

République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



**Ecole Nationale Polytechnique**  
**Département de Génie Mécanique**

**Mémoire de Projet de fin d'étude d'ingénieur**

Thème

***Simulation du mélange de fluides  
miscibles dans les dispositifs  
microfluidiques***

**Présenté par :**

- AMIROUCHE Amine  
- BOUHADJIRMA Abderrazak

**Proposé et Dirigé par :**

Dr.N.TAYEBI  
Prof. A. SMAILI

**ملخص** يهدف هذا المشروع إلى محاكاة عددية ثلاثية الأبعاد لظاهرة خلط السوائل القابلة للامتزاج في الأجهزة المجهرية. في هذا الإطار، تم طرح مشكلة الخليط على المستوى المجهرية. ثم أستعملت معادلات الاستمرارية، نافيتي س٤طوكس، وكذا معادلة نقل المادة و تم حل المشكل الرياضي الناتج بواسطة برنامج كُومسُول مُولتِي فيزيكس (4,2 أ). أولاً بهدف البرهنة العددية لتأثير مُختلف العوامل الفيزيائية على نوعية المزيج و هذا داخل مازج بشكُل T. ثم لاحقاً تم إقتراح تصميم لخلّاط مجهري بشكُل أفعواني و كذا تطويره من أجل تحقيق أقصى قدرٍ ممكنٍ من التجانس في الخليط مع الأخذ بعين الإعتبار لحساسية النتائج العددية لحجم التقسيم الشبكي.

**الكلمات المفتاحية :** الموائع المجهرية؛ المحاكاة العددية؛ كُومسُول مُولتِي فيزيكس؛ الموائع القابلة للإمتزاج خلّاط مجهري.

**Résumé** Ce projet vise a simuler numériquement en 3D le phénomène de mélange de fluides miscibles dans les dispositifs microfluidiques. Pour ce faire, la problématique du mélange à l'échelle microscopique a été présentée, ensuite, les équations de continuité, Navier-Stokes ainsi que l'équation de transfert de matière ont été considérées. Le problème mathématique résultant a été résolu par le code Comsol multiphysics 4.2a. D'abord, pour démontrer par simulation sur une géométrie en forme de  $\tau$  l'influence des différents paramètres physique sur la qualité du mélange, ensuite, une configuration typique de micro-mélangeur passif sous forme de serpentin a été proposée et optimisée pour atteindre le maximum d'homogénéité tout en tenant compte de la dépendance des solutions numériques de la taille du maillage.

**Mots-clés :** Microfluidique ; simulation numérique ; Comsol multi-physics ; fluide miscible ; micro-mélangeur.

**Abstract** This project aims to carry out numerical simulations in 3D to the mixing phenomenon of miscible fluids within microfluidic devices, for this purpose, the problem of mixture at the microscopic scale was presented, then, the continuity, Navier-Stokes as well as the mass transfer equations were considered. The resulting mathematical model has been solved using Comsol multiphysics code. First, to demonstrate by simulation on a  $\tau$  shaped geometry the influence of different physical parameters on the mixture quality, then, a typical configuration of a passive micro-mixer in a serpentine geometry has been proposed and optimized to reach maximum homogeneity, while considering the dependance of numerical solutions on grid size.

**Key-words :** Microfluidics ; numerical simulation ; Comsol multi-physics ; miscible fluids ; micro-mixer.

## Remerciement

*Avant tout, on remercie ALLAH le tout puissant de nous avoir donné la volonté et le courage de mener à bien ce travail.*

*Un grand merci à notre encadreur, Dr TAYEBI Nouredine, chercheur au STANFORD university, de nous avoir inspiré le sujet de ce travail, et de nous avoir guidé par ses précieux conseils lors de sa réalisation ; grâce à sa grande modestie et surtout à sa disponibilité que nous avons pu mener à terme notre travail et le soutenir publiquement dans les délais.*

*Un grand merci aussi à notre co-promoteur Monsieur SAMILI Arezki, Professeur à l'E.N.P d'avoir mis à notre disposition la station de calcul, et de nous avoir encadré pour mener à terme ce travail.*

