad (3.28)$$

$$v_{i,j}^c = v(x_i, y_j) = \frac{v_{i,j} + v_{i,j+1}}{2}. \quad (3.29)$$

- Dans le cas de la composante τ_{xy} , il faut déterminer la vitesse au point $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}})$:

$$u_{i,j}^{xy} = u(x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}) = \frac{u_{i,j-1} + u_{i,j}}{2}, \quad (3.30)$$

$$v_{i,j}^{xy} = v(x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}) = \frac{v_{i,j} + v_{i-1,j}}{2}. \quad (3.31)$$

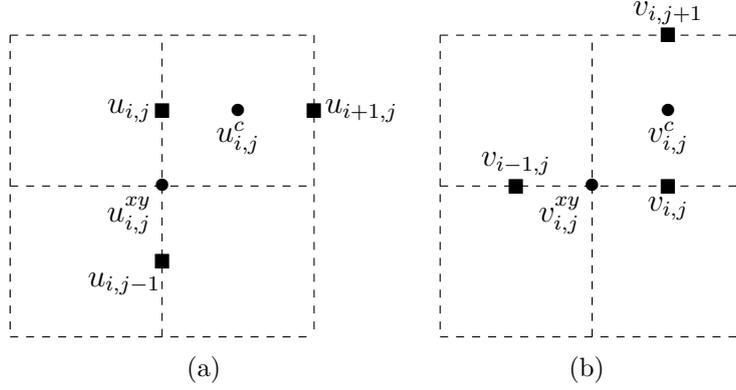


FIGURE 3.5 – Interpolations pour la première étape du splitting.

3.5.3.2 Splitting deuxième étape

On se concentre maintenant sur la discrétisation spatiale de la deuxième partie du splitting. Si on développe l'équation (3.5), on obtient :

$$\begin{cases} \frac{(\tau_{xx}^{n+1} - 1)}{\lambda(\phi^n)} + \frac{\tau_{xx}^{n+1} - \tau_{xx}^{n+1/2}}{\Delta t} - 2\frac{\partial u^n}{\partial x}\tau_{xx}^{n+1} - 2\frac{\partial u^n}{\partial y}\tau_{xy}^{n+1} = 0, \\ \frac{\tau_{xy}^{n+1}}{\lambda(\phi^n)} + \frac{\tau_{xy}^{n+1} - \tau_{xy}^{n+1/2}}{\Delta t} - \frac{\partial u^n}{\partial y}\tau_{yy}^{n+1} - \frac{\partial v^n}{\partial x}\tau_{xx}^{n+1} = 0, \\ \frac{(\tau_{yy}^{n+1} - 1)}{\lambda(\phi^n)} + \frac{\tau_{yy}^{n+1} - \tau_{yy}^{n+1/2}}{\Delta t} - 2\frac{\partial v^n}{\partial x}\tau_{xy}^{n+1} - 2\frac{\partial v^n}{\partial y}\tau_{yy}^{n+1} = 0. \end{cases} \quad (3.32)$$

Les composantes τ_{xx} et τ_{yy} sont positionnées au milieu des mailles et τ_{xy} au sommet (cf. FIGURE 3.2), en conséquence, la première équation de (3.32) est discrétisée au point (x_i, y_j) :

$$\frac{\tau_{xx,i,j}^{n+1}}{\Delta t} + \frac{\tau_{xx,i,j}^{n+1}}{\lambda_{i,j}^n} - 2\left(\frac{u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n}{\Delta x}\right)\tau_{xx,i,j}^{n+1} - 2\left(\frac{\bar{u}_{i,j+1}^n - \bar{u}_{i,j}^n}{\Delta y}\right)\tau_{xy,i,j}^{n+1} = \frac{\tau_{xx,i,j}^{n+1/2}}{\Delta t} + \frac{1}{\lambda_{i,j}^n}.$$

Où, $\bar{u}_{i,j}$ et $\tau_{xy,i,j}^c$ correspondent aux interpolations (cf. FIGURE 3.6) :

$$\bar{u}_{i,j} = u(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}) = \frac{u_{i,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i+1,j-1}}{4}, \quad (3.33)$$

$$\tau_{xy,i,j}^c = \tau_{xy}(x_i, y_j) = \frac{\tau_{xy,i,j} + \tau_{xy,i+1,j} + \tau_{xy,i+1,j+1} + \tau_{xy,i,j+1}}{4}. \quad (3.34)$$

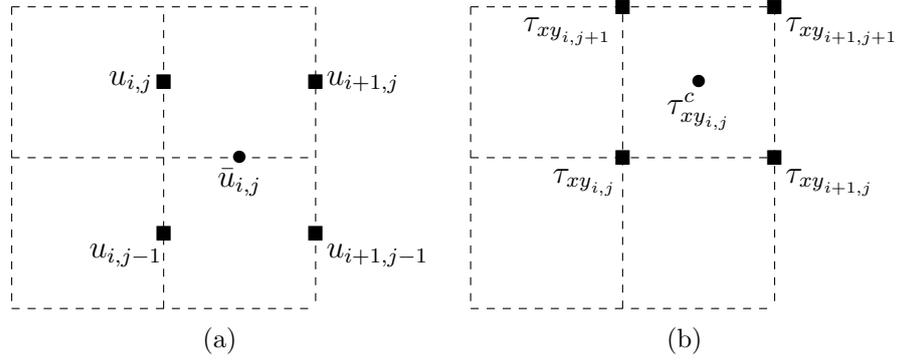


FIGURE 3.6 – Interpolations pour la deuxième étape du splitting, première équation du système (3.32).

La deuxième équation de (3.32) discrétisée au point $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}})$ se lit :

$$\frac{\tau_{xy_{i,j}}^{n+1}}{\Delta t} + \frac{\tau_{xy_{i,j}}^{n+1}}{\tilde{\lambda}_{i,j}^n} - \left(\frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y} \right) \tilde{\tau}_{yy_{i,j}}^{n+1} - \left(\frac{v_{i,j} - v_{i-1,j}}{\Delta x} \right) \tilde{\tau}_{xx_{i,j}}^{n+1} = \frac{\tau_{xy_{i,j}}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t}$$

Où $\tilde{\lambda}$, $\tilde{\tau}_{xx}$ et $\tilde{\tau}_{yy}$ sont les interpolations (cf. FIGURE 3.7) :

$$\tilde{\lambda}_{i,j} = \lambda(x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}) = \frac{\lambda_{i,j} + \lambda_{i-1,j} + \lambda_{i-1,j-1} + \lambda_{i,j-1}}{4}, \quad (3.35)$$

$$\tilde{\tau}_{xx_{i,j}} = \tau_{xx}(x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}) = \frac{\tau_{xx_{i,j}} + \tau_{xx_{i-1,j}} + \tau_{xx_{i-1,j-1}} + \tau_{xx_{i,j-1}}}{4}, \quad (3.36)$$

$$\tilde{\tau}_{yy_{i,j}} = \tau_{yy}(x_{i-\frac{1}{2}}, y_{j-\frac{1}{2}}) = \frac{\tau_{yy_{i,j}} + \tau_{yy_{i-1,j}} + \tau_{yy_{i-1,j-1}} + \tau_{yy_{i,j-1}}}{4}. \quad (3.37)$$

Et finalement, la dernière équation du système (3.32) discrétisée au point (x_i, y_j) est :

$$\frac{\tau_{yy_{i,j}}}{\Delta t} + \frac{\tau_{yy_{i,j}}}{\lambda_{i,j}} - 2 \left(\frac{\bar{v}_{i+1,j} - \bar{v}_{i,j}}{\Delta x} \right) \tau_{xy_{i,j}}^c - 2 \left(\frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{\Delta y} \right) \tau_{yy_{i,j}} = \frac{\tau_{yy_{i,j}}}{\Delta t} + \frac{1}{\lambda_{i,j}},$$

où τ_{xy}^c a été défini dans (3.34) et \bar{v} est donnée par l'interpolation (cf. FIGURE 3.8) :

$$\bar{v}_{i,j} = v(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j) = \frac{v_{i,j} + v_{i,j+1} + v_{i-1,j+1} + v_{i-1,j}}{4}. \quad (3.38)$$

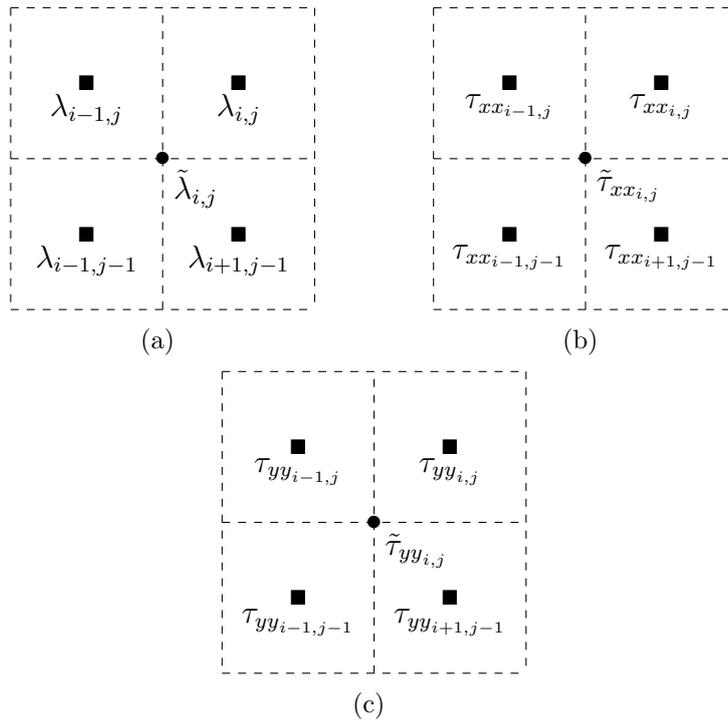


FIGURE 3.7 – Interpolations pour la deuxième étape du splitting, deuxième équation du système (3.32).

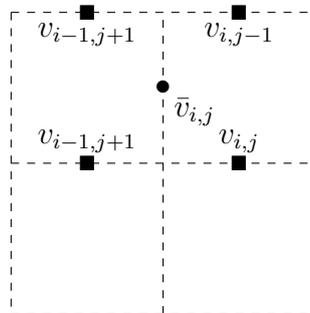


FIGURE 3.8 – Interpolations pour la deuxième étape du splitting, troisième équation du système (3.32).

3.5.3.3 Validation du code : schéma pour le tenseur de conformation

Afin de valider la méthode numérique décrite ci dessus pour la deuxième étape du splitting de la loi de comportement (la première étape est le schéma WENO-5 déjà validé), on s'intéresse au cas test suivant. On veut résoudre le problème :

$$\begin{cases} \frac{(\tau_{xx} - 1)}{\lambda} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial t} - 2 \frac{\partial u}{\partial x} \tau_{xx} - 2 \frac{\partial u}{\partial y} \tau_{xy} = f_1, \\ \frac{\tau_{xy}}{\lambda} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial t} - \frac{\partial y}{\partial y} \tau_{yy} - \frac{\partial v}{\partial x} \tau_{xx} = f_2, \\ \frac{(\tau_{yy} - 1)}{\lambda} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial t} - 2 \frac{\partial v}{\partial x} \tau_{xy} - 2 \frac{\partial v}{\partial y} \tau_{yy} = f_3. \end{cases} \quad (3.39)$$

où les composantes de la vitesse sont données par :

$$\begin{aligned} u(x, y) &= 1 + \cos(\pi y) + x, \\ v(x, y) &= -\frac{1}{2}(1 + \sin(\pi x)) - y, \end{aligned}$$

et la solution analytique par :

$$\begin{aligned} \tau_{xx}(x, y, t) &= \cos(\pi x) + \sin(\pi y), \\ \tau_{xy}(x, y, t) &= \cos(\pi x) - 2 \sin(\pi y), \\ \tau_{yy}(x, y, t) &= 2 \cos(\pi x) \sin(\pi y). \end{aligned}$$

Puis f_1 , f_2 et f_3 sont calculées à partir de (3.39). Dans le but d'évaluer l'ordre d'approximation, nous calculons l'erreur entre la solution approchée et la solution analytique pour des maillages de plus en plus fins. Nous utilisons l'erreur relative L^2 :

$$E(\tau) = \sqrt{\frac{\sum_{i,j} |\tau_{exact}(i, j) - \tau_{approche}(i, j)|^2}{\sum_{i,j} |\tau_{exact}(i, j)|^2}}. \quad (3.40)$$

Le tableau 3.1 et les graphiques montrés dans la FIGURE 3.10 résument les tests d'erreur pour quatre maillages différents. On constate que la méthode décrite pour la résolution du tenseur de conformation permet d'approcher la solution à l'ordre 2.

Maillage	$E(\tau_{xx})$	Ordre	$E(\tau_{xy})$	Ordre	$E(\tau_{yy})$	Ordre
16 × 16	1.108×10^{-2}		5.808×10^{-3}		3.194×10^{-3}	
32 × 32	2.784×10^{-3}	1.989	1.434×10^{-3}	2.025	8.022×10^{-4}	1.990
64 × 64	6.968×10^{-4}	1.997	3.559×10^{-4}	2.014	2.007×10^{-4}	1.998
128 × 128	1.742×10^{-4}	2.001	8.862×10^{-5}	2.008	5.021×10^{-5}	1.998

TABLE 3.1 – Précision de la méthode numérique pour la deuxième étape du splitting pour l'équation du tenseur de conformation.

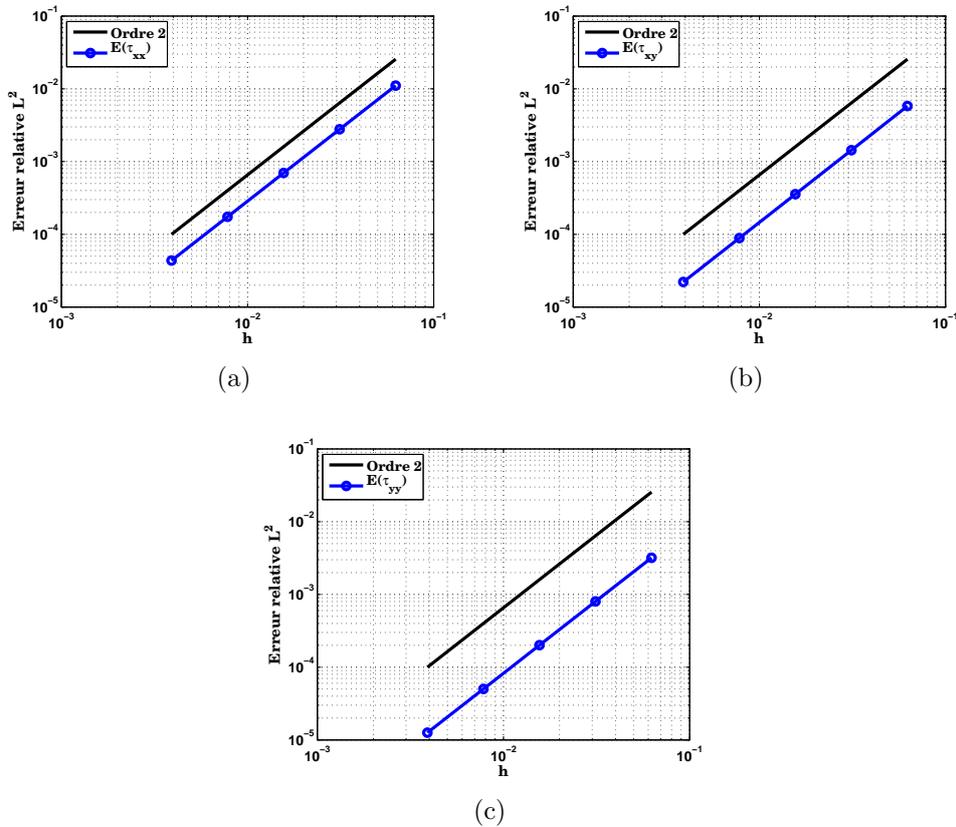


FIGURE 3.9 – Vérification de l'ordre de l'erreur commise lors de la résolution numérique de (3.32).

3.5.3.4 Validation du code : Écoulement dans un canal, comparaison avec la solution analytique

Avec ce cas test, on se propose de vérifier la solution à l'état stationnaire du modèle Oldroyd-B dans un canal. Pour cela, on considère l'écoulement d'un fluide viscoélastique dans un canal. La géométrie utilisée est celle montrée dans la FIGURE 4.1. Les valeurs adimensionnées du domaine sont $L_x = 2.5$, $L_y = 12.5$ et $L_c = 1$. Au bord d'entrée, la vitesse d'injection est $v_{inj} = 0.4$. Les viscosités sont $\eta = 1/9$ et $\eta_p = 8/9$ et le maillage est de 192×960 mailles. Les simulations sont menées pour trois différentes valeurs de λ . Après avoir atteint l'état stationnaire, nous examinons la composante v de la vitesse et les composantes du tenseur τ_{xx} , τ_{xy} et τ_{yy} , en faisant une coupe horizontale au milieu du canal. A l'état stationnaire, la vitesse et les composantes du tenseur doivent vérifier (cf. Annexe A) :

$$\left\{ \begin{array}{l} u(y) = 0, \\ v(x) = 6(x - x^2), \\ \tau_{xx} = 1, \\ \tau_{xy} = \lambda \frac{\partial v}{\partial x}, \\ \tau_{yy} = 1 + 2\lambda^2 \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right). \end{array} \right.$$

La comparaison des résultats obtenus avec la solution analytique est présentée dans la FIGURE 3.10. Les résultats numériques sont en très bon accord avec la solution exacte.

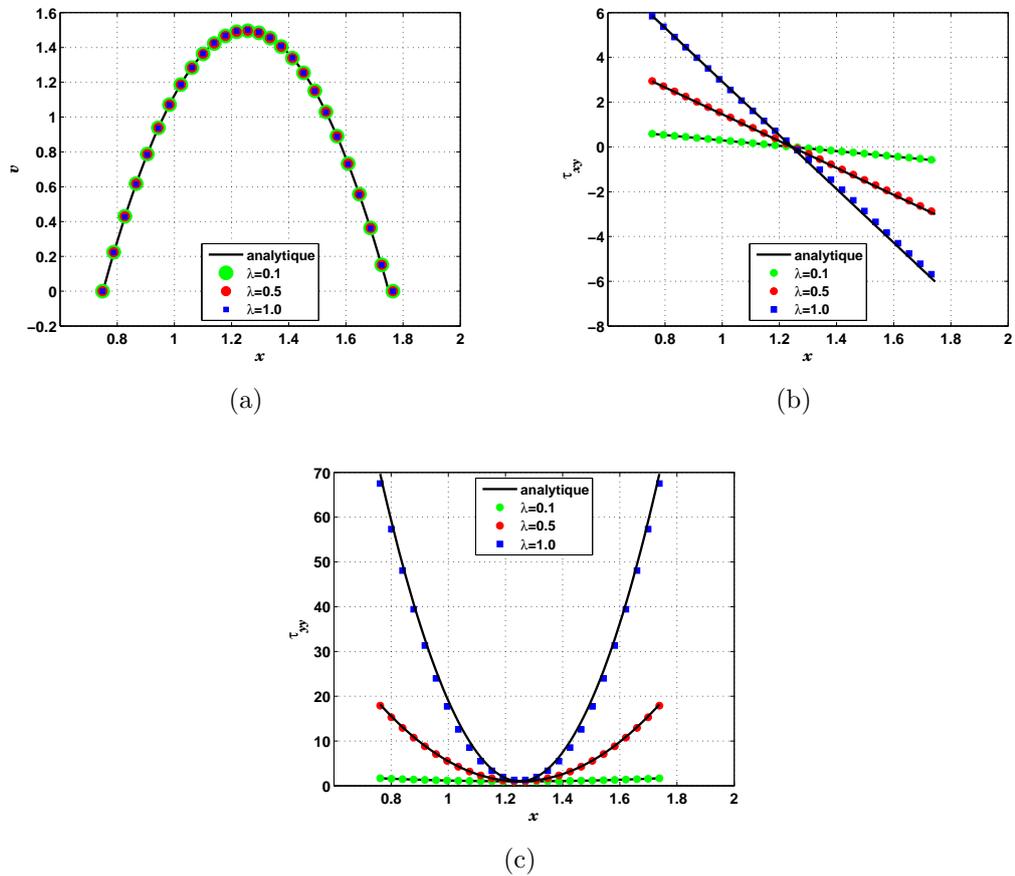


FIGURE 3.10 – Solution stationnaire du modèle Oldroyd-B dans un canal. Profils de (a) $v(x)$, (b) τ_{xy} et (c) τ_{yy} pour une coupe horizontale au milieu du canal.

3.5.4 Équation de Transport

Nous décrivons maintenant la discrétisation spatiale de l'équation de transport de la fonction Level-Set :

$$\frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} + u^{n+1} \frac{\partial \phi^n}{\partial x} + v^{n+1} \frac{\partial \phi^n}{\partial y} = 0. \quad (3.41)$$

On se place dans un maillage deux fois plus fin que le maillage utilisé pour résoudre les équations de Stokes. Alors les pas de discrétisation en espace sont $\frac{\Delta x}{2}$ et $\frac{\Delta y}{2}$ dans les directions x et y , respectivement. Les points (x_k, y_l) sont les sommets des mailles définis par :

$$(x_k, y_l) = \left((k-1) \frac{\Delta x}{2}, (l-1) \frac{\Delta y}{2} \right) \quad \text{pour } k = 1, \dots, 2Nx + 1 \text{ et } j = 1, \dots, 2Ny + 1$$

Les deux composantes de la vitesse et la fonction Level-Set sont prises aux sommets des mailles (cf. FIGURE 3.11) :

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_{k,l} &= \tilde{\phi}(x_k, y_l), \\ \tilde{u}_{k,l} &= u(x_k, y_l), \\ \tilde{v}_{k,l} &= v(x_k, y_l). \end{aligned}$$

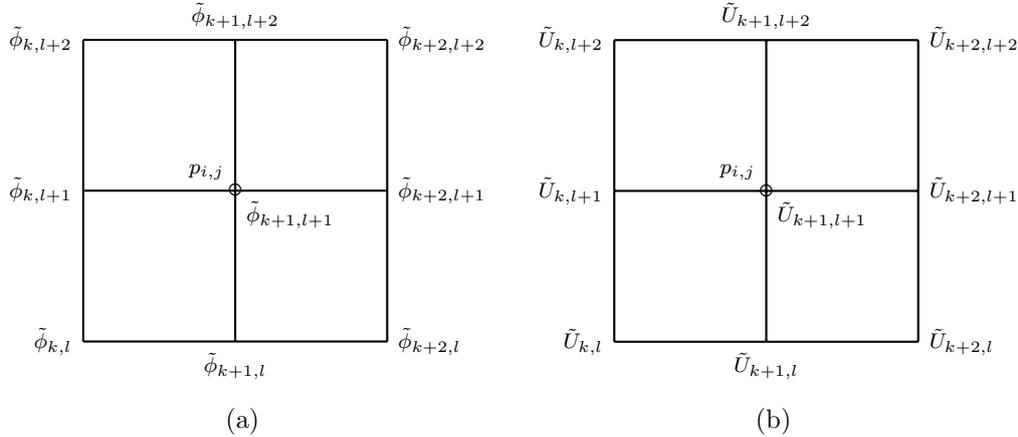


FIGURE 3.11 – Maillage deux fois plus fin.

Pour calculer \tilde{u} et \tilde{v} aux sommets de ce maillage, on a besoin d'interpoler les composantes u et v de la vitesse obtenue suite à la résolution des équations de Stokes. La procédure suivie pour faire ces interpolations est décrite dans l'Annexe B. Pour alléger les notations, on omet momentanément l'indice $n + 1$ de la vitesse.

Une approche décentrée est adoptée pour le calcul des dérivées en espace de l'équation (3.41). Le schéma tient compte de la direction de l'écoulement. En effet,

$$\begin{cases} \text{Si } \tilde{u}_{k,l} > 0, \text{ alors } \frac{\partial \tilde{\phi}^n}{\partial x} = \frac{\partial \tilde{\phi}^-}{\partial x}, \\ \text{Si } \tilde{u}_{k,l} < 0, \text{ alors } \frac{\partial \tilde{\phi}^n}{\partial x} = \frac{\partial \tilde{\phi}^+}{\partial x}, \end{cases} \quad (3.42)$$

même chose pour $\frac{\partial \tilde{\phi}^n}{\partial y}$.

Les dérivées $\frac{\partial \tilde{\phi}^{n+}}{\partial x}$ et $\frac{\partial \tilde{\phi}^{n-}}{\partial x}$ sont calculées à l'aide du schéma WENO-5. Le schéma WENO-5 (Weighed Essentially Non Oscillatory d'ordre 5), proposé par Liu et coauteurs dans [47], est basé sur le schéma ENO (Essentially non-Oscillatory) [35]. L'idée principale des schémas ENO est de calculer les flux au bord des cellules à l'aide des interpolations qualifiées de "essentiellement non-oscillantes" sur le stencil où le polynôme est le plus régulier, afin d'augmenter la précision et d'éviter les oscillations près des chocs. Pour cela, ils ont proposé d'utiliser une combinaison convexe de tous les stencils possibles plutôt que de n'en retenir qu'un. Chaque candidat se voit affecté d'un poids qui détermine sa contribution. La version WENO de Liu et coauteurs, propose des schémas d'ordre 3 ou 4. Jiang et Shu [40] améliorent la méthode en créant une nouvelle mesure de la régularité et de nouveaux poids pour la combinaison convexe; cela a permis de monter à 5 l'ordre des schémas.