*Nous remercions tous les membres du jury qui nous ont fait l'honneur d'accepter de juger notre modeste travail. un très grand merci à nos camarades de classe et de l'école. on ne pourrait terminer sans une pensée à l'ensemble de nos enseignants. Qu'ils trouvent ici, l'expression de notre profonde gratitude.*

*Enfin nous remercions tous les gens que nous avons oublié de remercier !*

## *Dédicaces*

*je dédie notre travail à ma mère sans elle je serai pas la où je suis, à mon père pour le soutien moral qui m'a apporté, à mes deux sœurs et mon beau petit frère et toute ma famille qui m'a tant aidé, à ma chère milou et à sa famille, à mes amis Saïd Ilyas Mohamed.*

*BOUHADJIRMA Abderrazak*

*À mes parents à qui je dois tout, Que Dieu me les garde.*

*À mes aimables sœurs,*

*À toutes personnes ayant contribué à ma formation*

*Je dédie ce travail !*

*Amine*

# Table des matières

Résumé . . . . .	i
Remerciement . . . . .	ii
Dédicaces . . . . .	iii
Table des matières . . . . .	iv
Liste des figures . . . . .	vi
Liste des tableaux . . . . .	ix
Nomenclature . . . . .	x
Introduction générale . . . . .	1
<b>1 Généralités sur la microfluidique</b>	<b>3</b>
1.1 Introduction . . . . .	3
1.2 Mise en œuvre . . . . .	4
1.3 Propriétés des systèmes miniaturisés . . . . .	5
1.4 Contrôle des écoulements . . . . .	9
1.5 Fabrication de microsystèmes . . . . .	10
1.6 Les méthodes d'expérimentation . . . . .	13
<b>2 Les mélangeurs micro-fluidiques</b>	<b>17</b>
2.1 Difficultés du mélange dans la microfluidique . . . . .	17
2.2 Processus de diffusion . . . . .	19
2.3 Loi de Fick . . . . .	19
2.4 Coefficient de diffusion . . . . .	20
2.5 Principaux micro-systèmes pour le mélange . . . . .	20
<b>3 Modèle mathématique</b>	<b>32</b>
3.1 Hypothèses simplificatrices . . . . .	32
3.2 Les équations gouvernantes . . . . .	33
<b>4 Méthode numérique</b>	<b>35</b>
4.1 La simulation numérique en mécanique des fluides . . . . .	35
4.2 Les étapes à suivre . . . . .	36
4.3 Critique des résultats . . . . .	37
4.4 Méthode des éléments finis . . . . .	37
4.5 Comsol Multiphysics . . . . .	38
4.6 La modélisation 3D du phénomène de mélange sur Comsol-multiphysics	
4.2a . . . . .	40
4.7 Conclusion . . . . .	43

---

<b>Résultats et discussion</b>	<b>44</b>
<b>5 Mise en évidence de l'influence des différents paramètres physiques sur le mélange</b>	<b>44</b>
5.1 La différence entre l'efficacité du mixeur et la qualité du mélange . . .	44
5.2 Le micromixeur T . . . . .	45
5.3 L'influence de la variation de $Re$ . . . . .	46
5.4 Effet de la longueur du micro-mixeur sur l'intensité de mélange . . .	47
5.5 Effet de la viscosité des deux fluides sur la qualité du mélange . . . .	48
<b>6 Proposition d'un micro-mélangeur optimisé</b>	<b>49</b>
6.1 Avantage de la géométrie en serpent . . . . .	50
6.2 Comparaison entre deux configurations avec 4 et 6 entrées . . . . .	51
6.3 Variation du rapport hauteur/largeur . . . . .	53
6.4 Serpentin 6 entrées simple . . . . .	55
6.5 Serpentin 6 entrées avec obstacles triangulaires . . . . .	61
6.6 Serpentin 6 entrées avec obstacles circulaires . . . . .	66
6.7 Serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles triangulaires .	71
6.8 Serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles circulaires . .	76
6.9 Comparaison des différentes configurations . . . . .	81
<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>83</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>85</b>
<b>Annexe A</b>	<b>86</b>
<b>Annexe B</b>	<b>87</b>