Le schéma WENO-5 est construit selon l'algorithme qui suit (l'indice associé à la discrétisation temporelle est omis).

1. Pour déterminer $\frac{\partial \tilde{\phi}^-}{\partial x}$, on pose

$$\begin{aligned} F_1^- &= \frac{\tilde{\phi}_{i-2,j} - \tilde{\phi}_{i-3,j}}{\Delta x}, \\ F_2^- &= \frac{\tilde{\phi}_{i-1,j} - \tilde{\phi}_{i-2,j}}{\Delta x}, \\ F_3^- &= \frac{\tilde{\phi}_{i,j} - \tilde{\phi}_{i-1,j}}{\Delta x}, \\ F_4^- &= \frac{\tilde{\phi}_{i+1,j} - \tilde{\phi}_{i,j}}{\Delta x}, \\ F_5^- &= \frac{\tilde{\phi}_{i+2,j} - \tilde{\phi}_{i+1,j}}{\Delta x}. \end{aligned}$$

Et pour $\frac{\partial \tilde{\phi}^+}{\partial x}$,

$$\begin{aligned} F_1^+ &= \frac{\tilde{\phi}_{i+3,j} - \tilde{\phi}_{i+2,j}}{\Delta x}, \\ F_2^+ &= \frac{\tilde{\phi}_{i+2,j} - \tilde{\phi}_{i+1,j}}{\Delta x}, \\ F_3^+ &= \frac{\tilde{\phi}_{i+1,j} - \tilde{\phi}_{i,j}}{\Delta x}, \\ F_4^+ &= \frac{\tilde{\phi}_{i,j} - \tilde{\phi}_{i-1,j}}{\Delta x}, \\ F_5^+ &= \frac{\tilde{\phi}_{i-1,j} - \tilde{\phi}_{i-2,j}}{\Delta x}. \end{aligned}$$

2. On calcule les coefficients de régularité :

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{13}{12} (F_1 - 2F_2 + F_3)^2 + \frac{1}{4} (F_1 - 4F_2 + 3F_3)^2, \\ S_2 &= \frac{13}{12} (F_2 - 2F_3 + F_4)^2 + \frac{1}{4} (F_2 - F_4)^2, \\ S_3 &= \frac{13}{12} (F_3 - 2F_4 + F_5)^2 + \frac{1}{4} (3F_3 - 4F_4 + F_5)^2. \end{aligned}$$

3. On définit les poids

$$w_1 = \frac{a_1}{a_1 + a_2 + a_3}, w_2 = \frac{a_2}{a_1 + a_2 + a_3}, w_3 = \frac{a_3}{a_1 + a_2 + a_3},$$

où

$$a_1 = \frac{1}{10} \frac{1}{(\epsilon + S_1)^2}, a_2 = \frac{6}{10} \frac{1}{(\epsilon + S_2)^2}, a_3 = \frac{3}{10} \frac{1}{(\epsilon + S_3)^2}$$

et

$$\epsilon = 10^{-6} \max(F_1^2, F_2^2, F_3^2, F_4^2, F_5^2)$$

4. Finalement, on peut calculer

$$\frac{\partial \tilde{\phi}^{+,-}}{\partial x} = w_1 \left(\frac{F_1}{3} - \frac{7F_2}{6} + \frac{11F_3}{6} \right) + w_2 \left(-\frac{F_2}{6} + \frac{5F_3}{6} + \frac{F_4}{3} \right) + w_3 \left(\frac{F_3}{3} + \frac{5F_4}{6} - \frac{F_5}{6} \right)$$

On a besoin de trois points fictifs à l'extérieur du domaine. Ces points seront évalués à l'aide d'une extrapolation linéaire.

3.6 Redistanciation

L'équation de transport de la Level-Set a été construite telle que la fonction ϕ soit advectée par le champ de vitesse local. À moins que la vitesse \mathbf{U} soit la même pour toutes les lignes de niveau cette procédure implique qu'au cours des itérations en temps $|\nabla\phi| \neq 1$. Alors la propriété de distance signée donnée initialement à la fonction Level Set n'est plus respectée. De nombreux problèmes peuvent surgir à cause de la perte de cette propriété, comme par exemple le calcul erroné de la normale à l'interface ou l'apparition de zones où ϕ présente de forts gradients pouvant provoquer des instabilités numériques. En conséquence, il est nécessaire de corriger la perte de cette propriété. C'est dans 1993 que Chopp [15] introduit le concept de *réinitialisation de la fonction Level Set*. Le principe est de recalculer périodiquement la fonction ϕ afin de lui donner la propriété de fonction distance signée, sans altérer la position de l'interface. Dans ce travail la méthode de Fast Marching pour la réinitialisation de la fonction Level Set est utilisée.

3.6.1 Méthode Fast Marching

La méthode de Fast Marching, présentée par Sethian en 1996 [63], consiste à résoudre le problème suivant :

$$\begin{cases} |\nabla\phi| = 1, \\ \phi = 0 \text{ sur } \Sigma. \end{cases} \quad (3.43)$$

Pour la résolution numérique de (3.43), on utilise le schéma suggéré par Sethian dans [63].

$$\left[\max \left(\max \left(D_{i,j}^{-x} \phi, 0 \right), -\min \left(D_{i,j}^{+x} \phi, 0 \right) \right)^2 + \max \left(\max \left(D_{i,j}^{-y} \phi, 0 \right), -\min \left(D_{i,j}^{+y} \phi, 0 \right) \right)^2 \right] = 1 \quad (3.44)$$

où,

$$\begin{aligned} D_{i,j}^{+x} \phi &= \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{\Delta x}, & D_{i,j}^{-x} \phi &= \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}{\Delta x} \\ D_{i,j}^{+y} \phi &= \frac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j}}{\Delta y}, & D_{i,j}^{-y} \phi &= \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}}{\Delta y} \end{aligned}$$

Le principe de la méthode du Fast Marching consiste à recalculer les valeurs ϕ dans un certain ordre pour obtenir une convergence en une seule itération. Dans ce but, les points du maillage sont répartis dans trois régions (cf. FIGURE 3.12) :

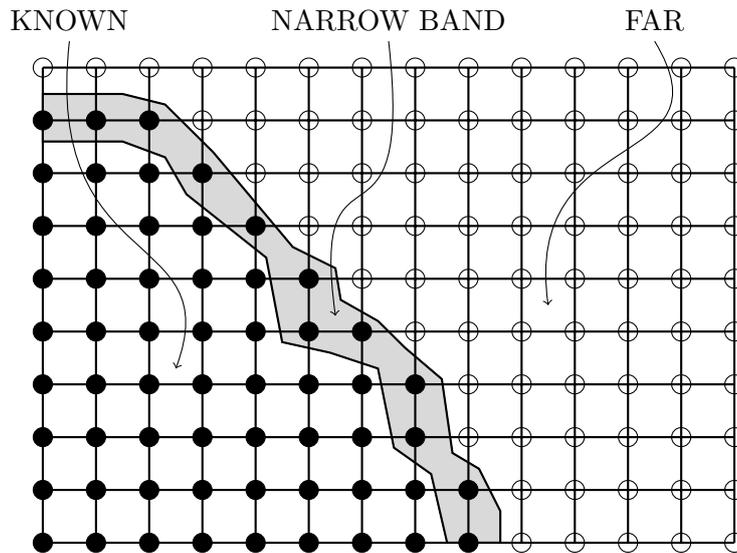


FIGURE 3.12 – Description des ensembles pour la méthode Fast-marching

- **Known (K)** : la région des points déjà calculés.
- **Narrow band (NB)** : la région des points n'ayant pas encore été calculés, mais sur le point de l'être. Ces points se trouvent à une distance de **K** inférieure ou égale au pas d'espace.
- **Far (F)** : la région correspondant aux autres points.

On décrit l'algorithme pour les points (i, j) tel que $\phi(i, j) > 0$. Une simple multiplication par -1 permettra de traiter les points où $\phi(i, j) < 0$. L'algorithme est le suivant :

1. **Phase d'initialisation** : Dans l'étape d'initialisation, on crée les ensembles **NB**, **K** et **F**. Pour cela, on procède de la manière suivante. On définit **NB** comme les points de signe positif qui ont au moins un voisin négatif dans la direction horizontale ou dans la direction verticale. L'ensemble **F** est composé des autres points positifs, qui seront affectés de la valeur $+\infty$ en machine. Les points restants, c'est à dire, les négatifs, appartiendront à l'ensemble **K**.
2. **Phase itérative** :
 - (a) On cherche le point (i_{min}, j_{min}) ayant la plus petite valeur de ϕ dans la Narrow Band (**NB**). On ajoute ce point dans **K** et on le supprime de **NB**.
 - (b) Ensuite, on recalcule la valeur de ϕ sur les points voisins de (i_{min}, j_{min}) qu'ils soient dans **NB** ou **F** en utilisant le schéma (3.44).
 - (c) On ajoute ces voisins recalculés dans **NB** s'ils n'y étaient pas.

3.6.2 Validation : test du serpent

Le test du serpent introduit par Bell et al. [4], permet de valider la capacité de la méthode de suivi d'interface pour capturer de fines structures. Ce cas test est sévère car le ligament s'étire de manière infinie avec le temps. On considère un domaine $[0, 1] \times [0, 1]$, l'interface est initialisée comme un cercle de rayon 0.2 et centrée au point $(0.25, 0.75)$. On définit un champ de vitesse tournoyant stationnaire de la manière suivante :

$$\begin{cases} \varphi &= \frac{1}{\pi} \sin^2(\pi x) \sin^2(\pi y), \\ u &= -\frac{\partial \varphi}{\partial y}, \\ v &= \frac{\partial \varphi}{\partial x}. \end{cases}$$

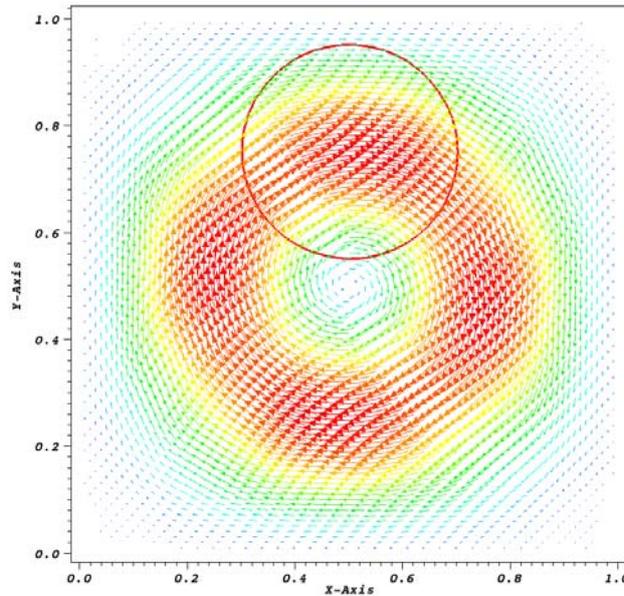
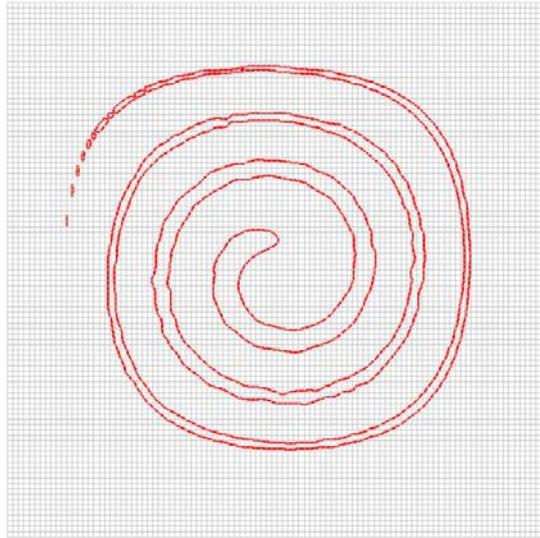
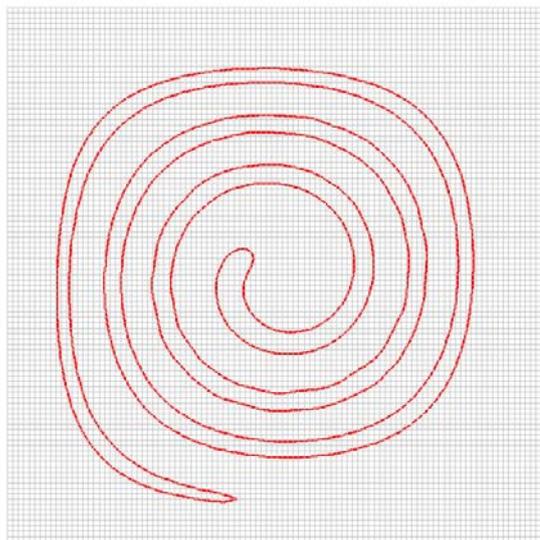


FIGURE 3.13 – Test du serpent : Champ de vitesse et profil de départ (cercle de rayon 0.2 et centré au point $(0.25, 0.75)$).

Sur la FIGURE 3.13 sont représentés le champ de vitesse et le profil de départ de la Level Set. Le champ de vitesse ayant les caractéristiques d'un tourbillon centré sur $(0.5, 0.5)$ va déformer le cercle initial pour former ce qu'on appelle un serpent. Deux tests sont réalisés dans un maillage 100×100 : un premier sans redistanciation et l'autre avec l'algorithme de redistanciation du Fast Marching. La FIGURE 3.12 présente les résultats obtenus après quelques itérations en temps.



(a) Sans algorithme de redistanciation



(b) Avec l'algorithme de redistanciation

FIGURE 3.14 – Test du serpent.

Ce test numérique met en avant le principal défaut de la méthode Level Set : la perte de masse. On remarque dans la FIGURE 3.14 que lorsque l'on utilise un algorithme de réinitialisation, comme le Fast Marching, l'espacement entre les lignes de niveau est respectée, ce qui améliore les propriétés de la méthode Level Set. D'après ce test, la méthode Level-Set couplée à l'algorithme de redistanciation, peut être considérée efficace pour représenter des interfaces très étirées. Elle permet de garder la continuité de l'interface et de bien la représenter, même lorsqu'on atteint des dimensions qui sont du même ordre que la dimension de la maille.

3.7 Traitement du point triple

Dans les simulations des écoulements diphasiques dans un réseau de microcanaux, l'interface fluide/fluide avance dans chacune de branches du réseau et en conséquence, de nombreux points triples peuvent se présenter pendant un même instant de temps. Par exemple, sur la FIGURE 3.15 la dynamique de six points triples différents doit être modélisée en parallèle (deux dans le canal horizontal à gauche, deux dans le canal horizontal à droite et deux dans le canal vertical supérieur). La modélisation de la dynamique de chaque point triple est indépendante et elle comporte une première étape de détection.

3.7.1 Détection d'un point triple

En se servant de la fonction Level-Set et de la méthode de pénalisation, l'idée générale de la détection, consiste à trouver deux points solides du maillage où il y a un changement de signe de la fonction Level-Set. Alors, le point triple est localisé entre ces deux nœuds solides. La FIGURE 3.16 illustre les différents cas de point triple qui peuvent se présenter lors de la simulation dans un réseau de microcanaux. Toute la gestion des points triples est réalisée sur le maillage deux fois plus fin, cela explique la notation $\tilde{\phi}$ pour la fonction Level-Set et pas ϕ . La démarche suivie lors de la détection est la suivante :

- Sur une paroi verticale (cf. FIGURE 3.16(a)) :

```

if les points  $(k, l)$  et  $(k, l + 1)$  sont solides then
  if  $\tilde{\phi}_{k,l} < 0$  et  $\tilde{\phi}_{k,l+1} > 0$  then
     $(k, l)$  est un point triple sur une PAROI VERTICALE
  end if
end if

```

– Sur une paroi horizontale, écoulement vers la gauche (cf. FIGURE 3.16(b)) :

```

if les points  $(k, l)$  et  $(k - 1, l)$  sont solides then
  if  $\tilde{\phi}_{k,l} < 0$  et  $\tilde{\phi}_{k-1,l} > 0$  then
     $(k, l)$  est un point triple sur une PAROI HORIZONTALE
  end if
end if

```

– Sur une paroi horizontale, écoulement vers la droite (cf. FIGURE 3.16(c)) :

```

if les points  $(k, l)$  et  $(k + 1, l)$  sont solides then
  if  $\tilde{\phi}_{k,l} < 0$  et  $\tilde{\phi}_{k+1,l} > 0$  then
     $(k, l)$  est un point triple sur une PAROI HORIZONTALE
  end if
end if

```

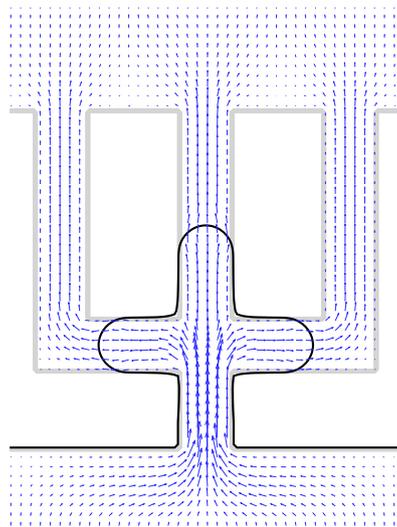


FIGURE 3.15 – Détection du point triple dans un réseau de microcanaux. Dans ce réseau, six points triples sont présents : deux dans le canal horizontal à gauche, deux dans le canal horizontal à droite et deux dans le canal vertical supérieur

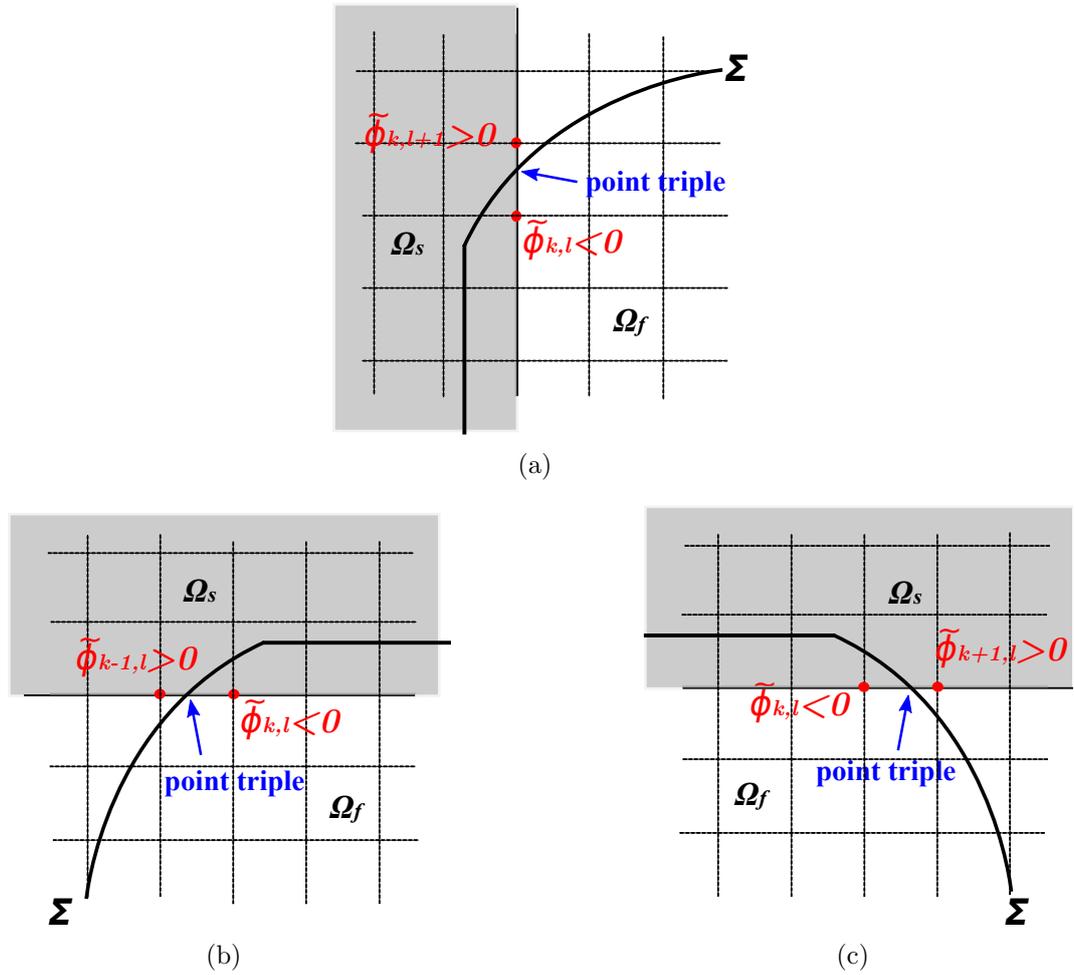


FIGURE 3.16 – Détection du point triple (a) sur une paroi verticale, (b) sur une paroi horizontale, écoulement vers la gauche et (c) sur une paroi horizontale, écoulement vers la droite.

3.7.2 Calcul de l'angle de contact

A chaque itération en temps, l'angle de contact doit être calculé pour tous les points triples présents dans le domaine de calcul. La FIGURE 3.17 présente le cas où le point triple se trouve sur une paroi verticale. Le calcul de l'angle de contact est fait à partir de la normale à l'interface en suivant les deux pas suivants :

1. Dans un premier temps, une interpolation linéaire est nécessaire pour calculer la normale localisée au niveau du point triple. On note $\mathbf{n} = (n^x, n^y)$ la normale définie aux sommets des mailles dans le maillage deux fois plus fin et $\mathbf{n}^* = (n^{x^*}, n^{y^*})$ la normale interpolée au point triple. Si le point triple est localisé entre les points (x_k, y_l) et (x_k, y_{l+1}) , les composantes de \mathbf{n}^* sont calculées par :

$$n^{x*} = n_{k,l}^x - \tilde{\phi}_{k,l} \frac{n_{k,l+1}^x - n_{k,l}^x}{\tilde{\phi}_{k,l+1} - \tilde{\phi}_{k,l}},$$

$$n^{y*} = n_{k,l}^y - \tilde{\phi}_{k,l} \frac{n_{k,l+1}^y - n_{k,l}^y}{\tilde{\phi}_{k,l+1} - \tilde{\phi}_{k,l}}.$$

2. L'angle de contact θ_d est calculé à l'aide de la normale par :

$$\sin(\alpha) = \frac{n^{y*}}{\sqrt{n^{x*2} + n^{y*2}}} \quad \text{et} \quad \theta_d = \pi - \alpha. \quad (3.45)$$

Une procédure similaire est appliquée dans le cas où le point triple se trouve sur une paroi horizontale.

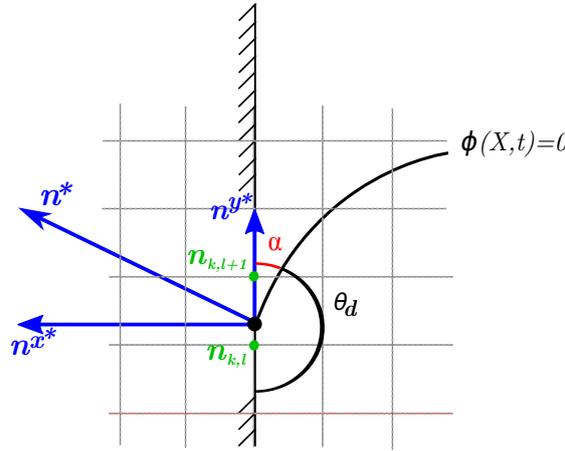


FIGURE 3.17 – Calcul de l'angle de contact dans le cas où le point triple se trouve sur une paroi verticale.

3.7.3 Traitement de la vitesse du point triple

Dans la section 1.2 on a introduit le modèle de Cox, utilisé pour la modélisation de la dynamique du point triple. Lorsque l'angle de contact dépasse une certaine valeur, le point triple se déplace. Pour cela, les équations de Stokes sont résolues avec une condition de glissement au voisinage du point triple. Cela permet de lier le mouvement du point triple aux équations de l'hydrodynamique. Cette condition de glissement est imposée par une méthode de pénalisation. Pour cela, on ajoute à l'équation de conservation de la quantité de mouvement le terme de pénalisation $\frac{\mathbf{U} - V_d}{K}$. L'équation de conservation de la quantité de mouvement devient :

$$-\nabla p + \nabla \cdot (2\eta(\phi)\mathbf{D}(\mathbf{U})) + \nabla \cdot \left(\frac{\eta_p(\phi)}{\lambda(\phi)} \boldsymbol{\tau} \right) - \gamma \kappa(\phi) \delta(\phi) \nabla \phi + \frac{\mathbf{U} - V_d}{K} = \mathbf{0}, \quad (3.46)$$

où V_d est définie de la manière suivante :

$$V_d = \begin{cases} 0 & \text{si } \theta_r < \theta_d < \theta_a, \\ \sum_{i=1}^{ntriples} (V_{cox})_i \delta_i & \text{sinon,} \end{cases} \quad (3.47)$$

où $ntriples$ est le nombre total de points triples dans le domaine. Afin de décrire la discrétisation du terme de pénalisation, on introduit les notations suivantes :

- \mathcal{T}_f : le maillage sur lequel est discrétisée l'équation de transport de la fonction Level-Set (deux fois plus fin que \mathcal{T}_M).
- \mathcal{T}_M : le maillage MAC sur lequel est discrétisée l'équation de Stokes.
- N : maille appartenant à \mathcal{T}_f et contenant le point triple. L'indice associé à cette maille est (k, l) .
- \mathcal{S} : une partie du stencil du schéma WENO-5 pour discrétiser l'équation de transport de la Level-Set sur la maille N .