# Introduction

La microfluidique est un domaine de recherche en pleine expansion depuis une dizaine d'années, dont la vitalité est nourrie par la diversité de ses applications. Sa définition historique, de physicien, est l'étude d'écoulements fluides dans des canaux, capillaires ou milieux poreux, dont la dimension la plus faible est de l'ordre de quelques microns. Cette définition n'est aujourd'hui plus suffisante pour couvrir l'ensemble des activités de recherches désignées par le terme "microfluidique", qui comprend entre autres l'étude de phénomènes physiques, la chimie analytique ou encore la biologie moléculaire. Cette diversité d'applications explique l'engouement actuel pour ce domaine de recherche, dont le développement a principalement eu lieu dans les universités possédant des centres de microfabrication qui se sont ouverts sur les départements de chimie et de biologie. Plusieurs pays possèdent de nombreux centres de recherche utilisant des techniques microfluidiques. Nous pouvons citer, entre autres, les Etats Unis, le Japon, la Suisse, les Pays-Bas, la Grande-Bretagne, etc. L'un des exemples le plus marquant de l'intérêt porté à la microfluidique par une large communauté de chercheurs est la multiplicité des colloques ou sessions microfluidiques dans les conférences nationales et internationales.

La microfluidique est à la fois une science et une technologie. Elle consiste en la mise en oeuvre d'écoulements à des échelles allant du micron à la centaine de microns. Cette échelle d'écoulement est très présente dans le monde biologique mais le passage à des constructions fluidiques artificielles de géométrie voulue a dû attendre l'adaptation des techniques photolithographiques issues de la microélectronique.

Comme les circuits intégrés micro fabriqués ont révolutionné le calcul en réduisant considérablement l'espace, l'effort, et le temps nécessaire pour les calculs. Les systèmes micro fluidiques tiennent la même promesse pour l'automatisation à grande échelle de la chimie et de la biologie, notamment la possibilité d'effectuer de nombreuses expériences rapidement et en parallèle, tout en consommant peu de réactif. Bien qu'il soit trop tôt pour dire si une telle vision sera réalisée, des progrès significatifs ont été réalisés, et diverses applications importantes pour la recherche scientifique et l'intérêt pratique ont été développés.

Lors des deux dernières décennies, des composants, des dispositifs micro fluidiques, et des systèmes ont été largement utilisés dans la biologie et les analyses chimiques. Parmi un large éventail d'applications de ces analyses, le mélange est essentiel dans les processus de l'activation des lymphocytes, la réaction de l'enzyme, le pliage de protéine, le séquençage ou la synthèse d'acides nucléiques et de nombreux systèmes chimiques micro fabriqués impliquant des synthèses chimiques complexes.

La problématique du mélange dans les dispositifs microfluidiques due à la laminarité des écoulements a suscité l'intérêt des physiciens à travers le monde afin de trouver d'éventuelles solutions pour contourner le problème.

Le but de ce travail est d'effectuer des simulations numériques en 3D du phénomène de mélange de fluides miscibles dans les dispositifs microfluidiques. Dans un premier lieu la mise en évidence de la problématique de mélange à travers la visualisation des résultats de la simulation de deux fluides miscibles dans un dispositif microfluidique a été faite, en deuxième lieu, une démonstration de l'influence des différents paramètres physiques (vitesse, pression, viscosité, etc) sur le phénomène de mélange a été réalisée par la résolution des différentes équations régissant le phénomène en utilisant le logiciel de résolution d'équations aux dérivées partielles COMSOL MultiPhysics 4.2a. Enfin une nouvelle structure pour l'optimisation du mélange à l'échelle microscopique a été proposée, étudiée et améliorée.