Supposons que le point triple soit localisé sur une paroi verticale. Alors l'ensemble \mathcal{S} est $\{(k, l+3), (k, l+2), (k, l+1), (k, l), (k, l-3), (k, l-2), (k, l-1)\}$. Par expérience numérique, on constate que l'angle de contact se stabilise si la vitesse de glissement du point triple, V_{cox} , est imposée sur les mailles de \mathcal{T}_M , utilisées pour interpoler le champ de vitesse sur les nœuds appartenant à \mathcal{S} . Ce nombre de mailles varie suivant la position du point triple et deux situations peuvent se présenter :

1. soit le point triple est au coin d'un volume de contrôle V_p (cf. FIGURE 3.18(a)),
2. soit le point triple est au milieu de l'arête de V_p (cf. FIGURE 3.18(b)).

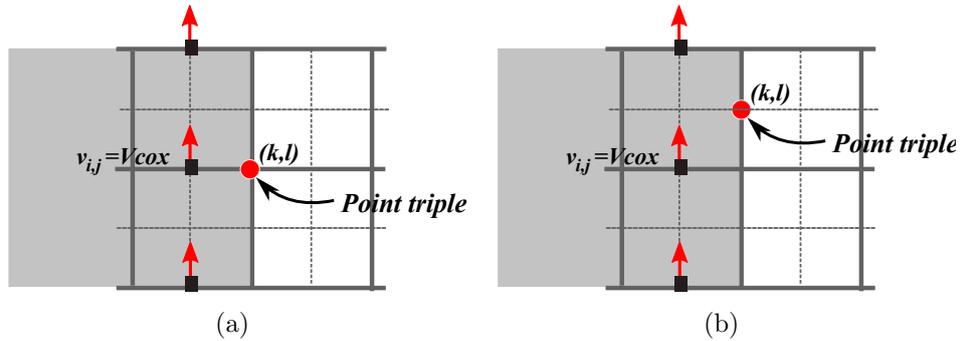
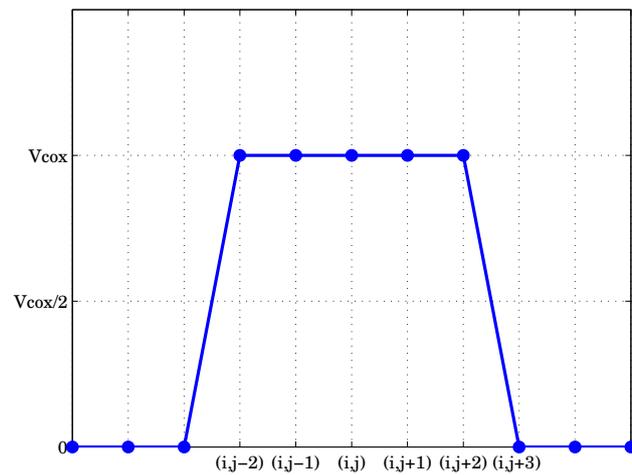
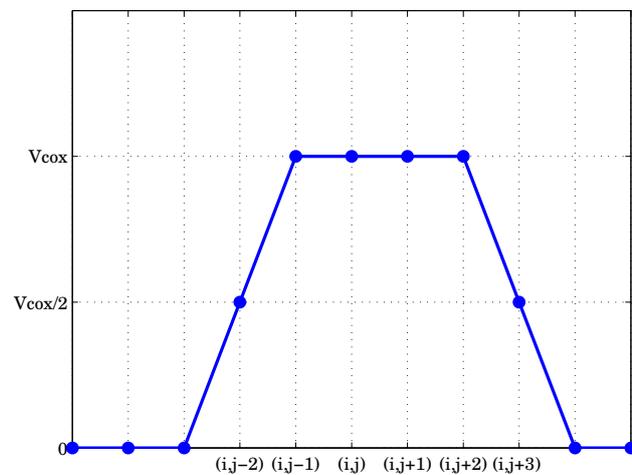


FIGURE 3.18 – Cas d'un point triple qui glisse sur une paroi verticale. La région colorée en gris correspond à la partie solide du domaine et les lignes pointillées correspondent au maillage deux fois plus fin. (a) Le point triple est au coin d'un volume de contrôle V_p (b) le point triple est au milieu de l'arête du volume de contrôle V_p .

La FIGURE 3.19 montre la façon d'imposer V_{cox} selon les deux cas énoncés précédemment. Même si ce nombre de mailles varie, l'aire sous la courbe reste constante.



(a)



(b)

FIGURE 3.19 – Imposition de la vitesse V_{cox} dans le cas d'un point triple qui glisse sur une paroi verticale. (a) Le point triple est au coin du volume de contrôle V_p (b) le point triple est au milieu de l'arête du volume de contrôle V_p .

3.8 Traitement des conditions aux limites

On se propose maintenant de détailler le traitement numérique des conditions aux limites.

3.8.1 Condition d'entrée

Au bord d'injection $\partial\Omega_e$ on a les conditions suivantes (cf. Section 2.6) :

$$\left\{ \begin{array}{l} u|_{\partial\Omega_e} = 0 \\ v|_{\partial\Omega_e} = v_{inj} \\ \tau_{xx}|_{\partial\Omega_e} = 1 \\ \tau_{xy}|_{\partial\Omega_e} = 0 \\ \tau_{yy}|_{\partial\Omega_e} = 1 \end{array} \right. \quad (3.48)$$

Les nœuds $v_{i,1}$ et $\tau_{xy_{i,1}}$ coïncident avec le bord d'entrée, donc, ils se voient affectés par une condition de Dirichlet. On écrit alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} v_{i,1} = v|_{\partial\Omega_e} = v_{inj} \\ \tau_{xy_{i,1}} = \tau_{xy}|_{\partial\Omega_e} = 0 \end{array} \right. \quad (3.49)$$

Quant aux nœuds en u , τ_{xx} et τ_{yy} lesquels ne coïncident pas avec le bord d'entrée, on utilise la condition au bord pour écrire les interpolations suivantes, qui nous permettront d'évaluer ces variables dans des nœuds fictifs à l'extérieur du domaine, nécessaires pour l'écriture des schémas numériques :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{u_{i,0} + u_{i,1}}{2} = 0 \\ \frac{\tau_{xx_{i,0}} + \tau_{xx_{i,1}}}{2} = 1 \\ \frac{\tau_{yy_{i,0}} + \tau_{yy_{i,1}}}{2} = 1 \end{array} \right. \quad (3.50)$$

3.8.2 Conditions périodiques

On se sert des conditions périodiques utilisés aux bords gauche et droit, pour calculer des points fictifs à l'extérieur du domaine de la manière suivante :

– Bord gauche

$$\left\{ \begin{array}{l} u_{0,j} = u_{Nx,j} \\ v_{0,j} = v_{Nx,j} \\ \tau_{xx_{0,j}} = \tau_{xx_{Nx,j}} \\ \tau_{xy_{0,j}} = \tau_{xy_{Nx,j}} \\ \tau_{yy_{0,j}} = \tau_{yy_{Nx,j}} \end{array} \right. \quad (3.51)$$

– Bord droit :

$$\begin{cases} u_{Nx+2,j} = u_{2,j} \\ v_{Nx+1,j} = v_{1,j} \\ \tau_{xx_{Nx+1,j}} = \tau_{xx_{1,j}} \\ \tau_{xy_{Nx+2,j}} = \tau_{xy_{2,j}} \\ \tau_{yy_{Nx+1,j}} = \tau_{yy_{1,j}} \end{cases} \quad (3.52)$$

3.8.3 Condition de sortie

On a vu dans la Section 2.6 que la condition de sortie pour le fluide 1 s'écrit :

$$\begin{cases} \eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) = \eta^{ref} \left(\frac{\partial u^{ref}}{\partial y} + \frac{\partial v^{ref}}{\partial x} \right), \\ -p + 2\eta \frac{\partial v}{\partial y} = -p^{ref} + 2\eta^{ref} \frac{\partial v^{ref}}{\partial y}, \end{cases} \quad (3.53)$$

et pour le fluide 2 :

$$\begin{cases} \eta \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\eta_p}{\lambda} \tau_{xy} = \eta^{ref} \left(\frac{\partial u^{ref}}{\partial y} + \frac{\partial v^{ref}}{\partial x} \right) + \frac{\eta_p^{ref}}{\lambda^{ref}} \tau_{xy}^{ref}, \\ -p + 2\eta \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\eta_p}{\lambda} (\tau_{yy} - 1) = -p^{ref} + 2\eta^{ref} \frac{\partial v^{ref}}{\partial y} + \frac{\eta_p^{ref}}{\lambda^{ref}} (\tau_{yy}^{ref} - 1), \\ \tau_{xx} = \tau_{xx}^{ref}, \\ \tau_{xy} = \tau_{xy}^{ref}, \\ \tau_{yy} = \tau_{yy}^{ref}. \end{cases}$$

Si on prend la solution proche du bord de sortie comme l'écoulement de référence, alors au bord de sortie on a la discrétisation suivante :

Pour le fluide 1 :

$$\begin{aligned} u_{i,Ny+1} &= u_{i,Ny} - \Delta y \left(\frac{v_{i,Ny+1} - v_{i-1,Ny+1}}{\Delta x} \right) \\ &\quad + \Delta y \frac{\eta_{i,Ny}}{\eta_{i,Ny+1}} \left(\frac{u_{i,Ny} - u_{i,Ny-1}}{\Delta y} + \frac{v_{i,Ny} - v_{i-1,Ny}}{\Delta x} \right), \\ p_{i,Ny+1} &= p_{i,Ny} + 2\eta_{i,Ny} \left(\frac{u_{i+1,Ny} - u_{i,Ny}}{\Delta x} \right) - 2\eta_{i,Ny+1} \left(\frac{u_{i+1,Ny+1} - u_{i,Ny+1}}{\Delta x} \right). \end{aligned}$$

À partir de l'équation de conservation de la masse, on obtient :

$$v_{i,Ny+2} = v_{i,Ny+1} + \Delta y \left(\frac{u_{i,Ny+1} - u_{i+1,Ny+1}}{\Delta x} \right).$$

Pour le fluide 2 :

$$\begin{aligned} u_{i,Ny+1} &= u_{i,Ny} - \Delta y \left(\frac{v_{i,Ny+1} - v_{i-1,Ny+1}}{\Delta x} \right) \\ &+ \Delta y \frac{\eta_{i,Ny}}{\eta_{i,Ny+1}} \left(\frac{u_{i,Ny} - u_{i,Ny-1}}{\Delta y} + \frac{v_{i,Ny} - v_{i-1,Ny}}{\Delta x} \right) \\ &+ \Delta y \frac{\eta_{p_i,Ny}}{\lambda_{i,Ny} \eta_{i,Ny+1}} \tau_{xy_{i,Ny}} - \Delta y \frac{\eta_{p_i,Ny+1}}{\lambda_{i,Ny+1} \eta_{i,Ny+1}} \tau_{xy_{i,Ny+1}}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p_{i,Ny+1} &= p_{i,Ny} + 2\eta_{i,Ny} \left(\frac{u_{i+1,Ny} - u_{i,Ny}}{\Delta x} \right) \\ &- 2\eta_{i,Ny+1} \left(\frac{u_{i+1,Ny+1} - u_{i,Ny+1}}{\Delta x} \right) + \frac{\eta_{i,Ny+1}}{\lambda_{i,Ny+1}} \left(\tau_{yy_{i,Ny+1}} - \tau_{yy_{i,Ny}} \right), \end{aligned}$$

$$\tau_{xx_{i,Ny+1}} = \tau_{xx_{i,Ny}},$$

$$\tau_{xx_{i,Ny+2}} = \tau_{xx_{i,Ny+1}},$$

$$\tau_{yy_{i,Ny+1}} = \tau_{yy_{i,Ny}}.$$

On considère que les propriétés physiques du fluide (η, η_p, λ) dans la maille $(i, Ny + 1)$ sont les mêmes propriétés que dans la maille (i, Ny) , quelle que soit la position de l'interface vis à vis de ces deux mailles.

Chapitre 4

Simulation des écoulements diphasiques newtonien/newtonien dans un canal

Dans ce chapitre, on présente les résultats des simulations d'écoulements diphasiques de deux fluides newtoniens dans un micro-canal. On compare les résultats obtenus par les deux méthodes utilisées pour imposer la vitesse de glissement au voisinage du point triple (méthode de pénalisation ou condition aux limites). Plus précisément, on étudie l'évolution de l'angle de contact et de la vitesse du point triple et la forme de l'interface à l'état stationnaire. La vérification de la loi de Cox permet de déterminer la méthode la plus précise.

4.1 Description de la géométrie

La géométrie considérée est présentée à la FIGURE 4.1. Les dimensions du domaine sont notées L_x et L_y et la largeur du canal est L_c . On prend comme longueur caractéristique L_c et comme vitesse caractéristique $U_c = \frac{Q}{L_c}$. Le nombre capillaire est donc, $Ca = \frac{U_c \eta_1}{\gamma}$ avec η_1 la viscosité dynamique du fluide 1 et γ le coefficient de tension de surface.

4.2 Calcul de la vitesse relative

En microfluidique, lorsqu'une interface avance dans un canal rectiligne, elle converge très rapidement vers une forme stationnaire. Pour mettre en évidence les phénomènes de recirculation induits par la tension de surface, il est nécessaire d'exhiber la vitesse dans le référentiel du front de l'interface. Pour calculer cette vitesse, la *vitesse globale de l'écoulement*, \mathbf{U} , est décomposée en une *vitesse dans le référentiel de l'interface*, \mathbf{U}_r , et une *vitesse de translation* $u_t \mathbf{U}_v$ [77]. Cela s'écrit :

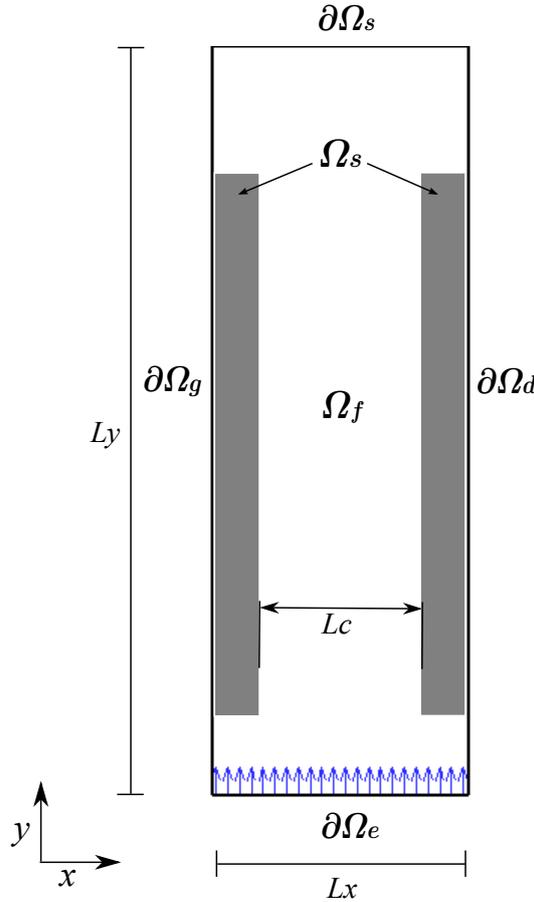


FIGURE 4.1 – Schéma du domaine pour la simulation d'un écoulement diphasique dans un canal.

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}_r + u_t \mathbf{U}_v, \quad (4.1)$$

où \mathbf{U}_v est un vecteur unitaire parallèle à la paroi. Cette vitesse de translation a un sens lorsque la forme de l'interface est stabilisée. Si c'est le cas,

$$\mathbf{U}_r \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ à l'interface,} \quad (4.2)$$

avec \mathbf{n} la normale à l'interface. On définit la *vitesse locale pour chaque point de l'interface* :

$$u_t^{loc} = \frac{\mathbf{U} \cdot \mathbf{n}}{\mathbf{U}_v \cdot \mathbf{n}}. \quad (4.3)$$

Alors, la vitesse de translation de l'interface est définie comme la moyenne de ces vitesse locales aux points où $\mathbf{U} \cdot \mathbf{n}$ n'est pas trop faible. Une fois calculée cette vitesse de translation, la vitesse dans le référentiel de l'interface (ou vitesse relative) peut être calculée avec l'équation (4.1).

4.3 Résultats avec pénalisation à l'ordre 1

Ce premier cas test correspond à la simulation d'un écoulement diphasique où les deux fluides considérés sont newtoniens. Le maillage est 96×288 et les paramètres de la simulation sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_x = 30\mu m, \\ L_y = 90\mu m, \\ L_c = 20\mu m, \\ \eta_1 = 1.34 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ \eta_2 = 1 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ Ca = 1 \times 10^{-3}, \\ \theta_a = 140^\circ. \end{array} \right.$$

L'évolution de l'interface et le champ de vitesse global à différents instants sont montrés sur la FIGURE 4.2. La ligne solide dans partie fluide, correspond à l'interface. À l'instant $t = 0$, l'interface entre les deux fluides est initialisée à l'intérieur du canal, complètement plate. À $t = 0.0879$, l'angle de contact n'a pas encore dépassé la valeur critique θ_a , le point triple n'est pas autorisé à avancer. À $t = 0.5977$, le point triple a avancé puisque $\theta_d > \theta_a$ et le front de l'interface prend une forme circulaire, stationnaire.

La FIGURE 4.3 représente le champ de vitesse dans le référentiel de l'interface (ou vitesse relative). Les lignes de courant mettent en évidence des phénomènes de recirculation qui ne sont pas visibles dans le référentiel global. Ces recirculations montrent que la vitesse relative est bien tangente à l'interface.

L'évolution en temps de l'angle de contact et de la vitesse du point triple, notée V_{ct} , sont représentés dans la FIGURE 4.4. Les oscillations de l'angle au début de la simulation, sont dues à l'initialisation de l'interface, ce qui génère quelques survitesses au voisinage du point triple et en conséquence, quelques déformations de l'interface. Jusqu'à $t = 0.2$, le point triple reste immobile car l'angle de contact est inférieur à la valeur critique $\theta_a = 140^\circ$. À $t = 0.2$, le point triple commence à se déplacer conformément à l'évolution de l'angle de contact. Après la mise en mouvement du point triple, la valeur de l'angle de contact se stabilise très rapidement autour 148° . La vitesse du point triple est pour sa part très proche de 1, il s'agit de la vitesse moyenne de l'écoulement.

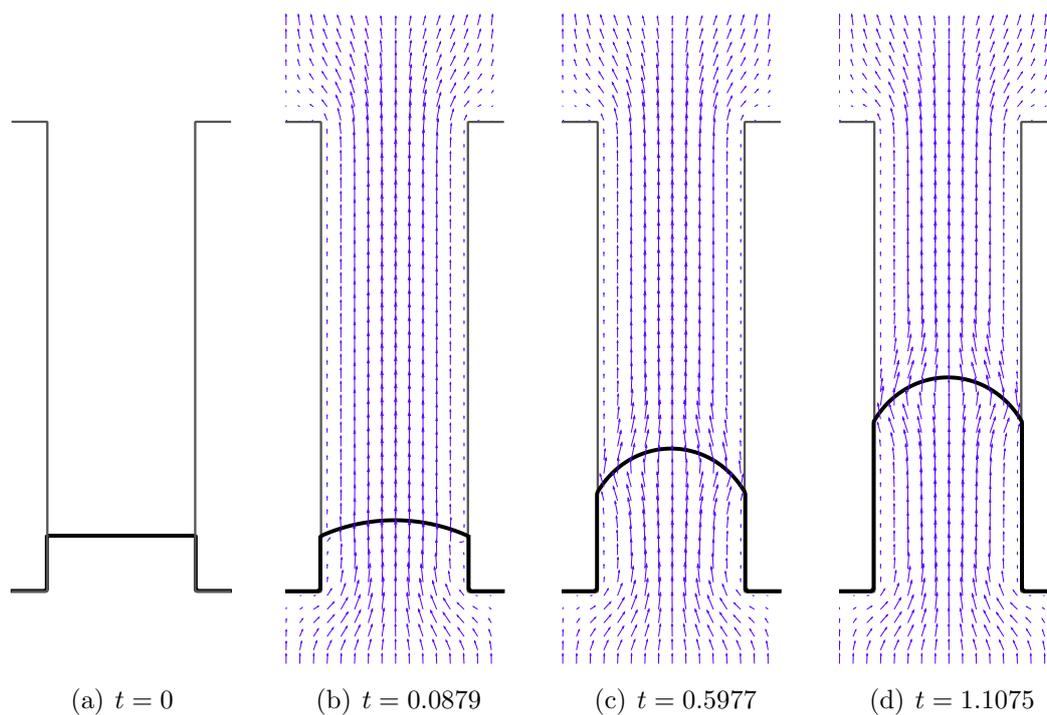


FIGURE 4.2 – Simulation d'un écoulement diphasique entre deux fluides newtoniens : évolution de l'interface et champ de vitesse global. Vitesse du point triple imposée par pénalisation.

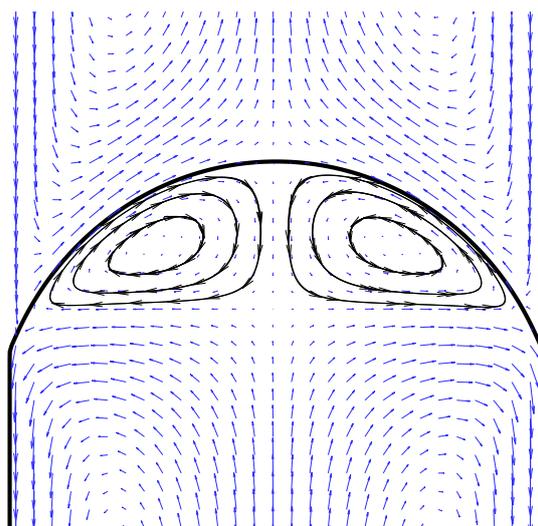


FIGURE 4.3 – Front de l'interface (noir) et champ de vitesse relative (bleu) avec quelques lignes de courant.

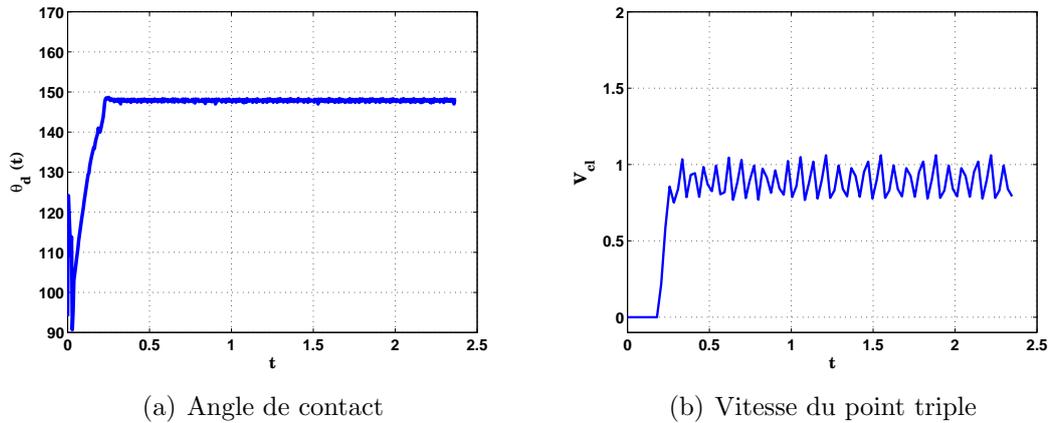
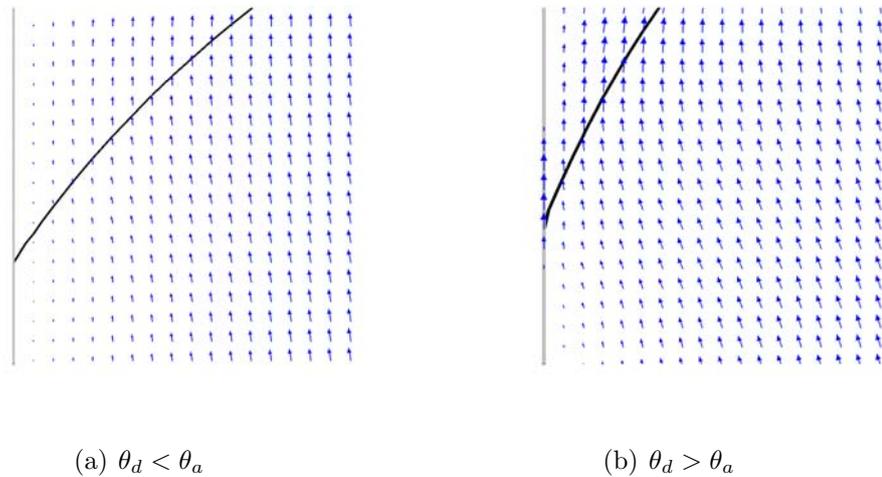


FIGURE 4.4 – Résultats avec la pénalisation à l'ordre 1.

Un zoom sur le champ de vitesse global autour du point triple est présenté sur la FIGURE 4.5. À gauche, le point triple n'a pas encore été autorisé à se déplacer ($\theta_d < \theta_a$), à droite, ($\theta_d > \theta_a$) le point triple glisse sur la paroi solide à la vitesse V_{cox} imposée sur quelques mailles dans la partie solide.

FIGURE 4.5 – Écoulement autour du point triple. (a) L'angle de contact n'a pas encore atteint sa valeur critique 140° . (b) L'angle de contact a dépassé la valeur critique et la vitesse du point triple est imposée sur quelques mailles.

4.3.1 Forme du ménisque et rayon

Expérimentalement, il a été montré que pour de faibles nombres capillaires l'interface fluide-fluide stabilisée a une forme sphérique [38]. Nous nous sommes donc attachés à vérifier que nos résultats numériques corroborent cet aspect. Pour cela, il s'agit tout d'abord de s'assurer que la courbure à l'interface est constante, puis, d'étudier l'évolution du rayon du ménisque au cours du temps. Pour calculer le rayon, on prend deux normales à l'interface et on calcule le point d'intersection entre ces deux normales (cf. FIGURE 4.6). Ce point correspond au centre du cercle et le rayon est la distance entre ce point et un point de l'interface.

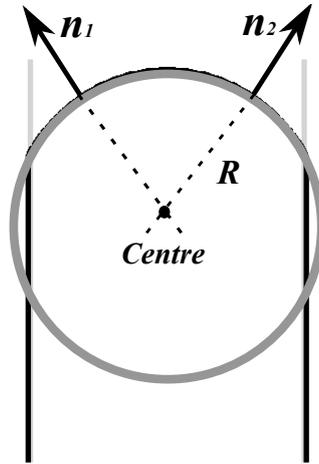


FIGURE 4.6 – Schéma pour le calcul du rayon. On cherche le point d'intersection entre les normales n_1 et n_2 prises sur le front de l'interface. Le rayon est la distance à ce point.

La forme du ménisque à la fin de la simulation est présentée sur la FIGURE 4.7(a). On constate qu'elle correspond bien à un arc de cercle, ce résultat est en accord avec [38]. L'évolution du rayon est montrée sur la FIGURE 4.7(b), il se stabilise très rapidement à la valeur $R = 0.56$. L'étude de la variation du rayon et de l'angle de contact selon le nombre capillaire, font l'objet de la section 4.3.3.

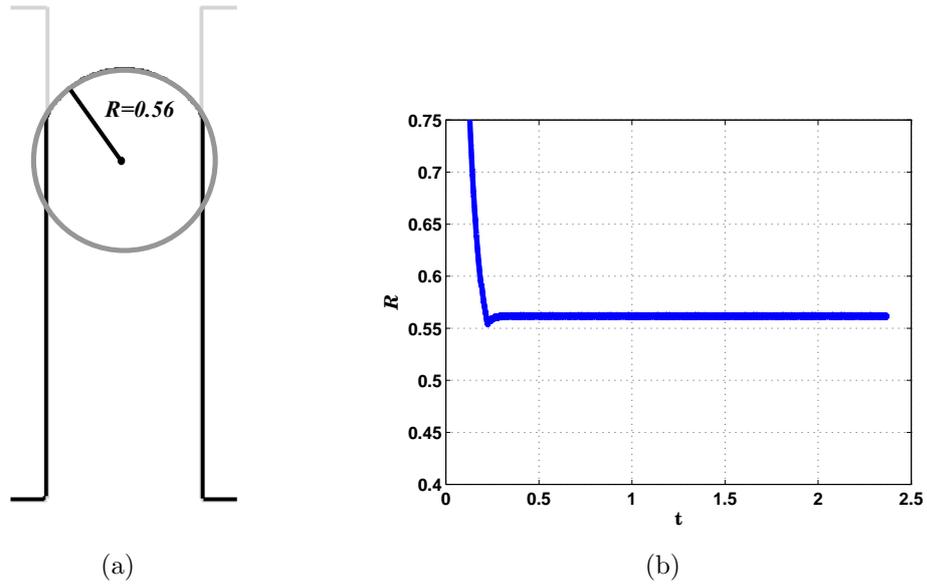


FIGURE 4.7 – (a) Comparaison entre la forme du ménisque et un cercle de rayon $R = 0.56$. (b) Rayon en fonction du temps.

4.3.2 Convergence de grille

Pour évaluer la convergence de grille, une série de simulations avec quatre maillages de plus en plus raffinés est proposée. L'enjeu est de montrer ici dans quelle mesure la résolution du maillage influence la position de l'interface et la valeur où se stabilise l'angle de contact. Les maillages considérés sont 24×72 , 48×144 , 96×288 et 192×576 . Ces maillages ont été choisis pour avoir respectivement 15, 30, 60 et 120 mailles à l'intérieur du canal. Les paramètres de la simulation sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_x = 30\mu m, \\ L_y = 90\mu m, \\ L_c = 20\mu m, \\ \eta_1 = 1.34 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ \eta_2 = 1 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ Ca = 1 \times 10^{-3}, \\ \theta_a = 140^\circ. \end{array} \right.$$

La position de l'interface à $t = 2.01$ est présentée sur la FIGURE 4.8 et l'évolution de l'angle de contact et de la vitesse du point triple sur la FIGURE 4.9. On constate que la position de l'interface donnée par le maillage de 24×72 , est très éloignée de la position donnée par les trois autres maillages. En ce qui concerne l'angle de contact, pour le maillage 24×72 il se stabilise un peu en dessous des valeurs obtenues avec les autres maillages. La vitesse de déplacement du point triple est assortie d'une

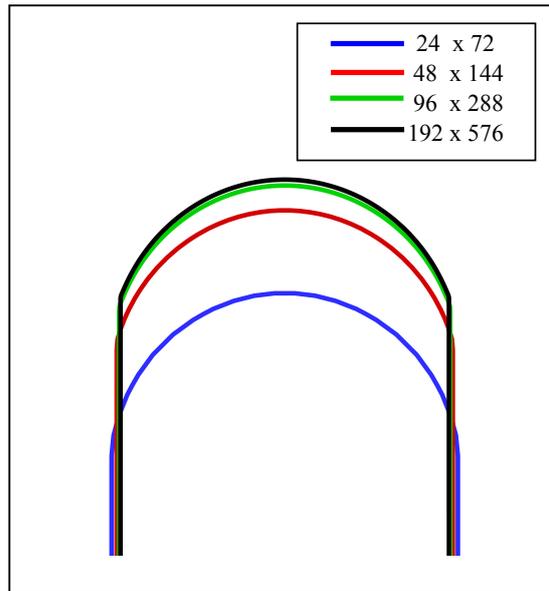
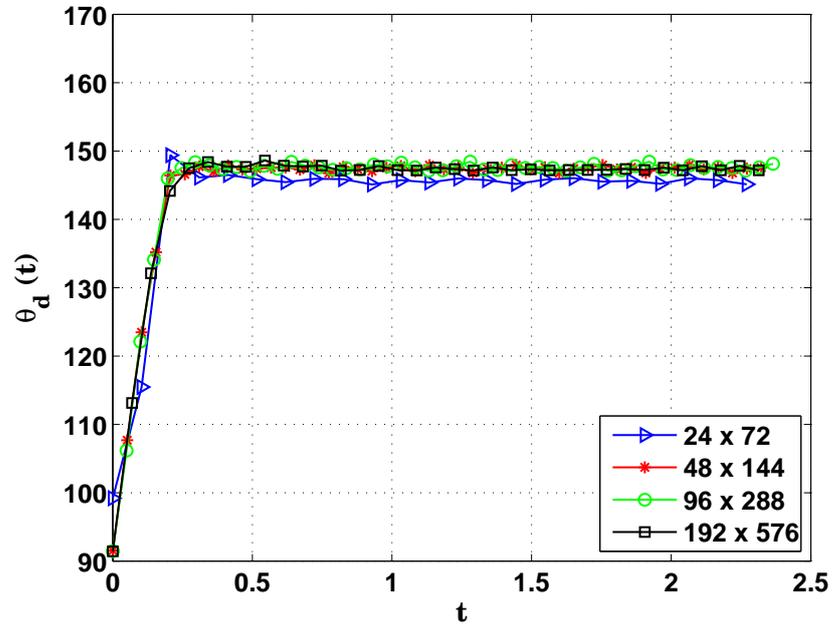


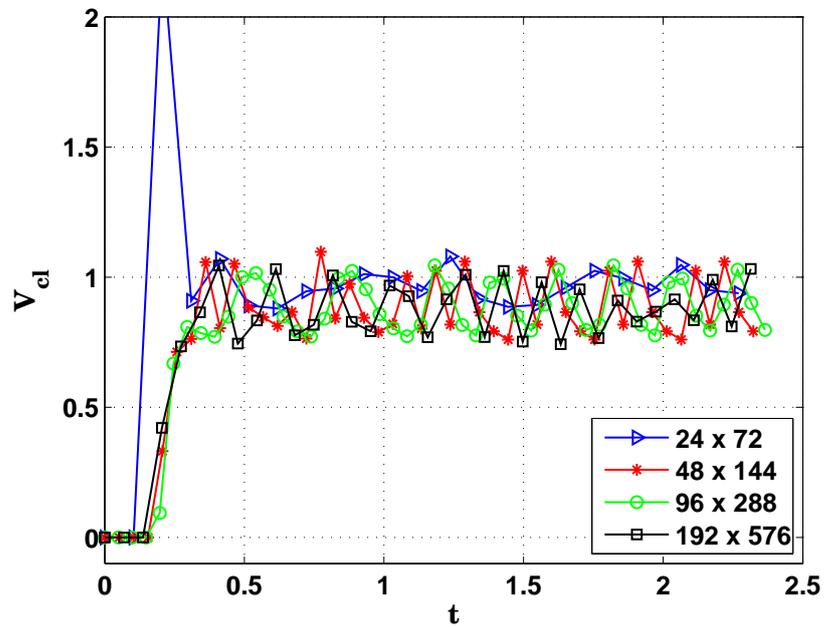
FIGURE 4.8 – Convergence de grille avec la pénalisation à l'ordre 1 : position de l'interface à l'instant $t = 2.01$.

grande oscillation pour le maillage 24×72 . Cela s'explique par le fait que l'équation (1.20) donnant la vitesse de glissement en fonction de l'angle est sensible aux faibles variations de l'angle que l'on l'observe sur la FIGURE 4.9(b). Ces variations sont dues au fait que le maillage est trop grossier pour un calcul précis de la normale.

Étant donné la similarité des résultats pour les maillages 96×288 et 192×576 la convergence de grille est atteinte pour un maillage de taille 96×288 , c'est à dire avec 60 mailles à l'intérieur du canal. Néanmoins, en faisant un compromis précision/temps de calcul, le maillage 48×144 offre aussi des résultats satisfaisants. Pour les simulations dans un réseau, les microcanaux auront par conséquent au moins 30 mailles par section, alors que pour celles réalisées dans un canal rectiligne, on utilise le maillage 96×288 .



(a) Angle de contact



(b) Vitesse du point triple

FIGURE 4.9 – Convergence de grille avec la pénalisation à l'ordre 1 : (a) angle de contact (b) vitesse du point triple.

4.3.3 Comportement de l'angle de contact et forme du ménisque pour différents nombres capillaires

Six simulations différentes sont effectuées avec $Ca \in [1 \times 10^{-3}, 4 \times 10^{-3}]$ afin de comparer le comportement de l'angle de contact dynamique et la forme stationnaire du ménisque selon le cas. Le maillage est 96×288 et les paramètres :

$$\begin{cases} L_x = 30\mu m, \\ L_y = 90\mu m, \\ L_c = 20\mu m, \\ \eta_1 = 1.34 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ \eta_2 = 1 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ \theta_a = 140^\circ. \end{cases}$$

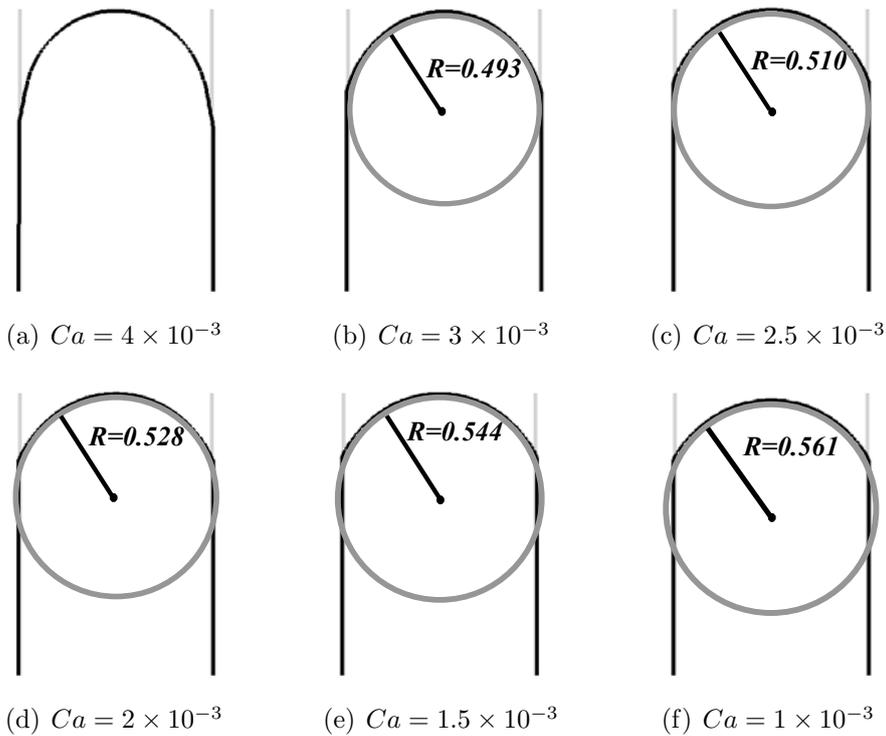


FIGURE 4.10 – Simulation d'un écoulement diphasique entre deux fluides newtoniens pour différents nombres capillaires : forme adoptée par le ménisque.

Pour des nombres capillaires compris entre 1×10^{-3} et 3×10^{-3} , le ménisque a bien une forme circulaire (cf. FIGURE 4.10). Dès que $Ca > 3 \times 10^{-3}$, le rayon de courbure n'est plus constant. On remarque aussi que le rayon du ménisque est plus grand si le nombre capillaire diminue. Par ailleurs, dans les cas où la forme du

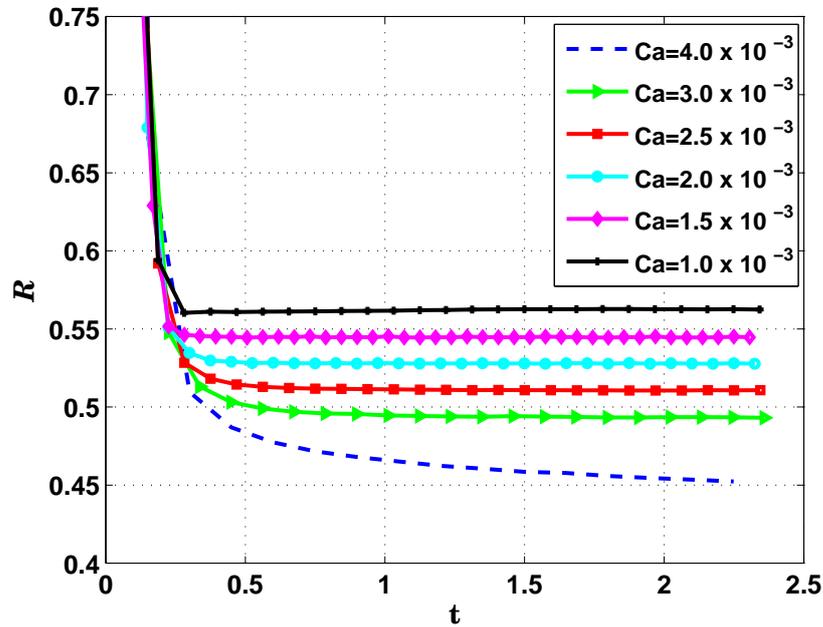


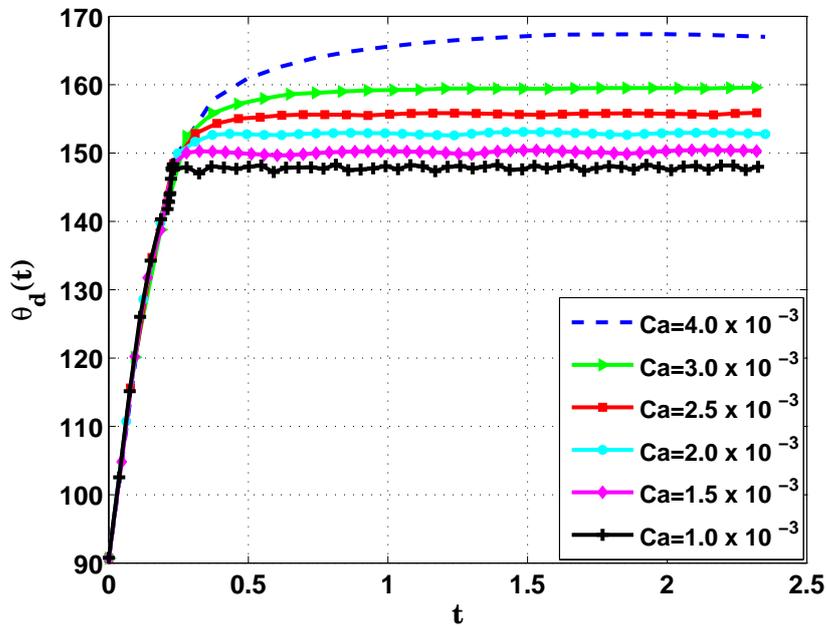
FIGURE 4.11 – Simulation d'un écoulement diphasique entre deux fluides newtoniens pour différents nombres capillaires : évolution en temps du rayon

ménisque est circulaire, le rayon se stabilise très rapidement par rapport au temps total de la simulation (cf. FIGURE 4.11).

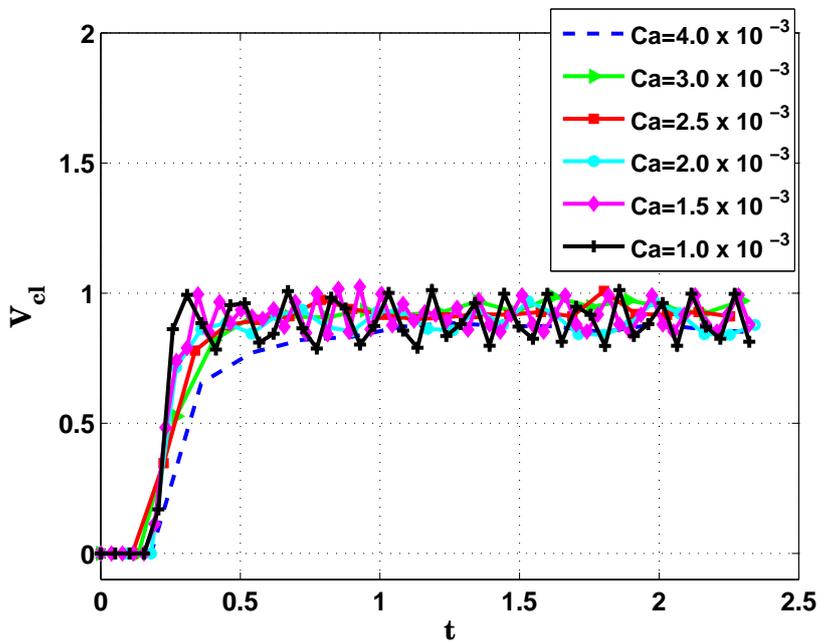
L'évolution en temps de l'angle de contact et de la vitesse du point triple sont montrés sur la FIGURE 4.12. Le comportement qualitatif est attendu : si le nombre capillaire diminue, l'angle de contact diminue également.

En conclusion, les résultats obtenus pour la simulation de deux fluides newtoniens dans un canal, en utilisant la méthode de pénalisation à l'ordre 1, sont satisfaisants d'un point de vue qualitatif : l'interface converge très rapidement vers une forme stationnaire, tout comme l'angle de contact et la vitesse du point triple. En régime stationnaire, la vitesse V_{cl} se stabilise toujours autour de 1, la vitesse moyenne de l'écoulement.

Afin d'analyser l'influence de la pénalisation à l'ordre 1 sur l'écoulement observé (forme de l'interface, valeur de l'angle obtenu), une autre technique est utilisée pour imposer la vitesse de glissement du point triple. La section suivante est dédiée à la description de cette technique et à la comparaison des résultats obtenus par ces deux méthodes.



(a) Angle de contact



(b) Vitesse du point triple

FIGURE 4.12 – Simulation d'un écoulement diphasique de deux fluides newtoniens avec différents nombres capillaires.

4.4 Résultats avec une condition limite

Jusqu'à présent la vitesse V_{cox} du point triple a été imposée par pénalisation (cf. FIGURE 4.13(a)). On remarque que la vitesse de glissement est imposée sur des nœuds de vitesse situés à une distance $\frac{\Delta x}{2}$ du point triple. Maintenant, cette vitesse de glissement va être imposée sur le point triple (cf. FIGURE 4.13(b)) par une condition limite, en modifiant l'approximation des flux sur les faces séparant les mailles fluides et les mailles solides. De cette façon, la vitesse de glissement est imposée sur le nœud où le point triple a été détecté. L'approximation de l'intégrale $\int_{V_v, x^-} \frac{\partial v}{\partial x} dy$ pour la maille au bord est faite de la manière suivante :

$$\int_{V_v, x^-} \frac{\partial v}{\partial x} dy = \frac{-\frac{8}{3}v_{i,j}^* + 3v_{i,j} - \frac{1}{3}v_{i+1,j}}{\Delta x} \Delta y. \quad (4.4)$$

On approche de manière similaire $\int_{V_v, x^+} \frac{\partial v}{\partial x} dy$. Cette nouvelle discrétisation permet d'approcher la condition limite à l'ordre 2.

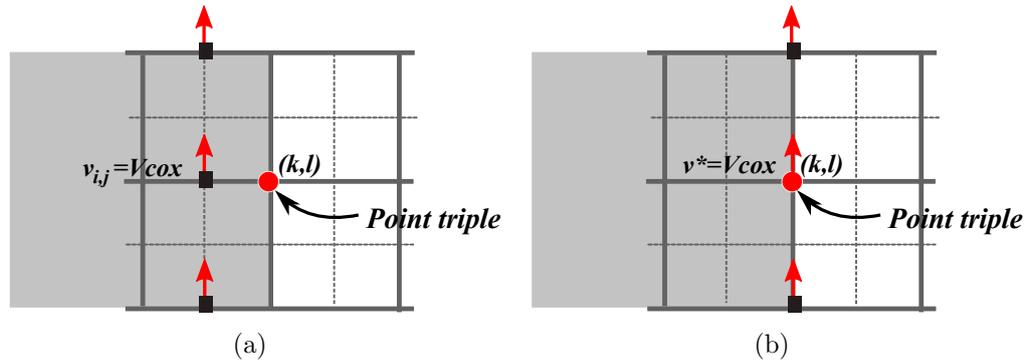


FIGURE 4.13 – Méthodes permettant d'imposer la vitesse de glissement V_{cox} . (a) Pénalisation à l'ordre 1 : V_{cox} est imposée sur le nœud de vitesse (i, j) (b) Condition limite : V_{cox} n'est pas imposée sur un nœud de vitesse.

Nous nous proposons dans cette section de montrer les résultats obtenus avec cette deuxième méthode. On commence par simuler un écoulement de deux fluides newtoniens dans un canal. Le maillage est 96×288 et les paramètres de la simulation sont identiques à ceux utilisés pour la pénalisation à l'ordre 1, à savoir :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_x = 30\mu m, \\ L_y = 90\mu m, \\ L_c = 20\mu m, \\ \eta_1 = 1.34 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ \eta_2 = 1 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ Ca = 1 \times 10^{-3}, \\ \theta_a = 140^\circ. \end{array} \right.$$

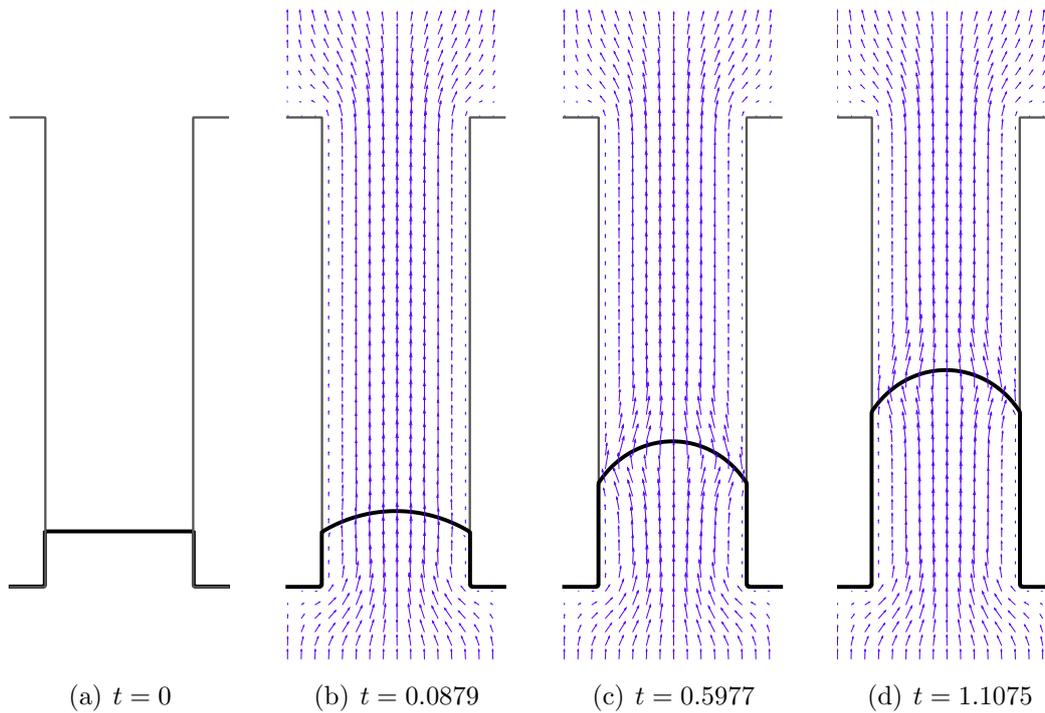


FIGURE 4.14 – Simulation d'un écoulement diphasique entre deux fluides newtoniens : évolution de l'interface et champ de vitesse globale. V_{cox} imposée comme une condition limite.

La FIGURE 4.14 montre l'évolution de l'interface et le champ de vitesse à différents instants. La forme du ménisque et l'évolution du rayon sont présentés dans la FIGURE 4.15. L'évolution de l'angle de contact et de la vitesse du point triple sont présentés dans la FIGURE 4.16. En comparaison avec la méthode de pénalisation, la valeur de l'angle a diminuée et en conséquence, celle du rayon a augmenté. Avec la méthode de pénalisation, le rayon s'est stabilisé à 0.56 et l'angle à 148° , tandis que avec cette deuxième méthode le rayon s'est stabilisé à 0.57 et l'angle à 144° .

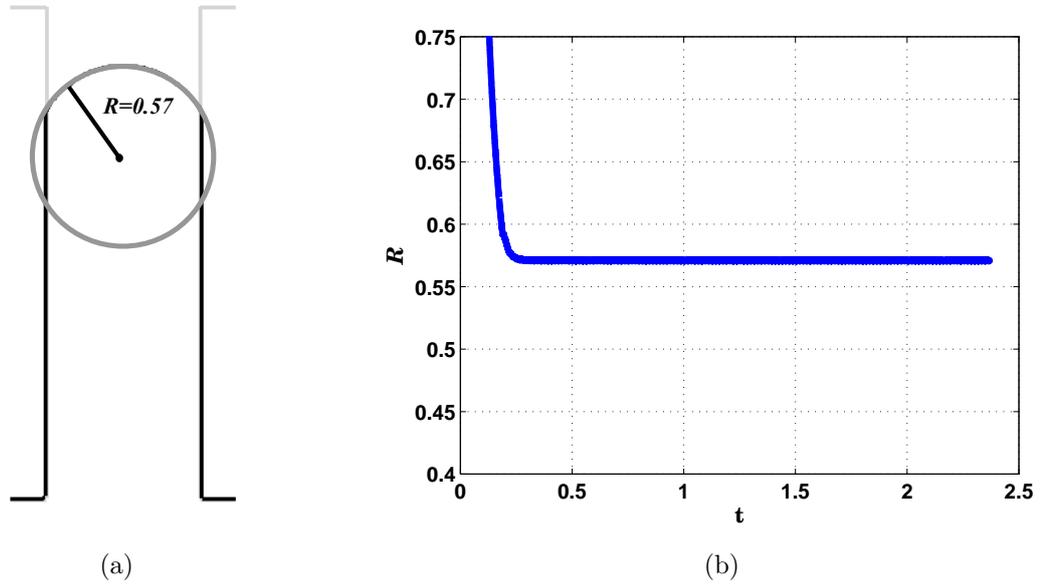
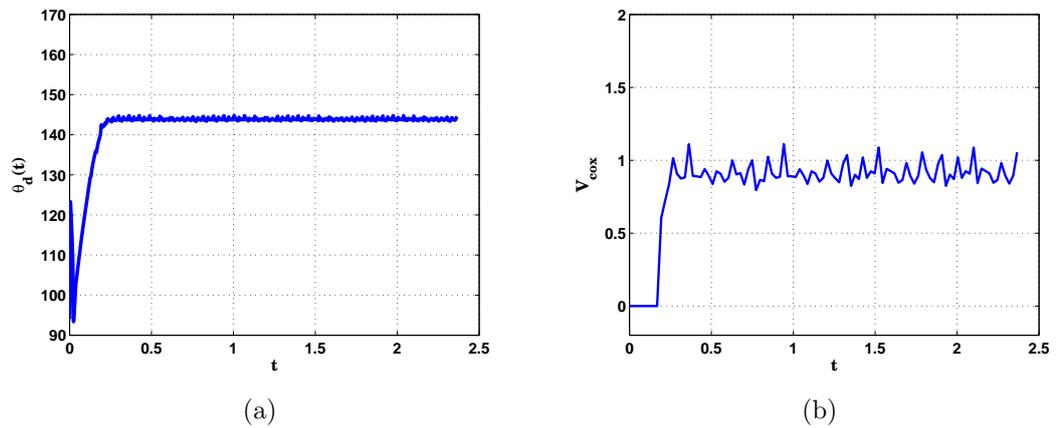


FIGURE 4.15 – (a) Forme du ménisque (b) Évolution en temps du rayon de courbure

FIGURE 4.16 – Évolution de (a) l'angle de contact et de (b) la vitesse du point triple en utilisant une condition limite à l'ordre 2 pour imposer la vitesse du point triple. L'angle se stabilise à 144° et la vitesse à 1.

4.4.1 Convergence de grille

Tout comme cela a été fait pour la méthode de la pénalisation à l'ordre 1, il est nécessaire d'évaluer dans quelle mesure la résolution du maillage influence la position de l'interface et l'angle de contact, lorsque la méthode de la condition limite est utilisée pour imposer la vitesse du point triple. Les paramètres sont identiques à ceux utilisés pour évaluer la convergence de grille avec la méthode de pénalisation.

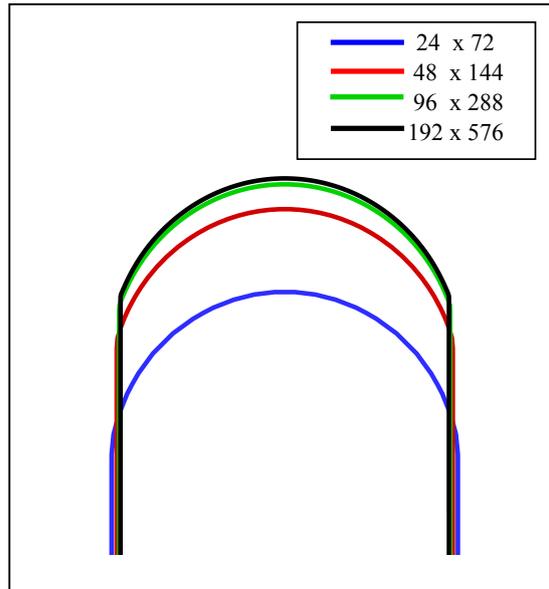
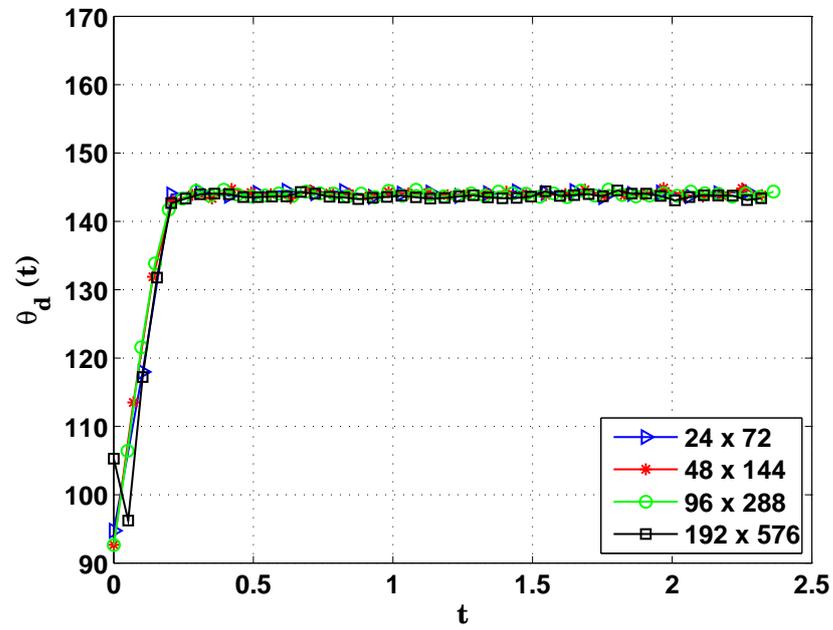
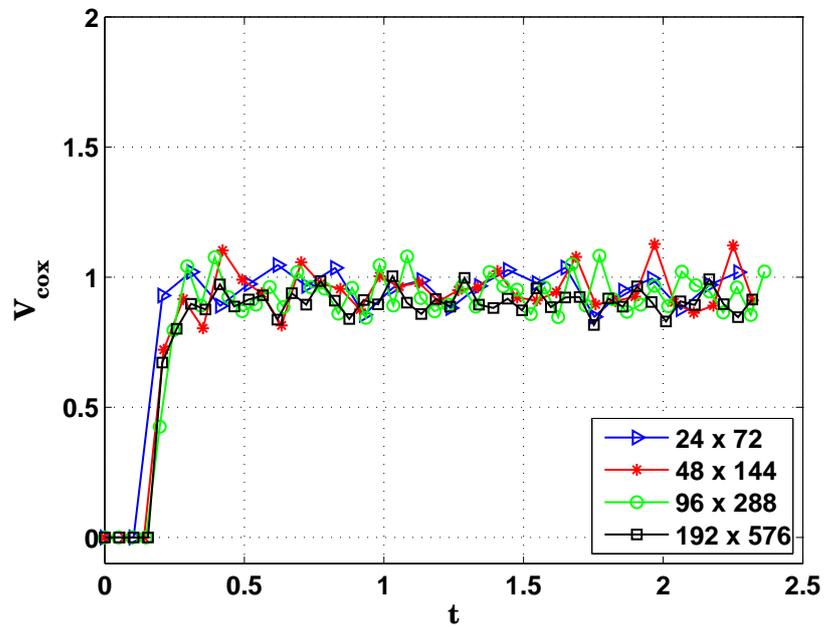


FIGURE 4.17 – Convergence avec la condition limite : position de l'interface à l'instant $t = 2.01$.

La position de l'interface est évaluée à l'instant $t = 2.01$ (cf. FIGURE 4.17). Pour le maillage 24×72 la position de l'interface est à nouveau très éloignée de la position obtenue avec les trois autres maillages. La valeur de l'angle et de la vitesse du point triple restent très proches dans les quatre cas (cf. FIGURE 4.18), cependant les oscillations de la vitesse diminuent pour le maillage 192×576 . Encore une fois, la convergence de grille est atteinte pour un maillage 96×288 .



(a) Angle de contact



(b) Vitesse du point triple

FIGURE 4.18 – Convergence de grille avec la condition limite : (a) angle de contact (b) vitesse du point triple.

4.4.2 Comportement de l'angle de contact et forme du ménisque pour différents nombres capillaires

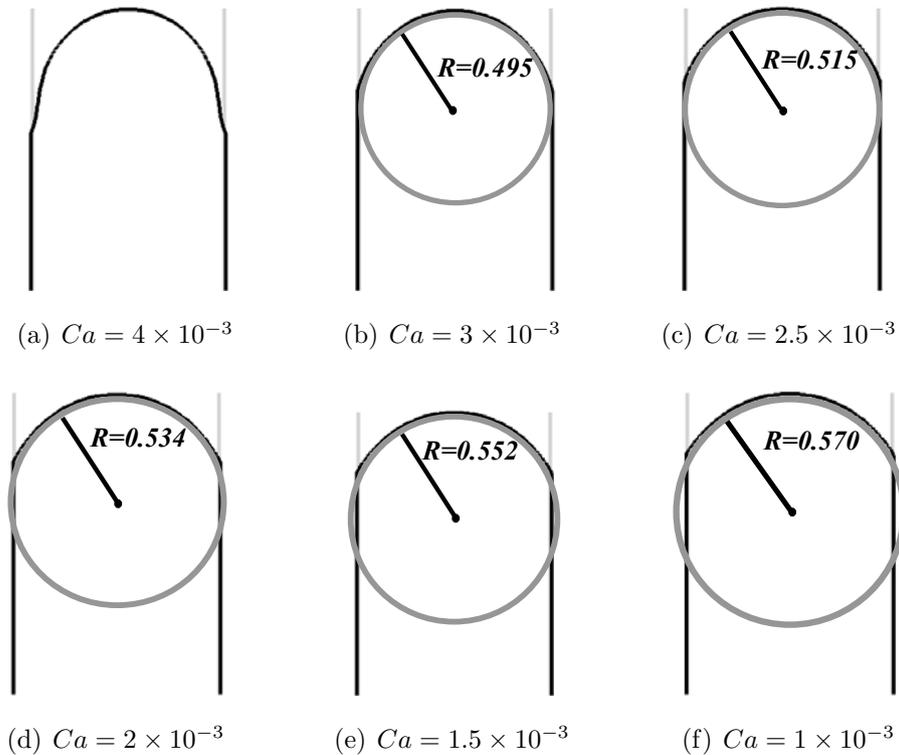


FIGURE 4.19 – Forme adoptée par le ménisque avec la méthode de la condition limite.

En suivant la même procédure que celle utilisée pour la méthode de pénalisation et en utilisant les mêmes paramètres, on effectue six simulations différentes en changeant le nombre capillaire. La forme adoptée par le ménisque est présentée dans la FIGURE 4.19 et l'évolution du rayon dans la FIGURE 4.20. En comparaison avec la FIGURE 4.10, les résultats sont similaires. Cependant, on constate que pour un nombre capillaire donné, la valeur du rayon est supérieure avec la deuxième méthode et cette différence est accentuée lorsque le nombre capillaire diminue. Par exemple, pour $Ca = 2.5 \times 10^{-3}$, $R = 0.510$ avec la méthode de pénalisation et $R = 0.515$ avec la condition limite; par contre, pour $Ca = 1.0 \times 10^{-3}$, $R = 0.56$ avec la méthode de pénalisation et $R = 0.57$ avec la condition limite.

L'évolution en temps de l'angle de contact et de la vitesse du point triple sont montrées sur la FIGURE 4.21. Qualitativement, ce résultat est similaire pour les deux méthodes. La principale différence réside dans les valeurs asymptotiques atteintes.

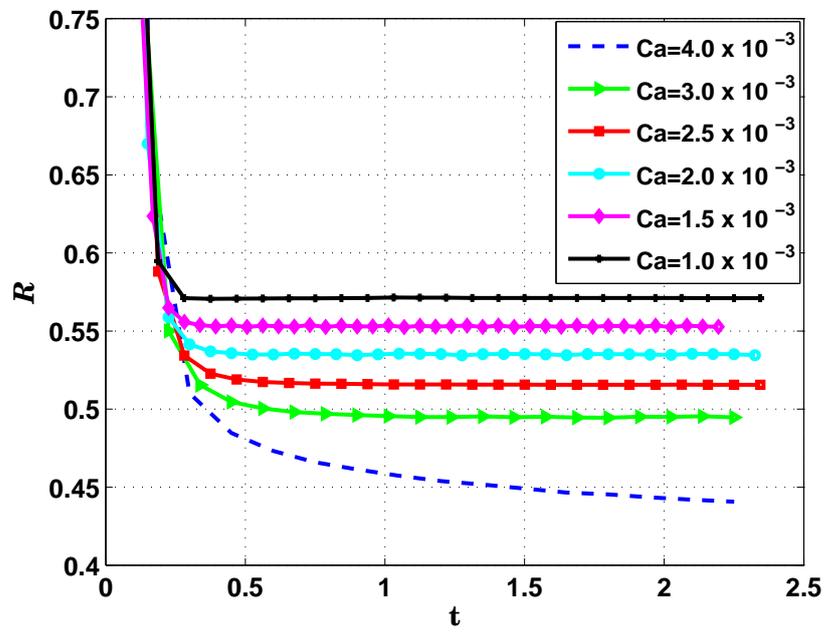
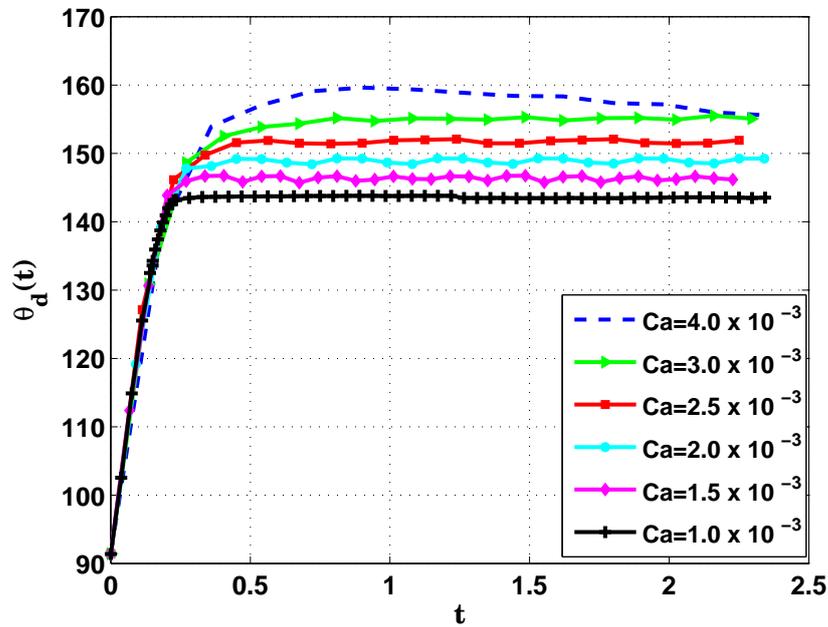
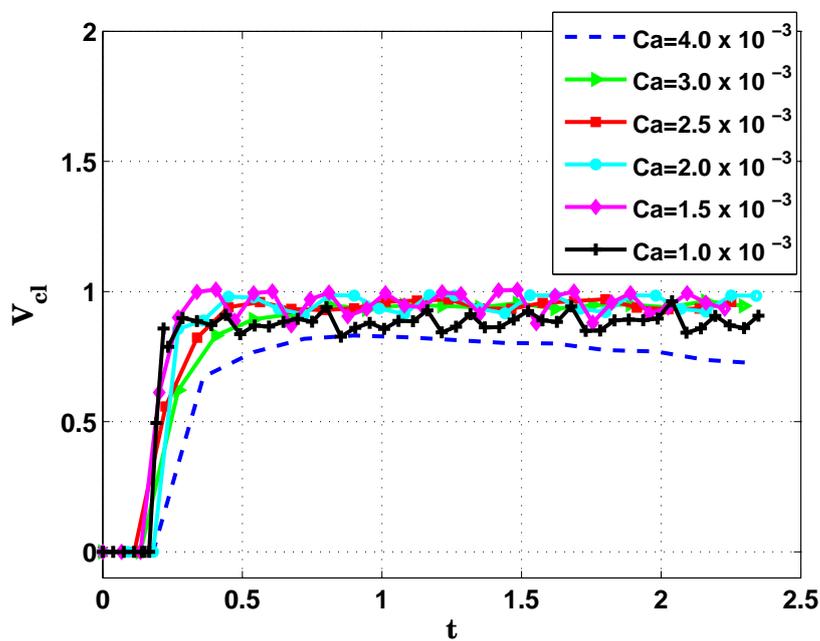


FIGURE 4.20 – Évolution du rayon. La vitesse du point triple est imposée avec la condition limite.



(a)



(b)

FIGURE 4.21 – Évolution de (a) l'angle de contact et de (b) la vitesse du point triple. La vitesse du point triple est imposée avec une condition limite.

4.5 Comparaison des deux méthodes et vérification de la Loi de Cox

Nous venons de montrer les résultats obtenus avec deux méthodes différentes pour imposer la vitesse de glissement du point triple : une méthode de pénalisation à l'ordre 1 avec des vitesses imposées aux premiers points solides situés à $\frac{\Delta x}{2}$ du bord et une condition limite qui concerne l'approximation l'ordre 2. La comparaison des résultats obtenus par ces deux méthodes montre cinq points en commun :

1. Après la mise en mouvement du point triple, l'angle de contact et la vitesse du point triple se stabilisent rapidement.
2. Pour $Ca < 3 \times 10^{-3}$, le ménisque converge vers une forme circulaire et le rayon se stabilise rapidement par rapport au temps total de la simulation.
3. Lorsque Ca diminue, l'angle de contact diminue et le rayon augmente.
4. En régime stationnaire, la vitesse de glissement du point triple, V_{cl} , se stabilise autour de la vitesse moyenne de l'écoulement.
5. La convergence de grille est atteinte pour un maillage 96×288 .

Les principales différences entre les deux méthodes sont les valeurs asymptotiques atteintes par l'angle de contact et le rayon. Pour un nombre capillaire donné, avec la méthode de la condition limite, l'angle se stabilise à une valeur inférieure à celle obtenue par la méthode de pénalisation. En conséquence, le rayon est plus grand avec la méthode de la condition limite.

Il reste à déterminer quelle méthode donne les résultats les plus satisfaisants. Pour cela, nous comparons la vérification de la loi de Cox pour chaque méthode. Ce test consiste à tracer la valeur asymptotique atteinte par l'angle θ_d pour différents Ca . La FIGURE 4.22(a) correspond aux résultats obtenus avec la méthode de pénalisation et la FIGURE 4.22(b) aux résultats obtenus avec la condition limite. La courbe continue en rouge a été tracée en utilisant l'équation (1.20) avec $\lambda = 1 \times 10^{-4}$. Ce test nous permet de conclure que la loi de Cox est mieux vérifiée en imposant la vitesse du point triple au bord du domaine fluide. La méthode de pénalisation impose V_{cox} sur les nœuds de vitesse qui ne coïncident pas forcément avec le point triple et donc $V_{cl} \neq V_{cox}$ (cf. FIGURE 4.23). En effet, pour avoir la bonne vitesse V_{cl} au bord il faut imposer une vitesse V_{cox} plus grande au point intérieur du solide. Au contraire, avec la deuxième méthode, V_{cox} est imposée au point triple et $V_{cl} = V_{cox}$ (cf. FIGURE 4.24). Cela permet aussi d'expliquer les différences entre les deux méthodes pour les valeurs atteintes par l'angle de contact et le rayon. Il faut noter que la pénalisation est mise en place avec un bord situé à $\frac{\Delta x}{2}$ des points en v . Si le bord avait été positionné aux points en v on obtiendrait les mêmes résultats qu'avec la condition limite.

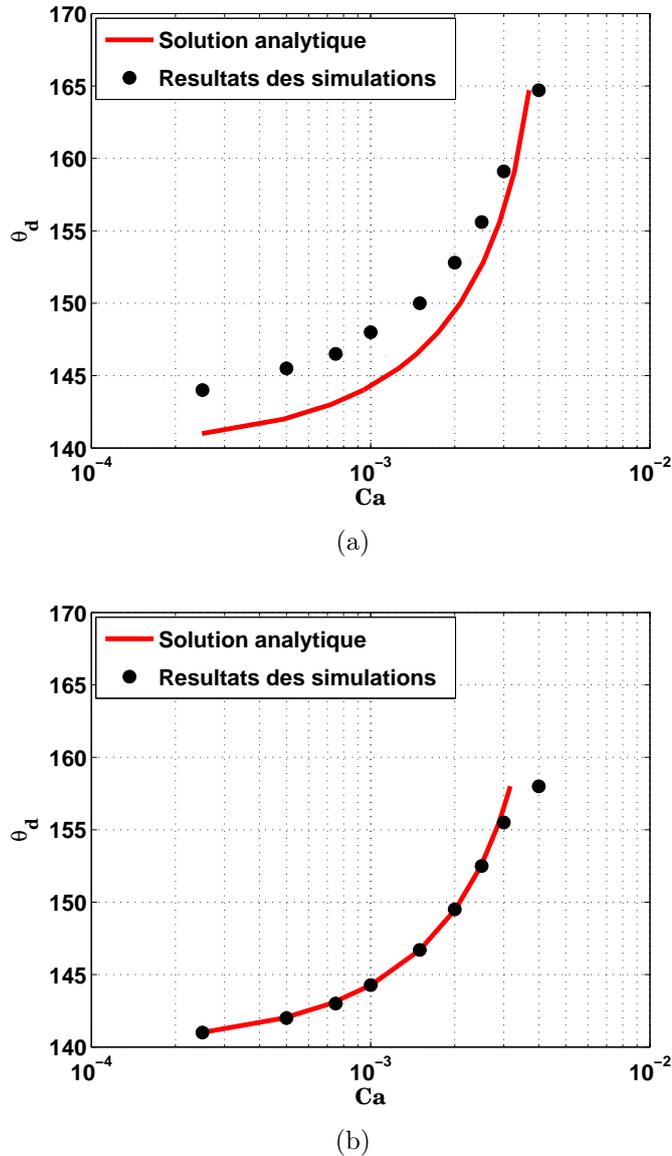


FIGURE 4.22 – Vérification de la loi de Cox. (a) Résultats avec la pénalisation à l'ordre 1. (b) Résultats avec la condition limite. La courbe continue en rouge a été tracée en utilisant l'équation (1.20) avec $\lambda = 1 \times 10^{-4}$.

Pour simuler un écoulement dans un réseau de microcanaux irrégulier, en imposant la vitesse de glissement par une condition limite il serait nécessaire de créer un maillage adaptée à la géométrie. La méthode de pénalisation est une alternative pour ce type de géométries. En ce qui concerne ce travail, la méthode de pénalisation à l'ordre 1 est utilisée pour les simulations dans un réseau de microcanaux. Parmi les améliorations possibles, nous proposons d'étudier le comportement de l'angle de contact en utilisant une méthode de pénalisation à l'ordre 2 [59].

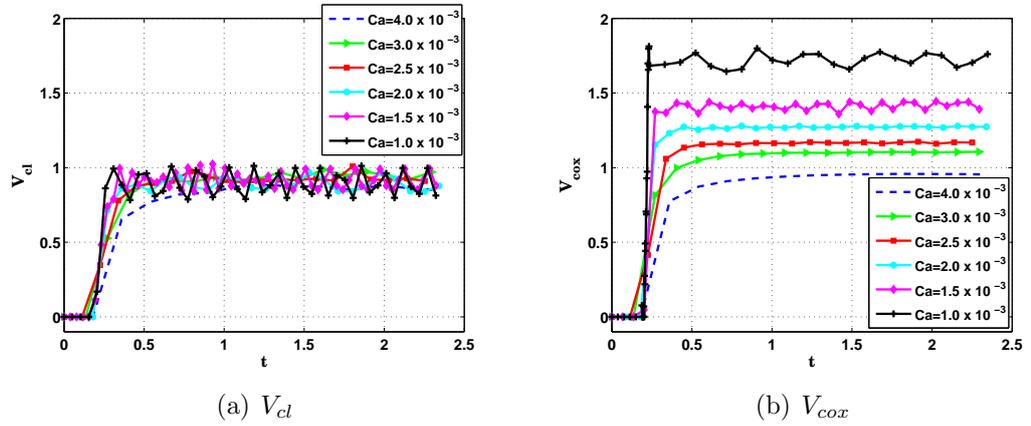


FIGURE 4.23 – Comparaison de V_{cl} et V_{cox} avec la méthode de pénalisation.

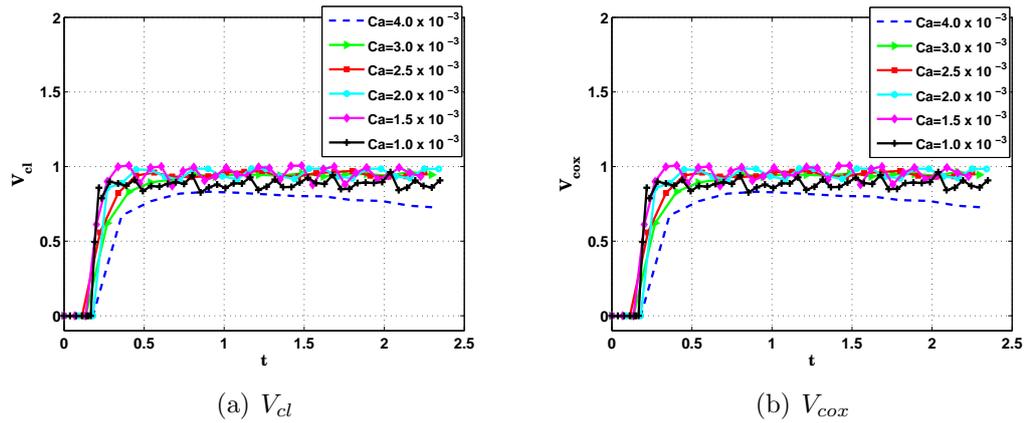


FIGURE 4.24 – Comparaison de V_{cl} et V_{cox} avec la méthode de la condition limite.

Chapitre 5

Simulation des écoulements diphasiques newtonien/viscoélastique

Dans ce chapitre, nous souhaitons évaluer l'influence d'un fluide viscoélastique comme fluide injecté. Tout d'abord on simule ce type d'écoulement dans un canal, puis dans un réseau de microcanaux. Afin de vérifier la détection et la modélisation des points triples dans un réseau, nous commençons par simuler des écoulements dans un réseau symétrique de microcanaux. Ensuite, nous étudions des écoulements dans des réseaux non symétriques.

5.1 Simulations dans un canal

Nous nous proposons maintenant de montrer les résultats de simulations numériques d'un écoulement diphase dans un canal. Le fluide newtonien (fluide 1), initialement au repos, est déplacé par un fluide viscoélastique (fluide 2) injecté. Les paramètres de la simulation sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_x = 30\mu m, \\ L_y = 90\mu m, \\ L_c = 20\mu m, \\ \eta_1 = 1.34 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ \eta_2 = 1 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ \eta_{p2} = 9 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ Ca = 1 \times 10^{-3}, \\ \theta_a = 140^\circ. \end{array} \right.$$

Le maillage comporte 96×288 mailles. Pour évaluer l'influence du temps de

relaxation sur les caractéristiques de l'écoulement, trois différentes simulations sont menées avec $\lambda_2 = 0.1, 0.5, 1.0$. On remarque que l'interface est localisée au même endroit quelle que soit la valeur de λ_2 (cf. FIGURE 5.1). En ce qui concerne le tenseur de conformation, les composantes τ_{xx} , τ_{xy} et τ_{yy} valent respectivement 1, 0 et 1 dans la partie du domaine occupée par le fluide newtonien tandis que dans la partie viscoélastique on observe des différences suivant la valeur de λ_2 (cf. FIGURES 5.2, 5.3 et 5.4).

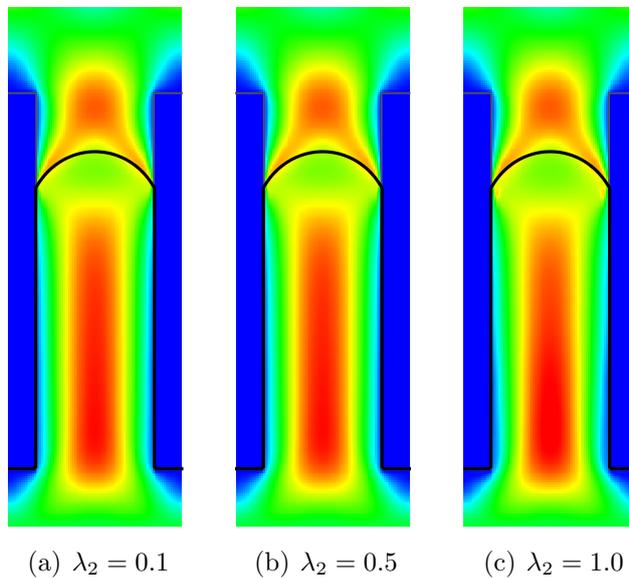


FIGURE 5.1 – Simulation d'un écoulement diphasique newtonien/viscoélastique. Position de l'interface et norme de la vitesse à $t = 2.25$ pour différents temps de relaxation.

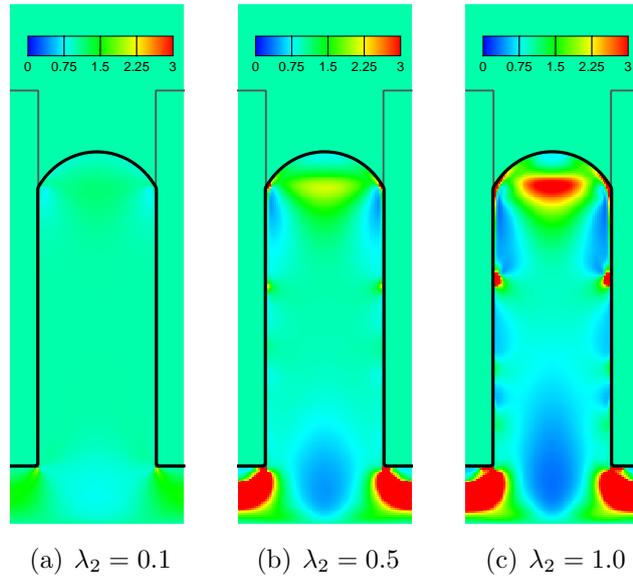


FIGURE 5.2 – Simulation d'un écoulement diphasique newtonien/viscoélastique. Composante τ_{xx} .

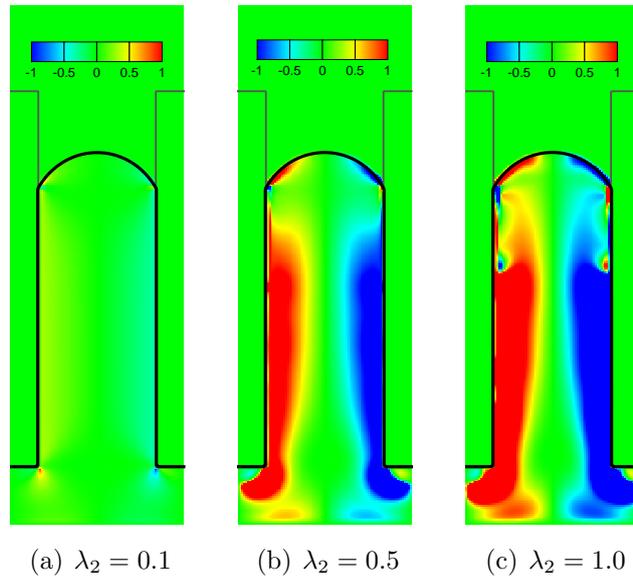


FIGURE 5.3 – Simulation d'un écoulement diphasique newtonien/viscoélastique. Composante τ_{xy} .

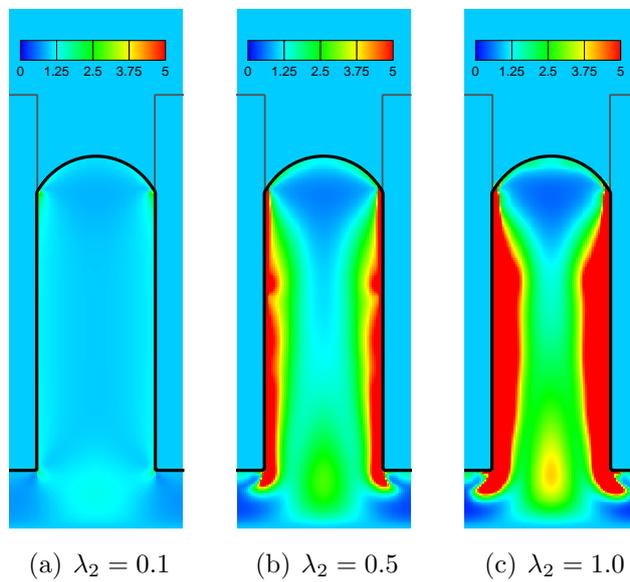
(a) $\lambda_2 = 0.1$ (b) $\lambda_2 = 0.5$ (c) $\lambda_2 = 1.0$

FIGURE 5.4 – Simulation d'un écoulement diphasique newtonien/viscoélastique. Composante τ_{yy} .

5.2 Simulations dans un réseau de micro-canaux

5.2.1 Description de la géométrie

Nous simulons un écoulement diphasique newtonien/viscoélastique dans deux types de réseaux. Le premier réseau est symétrique par rapport à l'axe vertical passant par le centre du domaine et l'ensemble de microcanaux ont la même largeur (cf. FIGURE 5.5(a)). Le deuxième réseau n'a pas de symétrie et les microcanaux sont de largeur différente (cf. FIGURE 5.5(b)). Dans les deux cas, on choisit comme longueur caractéristique, L_c , la largeur du canal d'injection. En entrée, le fluide 2 est injecté à un débit constant égal à Q . On prend comme vitesse caractéristique la valeur $U_c = \frac{Q}{L_c}$.

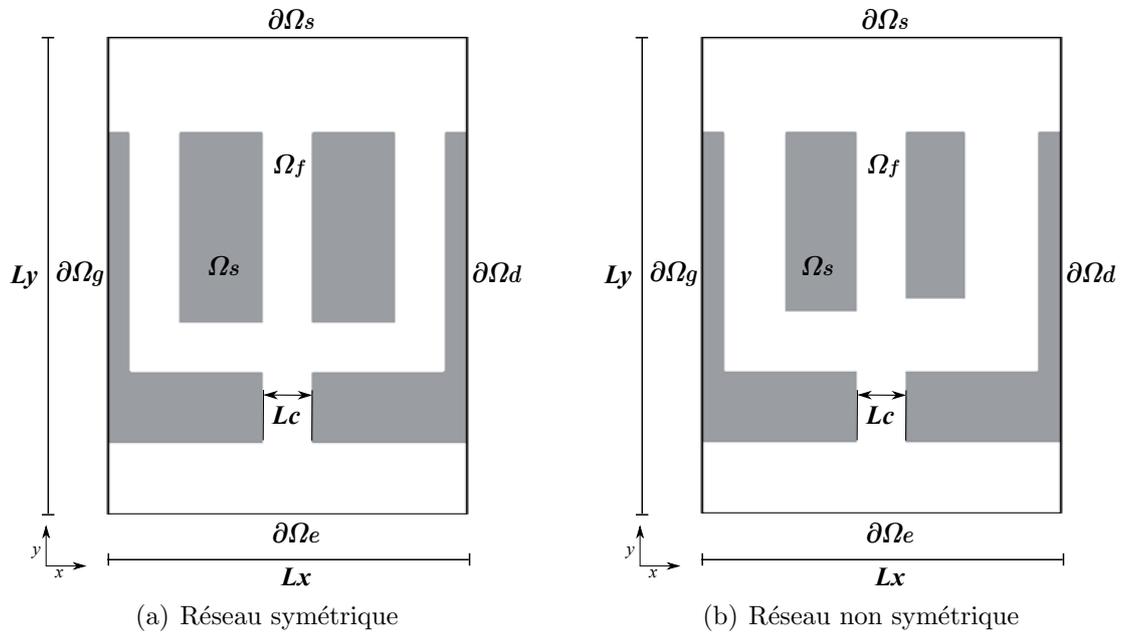


FIGURE 5.5 – Schéma du domaine pour la simulation d'un écoulement diphasique dans un réseau.

5.2.2 Test de symétrie

Afin de valider la détection et la modélisation du point triple dans un réseau, on simule un écoulement diphasique newtonien/newtonien dans un réseau symétrique. Les paramètres de la simulation sont les suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_x = 75\mu m, \\ L_y = 100\mu m, \\ L_c = 10\mu m, \\ \eta_1 = 1.34 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ \eta_2 = 1 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ Ca = 2.5 \times 10^{-3}, \\ \theta_a = 140^\circ. \end{array} \right.$$

On utilise un maillage de 270×360 . L'évolution de l'interface et du champ de vitesse à différents instants sont montrés sur la FIGURE 5.6. L'interface est initialisée dans la branche inférieure verticale. Deux premiers points triples sont détectés sur les parois gauche et droite du canal inférieur (cf. FIGURE 5.6(a)). Une fois que l'interface sort du canal inférieur, elle tourne dans les branches gauche et droite, deux nouveaux points triples doivent être modélisés (cf. FIGURE 5.6(b)) : un sur la paroi inférieure de la branche horizontale à gauche et un sur la paroi inférieure de la branche horizontale à droite. À l'instant $t = 6.875$ (cf. FIGURE 5.6(d)) il existe un total de six points triples. L'écoulement au voisinage de ces points triples est montré sur la FIGURE 5.7. On peut constater que la gestions des points triples ne génère pas de sur vitesses locales.

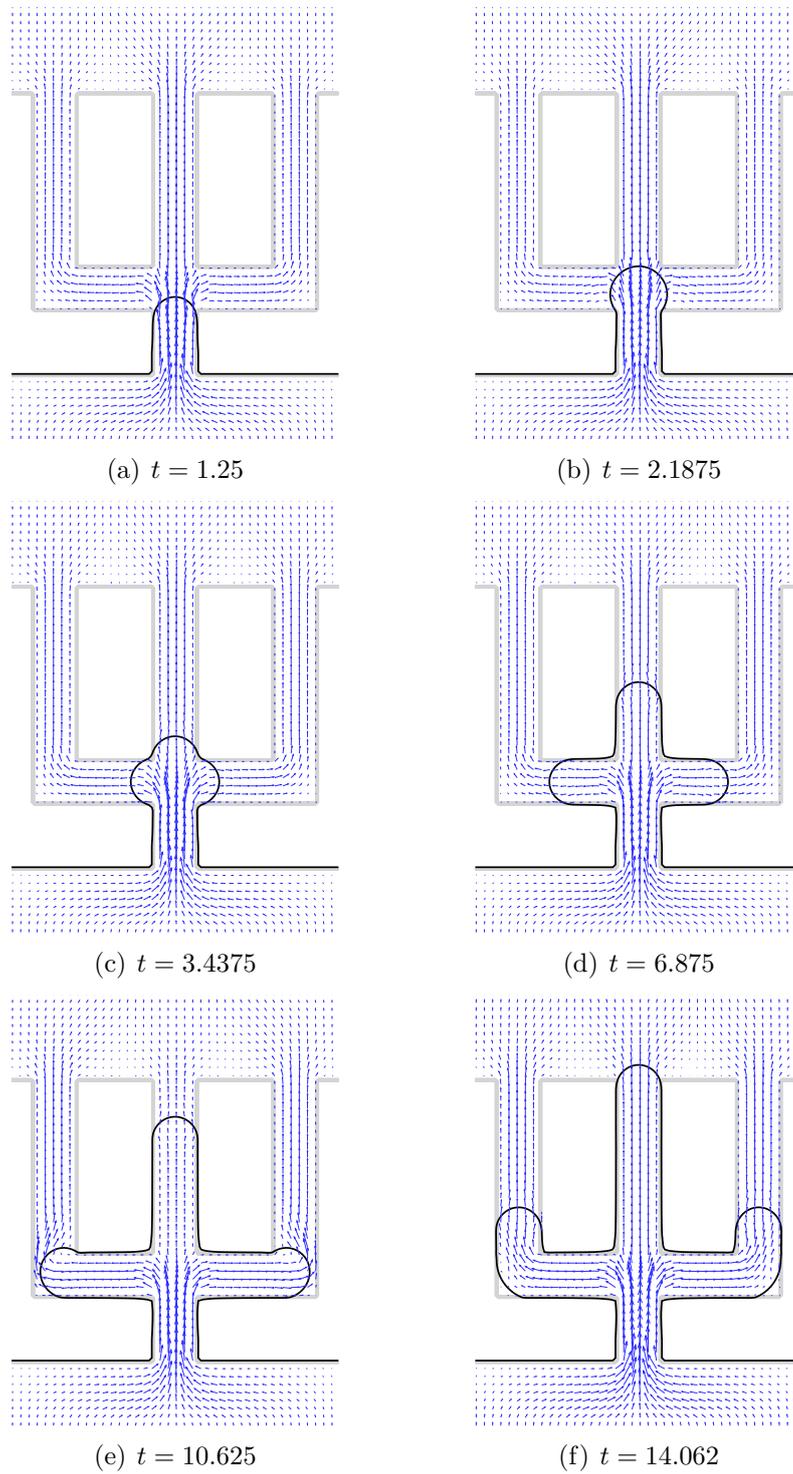


FIGURE 5.6 – Simulation d'un écoulement diphasique de deux fluides newtoniens dans un réseau de micro-canaux symétrique : test de symétrie.

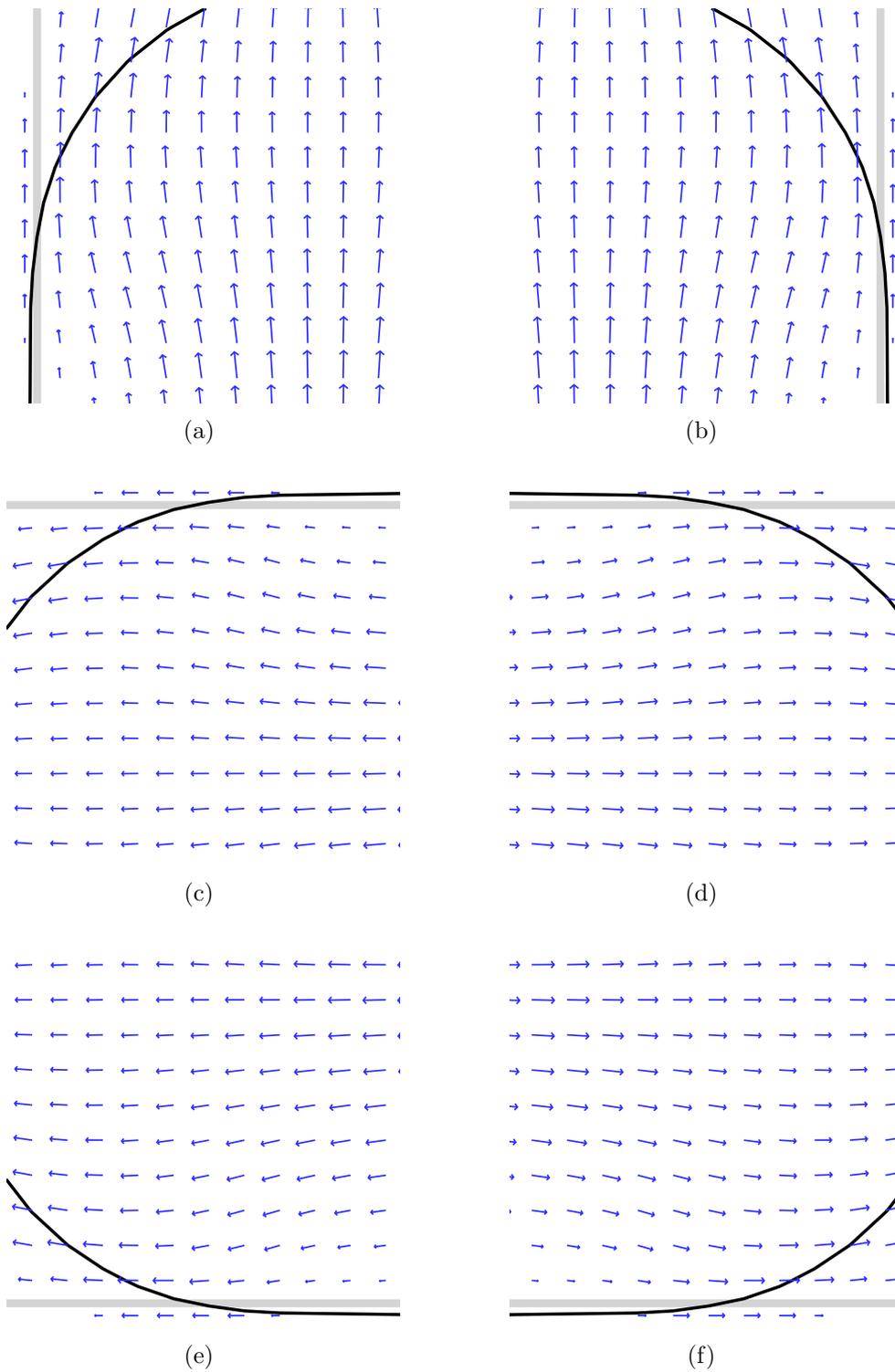


FIGURE 5.7 – Champ de vitesse au voisinage des points triples détectés à l’instant $t = 6.875$.

5.2.3 Simulation dans un réseau hétérogène

On s'intéresse maintenant à la simulation d'un écoulement diphasique newtonien/viscoélastique dans un réseau non symétrique. Les paramètres de la simulation sont les suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_x = 75\mu m, \\ L_y = 100\mu m, \\ L_c = 10\mu m, \\ \eta_1 = 1.34 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ \eta_2 = 1 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ \eta_{p2} = 9 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ Ca = 4.5 \times 10^{-3}, \\ \theta_a = 135^\circ. \end{array} \right.$$

Le maillage comporte 270×360 mailles. La FIGURE 5.8 montre l'évolution de l'interface et les lignes de courant à cinq instants différents. Sur les FIGURES 5.9, 5.10 et 5.11 on montre la position de l'interface aux instants différents et pour quatre temps de relaxation adimensionnés $\lambda_2 = 0.1$, $\lambda_2 = 1.0$, $\lambda_2 = 5.0$ et $\lambda_2 = 12$. À l'instant $t = 4.68$, il n'y a pas de différences remarquables par rapport à la position de l'interface. À $t = 9.37$ le fluide avec $\lambda_2 = 0.1$, avance plus facilement dans le canal central. Ce même comportement est observé jusqu'à la fin de la simulation. Au contraire, à $t = 9.37$ l'interface commence à rentrer dans le gros canal, le fluide avec $\lambda_2 = 12$ a plus de facilité à avancer. Cependant, quand l'interface s'est déplacée suffisamment dans le gros canal, les fluides avec les temps de relaxation les plus petits, avancent plus aisément ($t = 20.62$).

Sur la FIGURE 5.12 les contours du champ de vorticité de la vitesse relative à l'instant $t = 14.06$ sont présentés pour quatre temps de relaxation différents. Les différences les plus notables peuvent se voir dans la partie occupée par le fluide viscoélastique. À mesure que le temps de relaxation augmente, les récirculations dans la partie viscoélastique deviennent plus importantes.

Ces premiers résultats nous permettent de conclure que lorsque le temps de relaxation augmente, le fluide a tendance à mieux occuper les grands canaux, indépendamment de la direction. Cependant, pour tirer une conclusion définitive, il faut faire des simulations avec des temps de relaxation plus importants et d'autres géométries. Toutefois, des instabilités numériques apparaissent à partir du moment où le temps de relaxation augmente. Pour remédier à ce problème, un terme de diffusion a été ajouté à l'équation du tenseur de conformation. Dans la section suivante on donne plus de détails sur les résultats obtenus avec ce terme de diffusion.

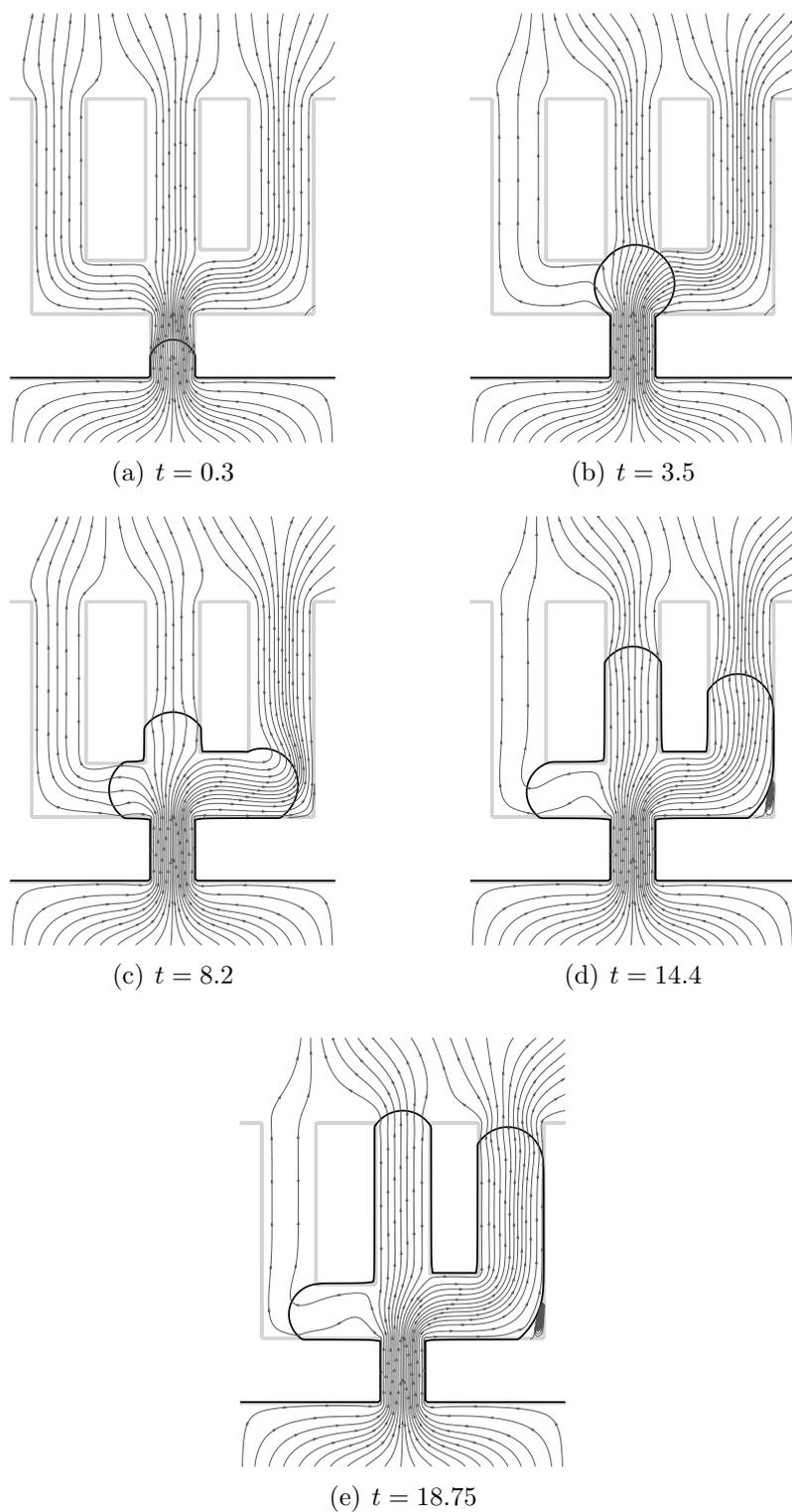


FIGURE 5.8 – Écoulement diphasique newtonien/viscoélastique : lignes de courant et évolution de l'interface

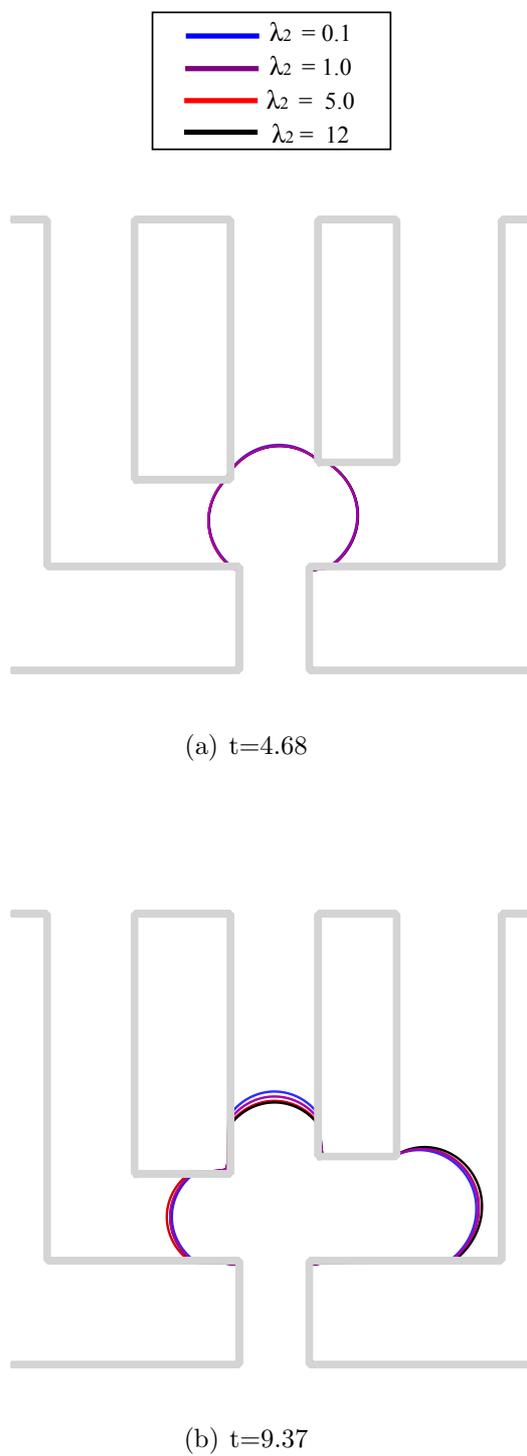


FIGURE 5.9 – Comparaison de la position de l'interface.

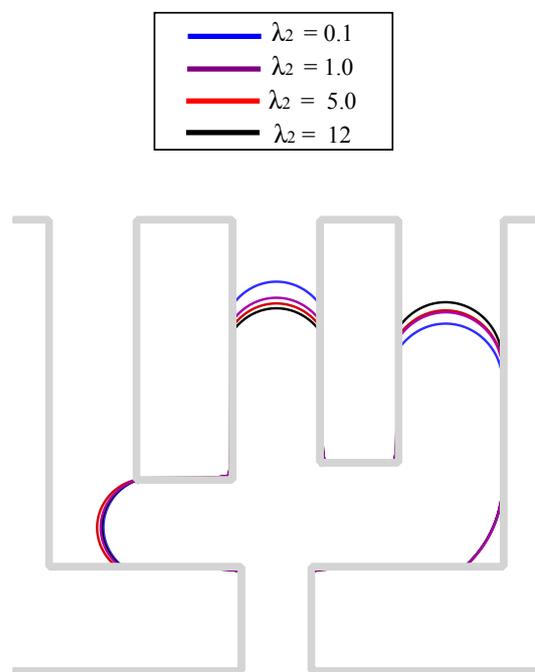
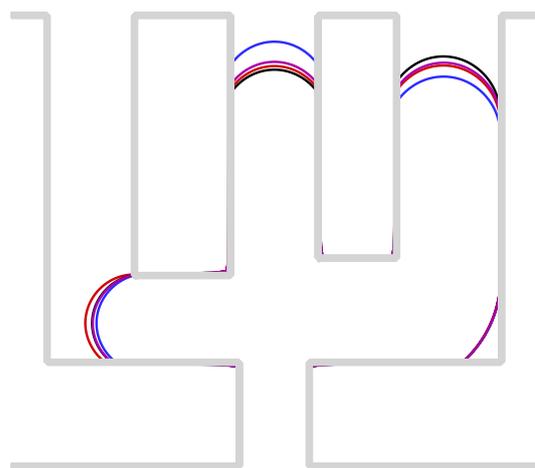
(a) $t=16.87$ (b) $t=18.75$

FIGURE 5.10 – Comparaison de la position de l'interface.

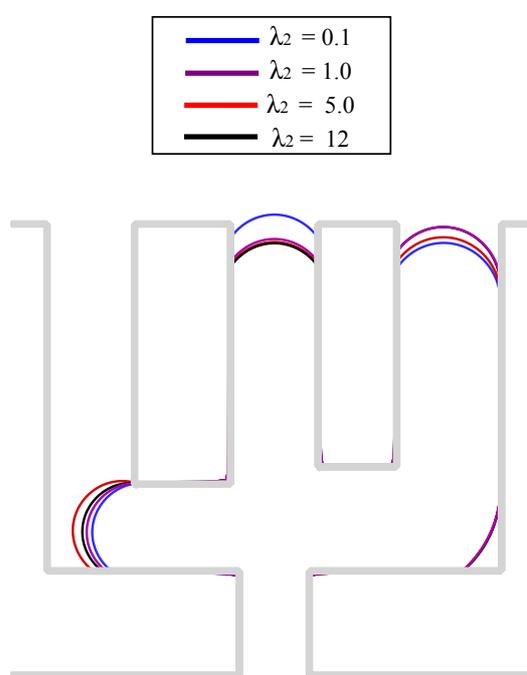
(a) $t=20.62$

FIGURE 5.11 – Comparaison de la position de l'interface.

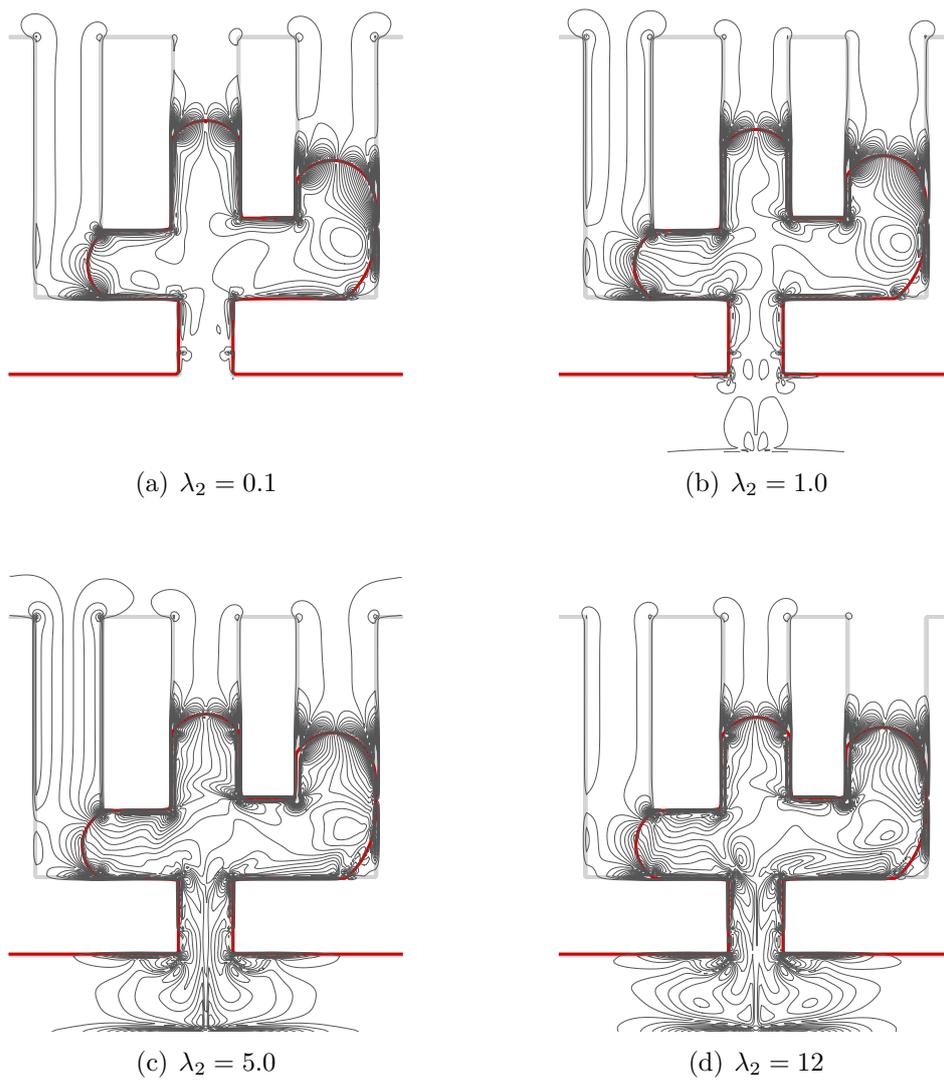


FIGURE 5.12 – Contours du champ de vorticité de la vitesse relative à l'instant $t = 14.06$.

5.3 Simulations dans un réseau de micro-canaux avec un temps de relaxation élevé

Dans la section précédente nous avons constaté que lorsque le temps de relaxation augmente, le fluide a tendance à mieux occuper les grands canaux, indépendamment de la direction de l'écoulement. Afin de confirmer ce résultat, on s'intéresse maintenant à un écoulement dans une géométrie plus complexe et avec un temps de relaxation plus élevé. Cependant, un problème d'instabilité apparaît lorsque le temps de relaxation dépasse la valeur 40. Pour remédier à ce problème, un terme de diffusion est ajouté à l'équation du tenseur de conformation [69] qui s'écrit désormais :

$$\frac{\boldsymbol{\tau} - \mathbf{I}}{\lambda(\phi)} + \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \boldsymbol{\tau} - (\nabla \mathbf{U}) \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} (\nabla \mathbf{U})^t - \epsilon \Delta \boldsymbol{\tau} + \frac{\boldsymbol{\tau}}{K} = \mathbf{0}, \quad (5.1)$$

où ϵ est un coefficient à choisir. Dans ce travail, on prend $\epsilon = 10^{-3}$ pour limiter l'influence de ce terme de diffusion dans les équations. En effet, dans [69] les auteurs ont montré que $\epsilon = 10^{-3}$, n'a pas d'influence sur l'écoulement. La discrétisation de ce terme se fait de manière implicite et il est traité dans la deuxième partie du splitting utilisé lors de la résolution de l'équation 5.1 (cf. section 3.1).

On considère la géométrie suivante :

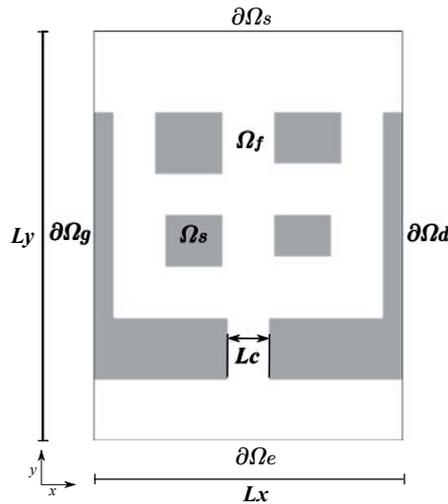


FIGURE 5.13 – Schéma du domaine pour la simulation d'un écoulement diphasique dans un réseau hétérogène.

Les paramètres de la simulation sont les suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} L_x = 75\mu m, \\ L_y = 100\mu m, \\ L_c = 10\mu m, \\ \eta_1 = 1.34 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ \eta_2 = 1 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ \eta_{p2} = 9 \times 10^{-3} Pa \cdot s, \\ Ca = 3 \times 10^{-3}, \\ \theta_a = 135^\circ. \end{array} \right.$$

Le maillage comporte 180×240 mailles. La FIGURE 5.14 montre la position de l'interface et le champ de vitesse global à l'instant $t = 17.5$, pour deux différents temps de relaxation adimensionnés : 0.1 et 50. Le cas $\lambda_2 = 0.1$, correspond à un fluide presque newtonien. Pour ce cas test, la position de l'interface diffère fortement suivant le temps de relaxation. On constate, tout comme dans la section précédente, que le fluide avec $\lambda_2 = 50$ a tendance à mieux occuper les branches du réseau.

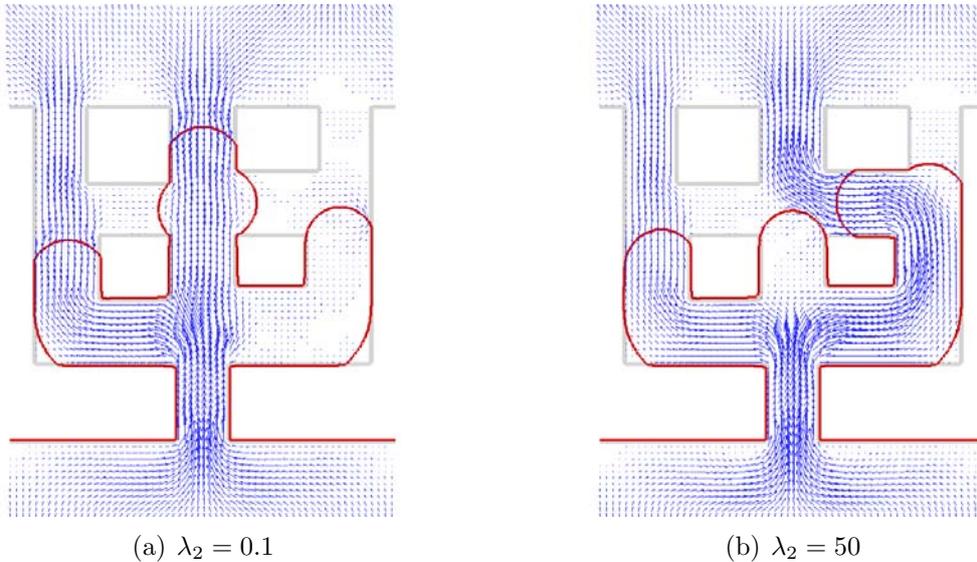


FIGURE 5.14 – Comparaison de la position de l'interface à l'instant $t = 17.5$.

Conclusions et perspectives

L'objectif de ce travail était de modéliser l'écoulement diphasique newtonien / viscoélastique dans un réseau de microcanaux. En effet, on souhaite mieux comprendre la récupération assistée des hydrocarbures à l'échelle du pore par injection de polymères.

Dans un premier temps, nous nous sommes occupés de la modélisation physique. En microfluidique, les effets visqueux dominent les effets inertiels, on utilise les équations de Stokes pour décrire l'écoulement d'un fluide à cette échelle. L'écoulement du fluide viscoélastique a été modélisé par le modèle Oldroyd-B. En ce qui concerne la modélisation de la dynamique du point triple, nous avons choisi le modèle de Cox qui a été validé par des études expérimentales.

Une fois le modèle physique établi, l'étape suivante a consisté à choisir et étudier les outils mathématiques nécessaires à la résolution numérique du problème. Pour le suivi de l'interface, on avait besoin d'une méthode qui permettait d'obtenir facilement la courbure et la détection précise des points triples. Donc, on a choisit la méthode Level Set. Le milieu poreux a été représenté par un réseau de microcanaux interconnectés. Afin de s'affranchir de la difficulté d'imposer des conditions au bord des microcanaux, qui obligerait à créer des maillages adaptés à la géométrie, la méthode de pénalisation à été utilisée.

La résolution numérique des problèmes qui impliquent une interface en mouvement, a besoin de la mise en place des schémas numériques d'ordre suffisamment élevé. Pour cela, un schéma WENO-5 a été utilisé lors de la discrétisation spatiale de l'équation de transport de la fonction Level Set. De plus, pour localiser plus précisément les points triples, cette discrétisation a été faite sur un maillage deux fois plus fin que le maillage de résolution des équations de Stokes. Nous avons également souligné la nécessité de redistancer la Level Set pour assurer un calcul correct de la courbure à l'interface. Ensuite, nous avons décrit la contribution principale issu de cette thèse : le traitement numérique de la modélisation de la dynamique du point triple. La méthodologie numérique mise en œuvre comporte plusieurs étapes : une première étape de détection, puis le calcul de l'angle de contact et enfin l'imposition de la vitesse de glissement par la méthode de pénalisation.

La principale difficulté rencontrée a été la modélisation du point triple couplé à la méthode de pénalisation. Pour cette raison, une partie importante de notre

travail est dédiée à la validation de la méthodologie développée. Pour cela, nous avons comparé le comportement de l'angle de contact et de la vitesse de glissement du point triple, la forme du ménisque et le rayon de courbure à l'interface avec des données expérimentales. Cette constatation a été faite d'un point de vue qualitatif.

Une fois que l'ensemble des méthodes numériques a été vérifié, nous avons pu nous consacrer à l'objectif final de la thèse : la simulation d'un écoulement diphasique où un fluide newtonien en place dans un réseau de microcanaux est déplacé par un fluide viscoélastique. Les premières résultats nous permettent de conclure que les fluides viscoélastiques occupent mieux les grands canaux indépendamment de la direction. Cependant, des instabilités numériques apparaissent à partir du moment où le temps de relaxation augmente. Pour remédier à ce problème, un terme de diffusion a été ajouté à l'équation du tenseur de conformation.

En perspective, comme on l'a déjà évoqué dans le chapitre 4, il serait intéressant d'implémenter la pénalisation à l'ordre 2 pour la modélisation de la dynamique de la ligne triple. Cette méthode permettrait d'imposer plus précisément la vitesse de glissement du point triple au bord du domaine fluide. En ce qui concerne la loi de Cox, elle est uniquement valide pour un fluide newtonien. On pourrait améliorer la modélisation de la ligne triple dans le cas d'un fluide viscoélastique en considérant une viscosité effective qui décroît. Pour comparer les résultats numériques avec des expériences, il est nécessaire de faire des simulations dans de très grand réseaux. Enfin, l'implémentation tridimensionnelle de la méthodologie numérique devrait être envisagée.

Annexe A

Solution analytique du modèle Oldroyd-B dans un canal

Dans le cas de l'écoulement d'un fluide viscoélastique, le système d'équations (3.1) devient :

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \\ -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{U} + \frac{\eta_p}{\lambda} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} = \mathbf{0} \\ \frac{\boldsymbol{\tau} - \mathbf{I}}{\lambda} + \frac{\partial \boldsymbol{\tau}}{\partial t} + (\mathbf{U} \cdot \nabla) \boldsymbol{\tau} - (\nabla \mathbf{U}) \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} (\nabla \mathbf{U})^t = \mathbf{0} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

De manière explicite, le système (A.1) s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \\ -\frac{\partial p}{\partial x} + \eta \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\eta_p}{\lambda} \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right) = 0, \\ -\frac{\partial p}{\partial y} + \eta \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\eta_p}{\lambda} \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \right) = 0, \\ \frac{(\tau_{xx} - 1)}{\lambda} + \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial t} + u \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial y} - 2 \frac{\partial u}{\partial x} \tau_{xx} - 2 \frac{\partial u}{\partial y} \tau_{xy} \right) = 0, \\ \frac{\tau_{xy}}{\lambda} + \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial t} + u \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial y} \tau_{yy} - \frac{\partial v}{\partial x} \tau_{xx} \right) = 0, \\ \frac{(\tau_{yy} - 1)}{\lambda} + \left(\frac{\partial \tau_{yy}}{\partial t} + u \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial x} + v \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} - 2 \frac{\partial v}{\partial x} \tau_{xy} - 2 \frac{\partial v}{\partial y} \tau_{yy} \right) = 0. \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Nous nous intéressons à l'écoulement d'un fluide viscoélastique dans un canal de largeur H , la vitesse \mathbf{U} s'écrit donc $\mathbf{U} = (0, v(x))$. On se place dans l'hypothèse d'un écoulement complètement développé et donc les composantes du tenseur polymérique ne dépend pas de y . Alors, l'équation de conservation de la masse dévient :

$$\frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{A.3})$$

et les équations du tenseur de conformation,

$$\tau_{xx} = 1, \quad (\text{A.4})$$

$$\tau_{xy} = \lambda \frac{\partial v}{\partial x}, \quad (\text{A.5})$$

$$\tau_{yy} = 1 + 2\lambda^2 \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right). \quad (\text{A.6})$$

À partir des équations de conservation de la quantité de mouvement du système (A.1), on obtient :

$$\frac{\partial p}{\partial x} = 0, \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = (\eta + \eta_p) \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}. \quad (\text{A.8})$$

En intégrant deux fois (A.8), on obtient donc l'expression de la vitesse :

$$v(x) = \frac{x^2}{2(\eta + \eta_p)} \frac{\partial p}{\partial y} + C_1 x + C_2 \quad (\text{A.9})$$

Sachant que la vitesse s'annule au bord, c'est à dire, $v(0) = 0$ et $v(H) = 0$, on a

$$\begin{aligned} C_1 &= -\frac{H}{2(\eta + \eta_p)} \frac{\partial p}{\partial y}, \\ C_2 &= 0. \end{aligned}$$

Alors,

$$v(x) = \frac{1}{2(\eta + \eta_p)} \frac{\partial p}{\partial y} (x^2 - Hx). \quad (\text{A.10})$$

Maintenant on calcule le débit dans le canal, noté q ,

$$q = \int_0^H v(x) dx = \frac{1}{2(\eta + \eta_p)} \frac{\partial p}{\partial y} \int_0^H (x^2 - Hx) dx, \quad (\text{A.11})$$

ce qui donne

$$\frac{\partial p}{\partial y} = -\frac{12q(\eta + \eta_p)}{H^3}. \quad (\text{A.12})$$

On remplace (A.12) dans (A.10) et on obtient l'expression pour la vitesse,

$$v(x) = \frac{6q}{H} \left(\frac{x}{H} - \frac{x^2}{H^2} \right). \quad (\text{A.13})$$

Pour un débit $q = 1$ imposé dans un longuer $H = 1$, l'équation (A.13) dévient,

$$v(x) = 6(x - x^2). \quad (\text{A.14})$$

Annexe B

Interpolations pour calculer la vitesse dans le maillage deux fois plus fin

L'équation de transport de la fonction Level-Set est résolue dans un maillage deux fois plus fin avec un schéma WENO-5. Le schéma WENO-5 s'écrit sur un grille où les variables ϕ et $\tilde{\mathbf{U}}$ sont localisées aux mêmes points. Donc, il est nécessaire d'interpoler la vitesse obtenue lors de la résolution de Stokes aux sommets des mailles. Pour cela, on procède de la manière suivante :

Composante u

1. D'abord, on impose la condition limite à l'entrée (cf. Section 2.6) :

$$\tilde{u}_{k,l} = 0, \text{ pour } k = 1, 2, 3, \dots, 2N_x+1 \text{ et } l = 1.$$

2. On récupère les valeurs de u du maillage décalé utilisé pour résoudre Stokes :

$$\tilde{u}_{k,l} = u_{i,j} \quad \text{pour } \begin{array}{l} k = 1, 3, 5, \dots, 2N_x+1 \text{ et } l = 2, 4, 5, \dots, 2N_y+2 \\ i = 1, 2, 3, \dots, N_x+1 \text{ et } j = 1, 2, 3, \dots, N_y+1 \end{array}$$

3. On fait l'interpolation :

$$\tilde{u}_{k,l} = \frac{\tilde{u}_{k-1,l} + \tilde{u}_{k+1,l}}{2} \quad \text{pour } k = 1, 3, 5, \dots, 2N_x+1 \text{ et } l = 2, 4, 6, \dots, 2N_y+2$$

4. Et pour les points qui restent à calculer, on fait l'interpolation :

$$\tilde{u}_{k,l} = \frac{\tilde{u}_{k,l-1} + \tilde{u}_{k,l+1}}{2} \quad \text{pour } k = 1, 2, 3, \dots, 2N_x+1 \text{ et } l = 3, 5, 7, \dots, 2N_y+1$$

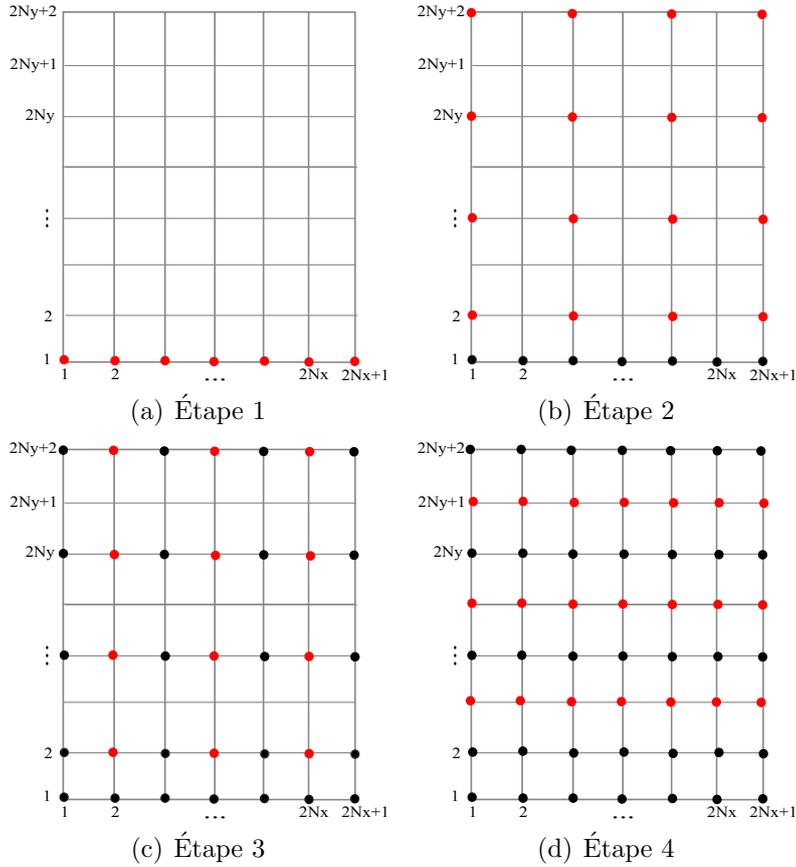


FIGURE B.1 – Étapes pour interpoler u dans le maillage deux fois plus fin. Les points en rouge sont les points où la vitesse est calculée à l'étape actuelle. Les points en noir sont les vitesses déjà calculées.

Composante v

1. D'abord, on impose la condition limite à l'entrée (cf. Section 2.6) :

$$\tilde{v}_{k,l} = v_{inj}, \text{ pour } k = 1, 2, 3, \dots, 2Nx+1 \text{ et } l = 1.$$

2. Comme pour la première composante, on récupère les valeurs de v du maillage décalé utilisé pour résoudre Stokes :

$$\tilde{v}_{k,l} = v_{i,j} \quad \text{pour } \begin{array}{l} k = 2, 4, 6, \dots, 2Nx \text{ et } l = 3, 5, 7, \dots, 2Ny+1 \\ i = 1, 2, 3, \dots, Nx \text{ et } j = 1, 2, 3, \dots, Ny+1 \end{array}$$

3. On fait l'interpolation :

$$\tilde{v}_{k,l} = \frac{\tilde{v}_{k,l+1} + \tilde{v}_{k,l-1}}{2} \quad \text{pour } k = 2, 4, 6, \dots, 2Nx \text{ et } l = 2, 4, 6, \dots, 2Ny$$

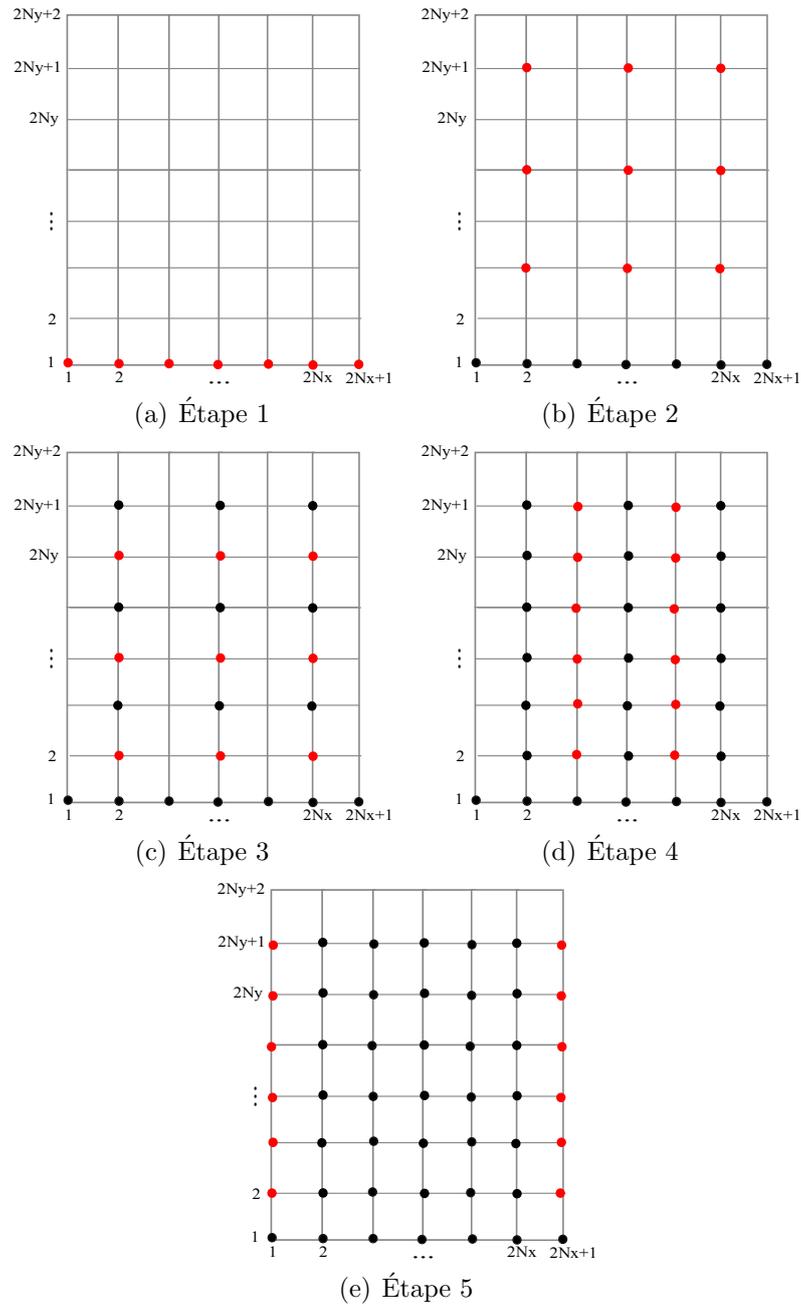


FIGURE B.2 – Étapes pour interpoler v dans le maillage deux fois plus fin. Les points en rouge sont les points où la vitesse est calculée à l'étape actuelle. Les points en noir sont les vitesses déjà calculées.

4. Il reste encore des points à calculer à l'intérieur du domaine, alors on fait l'interpolation :

$$\tilde{v}_{k,l} = \frac{\tilde{v}_{k-1,l} + \tilde{v}_{k+1,l}}{2} \quad \text{pour } k = 3, 5, 7, \dots, 2N_x-1 \text{ et } l = 2, 3, 4, \dots, 2N_y+1.$$

5. La vitesse au bords gauche et droit est calculée avec la condition périodique (cf. Section 2.6) :

$$\begin{aligned}\tilde{v}_{1,l} &= \tilde{v}_{2N_x,l} & \text{pour } l &= 1, 2, 3, \dots, 2N_y+1 \\ \tilde{v}_{2N_x+1,l} &= \tilde{v}_{1,l} & \text{pour } l &= 1, 2, 3, \dots, 2N_y+1\end{aligned}$$

Bibliographie

- [1] S. AFKHAMI, S. ZALESKI, AND M. BUSSMANN, *A mesh-dependent model for applying dynamic contact angles to VOF simulations*, J. Comput. Phys., 228 (2009), p. 5370–5389.
- [2] P. ANGOT, C.-H. BRUNEAU, AND P. FABRIE, *A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows*, Numerische Mathematik, 81 (1999), pp. 497–520.
- [3] G. K. BATCHELOR, *An Introduction to Fluid Dynamics*, Cambridge University Press, Feb. 2000.
- [4] J. B. BELL, P. COLELLA, AND H. M. GLAZ, *A second-order projection method for the incompressible navier-stokes equations*, Journal of Computational Physics, 85 (1989), pp. 257–283.
- [5] R. BIRD, R. ARMSTRONG, AND O. HASSAGER, *Dynamic of polymeric liquids*, vol. 1, John Wiley & Sons, 2 ed., 1987.
- [6] R. BIRD, C. CURTISS, R. ARMSTRONG, AND O. HASSAGER, *Dynamic of polymeric liquids*, vol. 2, John Wiley & Sons, 1987.
- [7] T. D. BLAKE, *The physics of moving wetting lines*, Journal of Colloid and Interface Science, 299 (2006), pp. 1–13. PMID : 16631781.
- [8] V. BLANCHARD, *Étude de l'influence d'une couche de polymère adsorbé sur des écoulements diphasiques (gaz/eau) dans des milieux poreux modèles*, PhD thesis, Université Bordeaux 1, Bordeaux, 2005.
- [9] D. BONN, J. EGGERS, J. INDEKEU, J. MEUNIER, AND E. ROLLEY, *Wetting and spreading*, Reviews of Modern Physics, 81 (2009), pp. 739–805.
- [10] C.-H. BRUNEAU, *Boundary conditions on artificial frontiers for incompressible and compressible navier-stokes equations*, Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 34 (2000), p. 12.
- [11] B. BRYANT, *Modeling moving droplets : A precursor film approach*, PhD thesis, Harvey Mudd College, Claremont, 2003.
- [12] Y. C. CHANG, T. Y. HOU, B. MERRIMAN, AND S. OSHER, *A level set formulation of eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows*, Journal of Computational Physics, 124 (1996), pp. 449–464.

- [13] H.-Y. CHEN, D. JASNOW, AND J. VIÑALS, *Interface and contact line motion in a two phase fluid under shear flow*, Physical Review Letters, 85 (2000), pp. 1686–1689.
- [14] R. P. CHHABRA, *Bubbles, drops, and particles in non-Newtonian fluids*, CRC Press, 1993.
- [15] D. L. CHOPP, *Computing minimal surfaces via level set curvature flow*, Journal of Computational Physics, 106 (1993), pp. 77–91.
- [16] C. COTTIN, *Drainage dans des micromodèles de milieux poreux. Application à la récupération assistée du pétrole*, PhD thesis, Université Bordeaux 1, Bordeaux, 2010.
- [17] C. COTTIN, H. BODIGUEL, AND A. COLIN, *Drainage in two-dimensional porous media : From capillary fingering to viscous flow*, Physical Review E, 82 (2010), p. 046315.
- [18] F. COUDERC, *Développement d'un code de calcul pour la simulation d'écoulements de fluides non miscibles. Application à la désintégration assistée d'un jet par un courant gazeux.*, PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, Toulouse, 2007.
- [19] R. G. COX, *The dynamics of the spreading of liquids on a solid surface. part 1. viscous flow*, Journal of Fluid Mechanics, 168 (1986), pp. 169–194.
- [20] B. J. DALY AND W. E. PRACHT, *Numerical study of density current surges*, Physics of Fluids, 11 (1968), pp. 15–30.
- [21] P. G. DE GENNES, *Wetting : statics and dynamics*, Reviews of Modern Physics, 57 (1985), pp. 827–863.
- [22] J. A. DIEZ, L. KONDIC, AND A. BERTOZZI, *Global models for moving contact lines*, Physical review. E, Statistical, nonlinear, and soft matter physics, 63 (2001), p. 011208. PMID : 11304247.
- [23] H. DING AND P. D. M. SPELT, *Wetting condition in diffuse interface simulations of contact line motion*, Physical Review E, 75 (2007), p. 046708.
- [24] E. B. DUSSAN, *On the spreading of liquids on solid surfaces : Static and dynamic contact lines*, Annual Review of Fluid Mechanics, 11 (1979), pp. 371–400.
- [25] M. FORTIN, R. GLOWINSKI, AND T.-I.-S. (FIRM), *Augmented Lagrangian methods*, Elsevier, 1983.
- [26] C. GALUSINSKI AND P. VIGNEAUX, *On stability condition for bifluid flows with surface tension : Application to microfluidics*, Journal of Computational Physics, 227 (2008), pp. 6140–6164.
- [27] P. H. GASKELL, P. K. JIMACK, Y.-Y. KOH, AND H. M. THOMPSON, *Development and application of a parallel multigrid solver for the simulation of spreading droplets*, International Journal for Numerical Methods in Fluids, 56 (2008), pp. 979–989.

- [28] P.-G. D. GENNES, F. BROCHARD-WYART, AND D. QUÉRÉ, *Gouttes, bulles, perles et ondes*, Belin, 2002.
- [29] P.-G. D. GENNES, F. B. WYART, AND D. QUÉRÉ, *Gouttes, bulles, perles et ondes*, Belin, May 2004.
- [30] J.-F. GERBEAU AND T. LELIEVRE, *Generalized navier boundary condition and geometric conservation law for surface tension*, (2008).
- [31] GLIMM, O. MCBRYAN, R. MENIKOFF, AND D. H. SHARP, *Front tracking applied to rayleigh–taylor instability*, SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 7 (1986), pp. 230–251.
- [32] E. GUYON, J. P. HULIN, AND L. PETIT, *Hydrodynamique physique*, L’Editeur : EDP Sciences, 2001.
- [33] Y. HALLEZ AND D. LEGENDRE, *Interaction between two spherical bubbles rising in a viscous liquid*, Journal of Fluid Mechanics, 673 (2011), pp. 406–431.
- [34] F. HARLOW AND E. WELCH, *Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface*, Physics of Fluids, 8 (1965), pp. 2182–2189.
- [35] A. HARTEN, B. ENGQUIST, S. OSHER, AND S. R. CHAKRAVARTHY, *Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, III*, Journal of Computational Physics, 131 (1997), pp. 3–47.
- [36] C. HIRT AND B. NICHOLS, *Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries*, Journal of Computational Physics, 39 (1981), pp. 201–225.
- [37] L. M. HOCKING, *A moving fluid interface. part 2. the removal of the force singularity by a slip flow*, Journal of Fluid Mechanics, 79 (1977), pp. 209–229.
- [38] R. L. HOFFMAN, *A study of the advancing interface. i. interface shape in liquid–gas systems*, Journal of Colloid and Interface Science, 50 (1975), pp. 228–241.
- [39] D. JACQMIN, *Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface*, Journal of Fluid Mechanics, 402 (2000), pp. 57–88.
- [40] G.-S. JIANG AND C.-W. SHU, *Efficient implementation of weighted ENO schemes*, Journal of Computational Physics, 126 (1996), pp. 202–228.
- [41] S. G. KANDLIKAR, *Heat Transfer And Fluid Flow in Minichannels And Microchannels*, Elsevier, 2006.
- [42] V. V. KHATAVKAR, P. D. ANDERSON, AND H. E. H. MEIJER, *Capillary spreading of a droplet in the partially wetting regime using a diffuse-interface model*, Journal of Fluid Mechanics, 572 (2007), pp. 367–387.
- [43] R. G. LARSON, *Constitutive Equations for Polymer Melts and Solutions*, Butterworths, 1988.
- [44] D. LEGENDRE, J. MAGNAUDET, AND G. MOUGIN, *Hydrodynamic interactions between two spherical bubbles rising side by side in a viscous liquid*, Journal of Fluid Mechanics, 497 (2003), pp. 133–166.

- [45] T. LELIEVRE, *Modèles multi-échelles pour les fluides viscoélastiques*, PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, Champs-sur-Marne, 2004.
- [46] R. LEVI, *Partial differential Equations of Thin Liquid Films : Analysis and Numerical Simulation*, PhD thesis, North Carolina State University, Raleigh, 2005.
- [47] X. LIU, S. OSHER, AND T. CHAN, *Weighted essentially non-oscillatory schemes*, Journal of Computational Physics, 115 (1994), pp. 200–212.
- [48] E. MARCHANDISE, *Simulation of three-dimensional two-phase flow*, PhD thesis, Université Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, 2006.
- [49] C. MASSELON, *Effets non locaux dans un écoulement microfluidique de micelles géantes*, PhD thesis, Université Bordeaux 1, Bordeaux, 2008.
- [50] J. A. MORIARTY, L. W. SCHWARTZ, AND E. O. TUCK, *Unsteady spreading of thin liquid films with small surface tension*, Physics of Fluids A : Fluid Dynamics, 3 (1991), pp. 733–742.
- [51] R. G. OWENS AND T. N. PHILLIPS, *Computational Rheology*, Imperial College Press, 2002.
- [52] S. OZEN UNVERDI AND G. TRYGGVASON, *Computations of multi-fluid flows*, Physica D : Nonlinear Phenomena, 60 (1992), pp. 70–83.
- [53] J. E. PILLIOD AND E. G. PUCKETT, *Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces*, Journal of Computational Physics, 199 (2004), pp. 465–502.
- [54] T. QIAN, X.-P. WANG, AND P. SHENG, *Molecular hydrodynamics of the moving contact line in two-phase immiscible flows*, arXiv :cond-mat/0510403, (2005). Commun. Comput. Phys. 1, 1-52 (2006).
- [55] T. QUIAN, *Generalized navier boundary condition for the moving contact line*, Communications in Mathematical Sciences, 1 (2003), pp. 333–341. Mathematical Reviews number (MathSciNet) : MR1980479.
- [56] E. RAME, *Moving contact line problem : state of the contact angle boundary condition*, (2002), pp. 3602–3618.
- [57] W. REN AND W. E, *Boundary conditions for the moving contact line problem*, Physics of Fluids, 19 (2007), p. 022101.
- [58] W. J. RIDER AND D. B. KOTHE, *Reconstructing volume tracking*, Journal of Computational Physics, 141 (1998), pp. 112–152.
- [59] A. SARTHOU, *Méthodes de domaines fictifs d'ordre élevé pour les équations elliptiques et de Navier Stokes. Application au couplage fluide structure.*, PhD thesis, Université Bordeaux 1, Bordeaux, 2009.
- [60] R. SCARDOVELLI AND S. ZALESKI, *Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow*, Annual Review of Fluid Mechanics, 31 (1999), pp. 567–603.

- [61] L. W. SCHWARTZ AND R. R. ELEY, *Simulation of droplet motion on low-energy and heterogeneous surfaces*, Journal of Colloid and Interface Science, 202 (1998), pp. 173–188.
- [62] P. SEPPECHER, *Moving contact lines in the cahn-hilliard theory*, International Journal of Engineering Science, 34 (1996), pp. 977–992.
- [63] J. A. SETHIAN, *A fast marching level set method for monotonically advancing fronts.*, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 93 (1996), pp. 1591–1595.
- [64] J. A. SETHIAN, *Level set methods and fast marching methods*, Level Set Methods and Fast Marching Methods, by J. A. Sethian, pp. 400. ISBN 0521645573. Cambridge, UK : Cambridge University Press, June 1999., -1 (1999).
- [65] P. SHENG AND M. ZHOU, *Immiscible-fluid displacement : Contact-line dynamics and the velocity-dependent capillary pressure*, Physical Review A, 45 (1992), p. 5694.
- [66] P. SMEREKA, *Level set methods for two-fluid flows*, 1997.
- [67] T. SOCHI, *Single-phase flow of non-newtonian fluids in porous media*, (2009).
- [68] P. D. SPELT, *A level-set approach for simulations of flows with multiple moving contact lines with hysteresis*, Journal of Computational Physics, 207 (2005), pp. 389–404.
- [69] R. SURESHKUMAR AND A. N. BERIS, *Effect of artificial stress diffusivity on the stability of numerical calculations and the flow dynamics of time-dependent viscoelastic flows*, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 60 (1995), pp. 53 – 80.
- [70] P. TABELING, *Introduction à la microfluidique*, Belin, 2003.
- [71] TANGOONE, *Calcul numérique et stabilité d'écoulements diphasiques tridimensionnels en microfluidique*, PhD thesis, Université Bordeaux 1, Bordeaux, 2007.
- [72] P. A. THOMPSON AND M. O. ROBBINS, *Simulations of contact-line motion : Slip and the dynamic contact angle*, Physical Review Letters, 63 (1989), pp. 766–769.
- [73] TOTAL, *EOR - augmenter la récupération. groupe d'Exploration & production*, 2008.
- [74] P. TRONTIN, *Développement d'une approche de type LES pour la simulation d'écoulements diphasiques avec interface. Application à l'atomisation primaire.*, PhD thesis, Université de Toulouse, Toulouse, 2009.
- [75] G. TRYGGVASON AND S. O. UNVERDI, *Computations of three dimensional rayleigh taylor instability*, Physics of Fluids A : Fluid Dynamics, 2 (1990), pp. 656–659.

-
- [76] S. O. UNVERDI AND G. TRYGGVASON, *A front tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows*, Journal of Computational Physics, 100 (1992), pp. 25–37.
- [77] P. VIGNEAUX, *Méthodes Level Set pour des problèmes d'interface en microfluidique*, PhD thesis, Université Bordeaux 1, Bordeaux, 2007.
- [78] G. M. WHITESIDES, *The origins and the future of microfluidics*, Nature, 442 (2006), pp. 368–373.
- [79] Y. L. XIONG, *Analyse par simulation numérique de la réduction de la traînée et des caractéristiques d'écoulements bidimensionnels par l'ajout de polymères en solution*, PhD thesis, Université Bordeaux 1, Bordeaux, 2010.
- [80] S. ZAHEDI, K. GUSTAVSSON, AND G. KREISS, *A conservative level set method for contact line dynamics*, J. Comput. Phys., 228 (2009), p. 6361–6375.