Ce mémoire est structuré en six chapitres :

- Généralité sur la microfluidique.
- Les mélangeurs micro-fluidique.
- Approche mathématique.
- Approche numérique.
- Mise en évidence de l'influence des différents paramètres physiques sur le mélange.
- Proposition d'un micro-mélangeur optimisé.

À la fin nous présenterons une conclusion générale, ainsi que les perspectives de notre travail.

# Chapitre 1

## Généralités sur la microfluidique

### Sommaire

---

<b>1.1</b>	<b>Introduction</b>	<b>3</b>
<b>1.2</b>	<b>Mise en œuvre</b>	<b>4</b>
<b>1.3</b>	<b>Propriétés des systèmes miniaturisés</b>	<b>5</b>
1.3.1	Validité de l'approche hydrodynamique	7
1.3.2	Avantages de la miniaturisation	8
<b>1.4</b>	<b>Contrôle des écoulements</b>	<b>9</b>
<b>1.5</b>	<b>Fabrication de microsystèmes</b>	<b>10</b>
<b>1.6</b>	<b>Les méthodes d'expérimentation</b>	<b>13</b>
1.6.1	Mesures de pression	13
1.6.2	Mesures de température	14
1.6.3	Mesure de débit	15
1.6.4	Mesures de vitesse	16

---

Ce chapitre est un résumé sur la microfluidique, an allant d'un bref historique jusqu'aux différentes techniques de fabrication et de mesures utilisées en passant par les propriétés des systèmes miniaturisés.

### 1.1 Introduction

Que dire d'un domaine à la fois ancien dans les principes qui le fondent et pourtant complètement d'actualité dans la recherche actuelle, fourmillant d'idées nouvelles et d'applications originales ? La microfluidique a connu un véritable essor depuis le début des années 1990, s'est divisée en plusieurs branches allant de la mécanique des fluides jusqu'à la biologie en passant par la chimie, pour arriver aujourd'hui à un point de maturation tel que les promesses faites par cette jeune discipline en termes d'application à ces divers domaines commencent à être tenues.

Si l'on peut désigner la microfluidique comme une « vieille » discipline, c'est que celle-ci est basée sur des écoulements fluides à petite échelle (de 10 à 100  $\mu\text{m}$  typiquement), dont l'étude expérimentale remonte maintenant à plus de 150 ans grâce

au médecin français Jean-Louis-Marie Poiseuille<sup>1</sup>, qui s'intéressait à la circulation du sang dans des capillaires. Il s'agit toutefois d'une approche extrêmement réductrice, on pourrait de même déclarer que la mécanique des fluides a cessé d'être un axe de recherche entre 1820 et 1850 lorsque Navier puis Stokes ont posé les équations fondatrices de ce domaine. Nous fixerons donc les débuts de notre récit à la seconde moitié du 20<sup>ème</sup> siècle.

La microfluidique appartient au champ plus large des microsystèmes électromécaniques ou MEMS (micro-electromechanical systems en anglais). Suite au discours visionnaire de Feynman<sup>2</sup> en 1959 suggérant que la miniaturisation pourrait permettre l'étude de phénomènes complexes et alors peu accessibles, desquels devrait découler de nombreuses d'applications potentielles, les premiers MEMS, surfant sur le développement spectaculaire de l'industrie de la microélectronique et de la technologie du silicium, apparaissent dans les années 1980[9].

Des exemples de MEMS « grand public » sont ainsi les actionneurs d'airbag ou les têtes d'imprimantes à jet d'encre, faisant intervenir phénomènes électriques, fluidiques et mécaniques au sein d'un système de quelques centaines de microns fabriqué en silicium. Parallèlement, la microfluidique, s'intéressant plus particulièrement au mouvement des fluides au sein de canaux microfabriqués va trouver naturellement ses premières applications dans l'analyse biologique ou chimique. Au-delà de quelques tentatives isolées d'intégration de canaux micrométriques, de pompes et de vannes sur support silicium, que l'on voit apparaître dès 1975, c'est en 1990 que se profile le concept de « laboratoire sur puce », avec la promesse d'améliorer rendement et vitesse des analyses chimiques ou biologiques par intégration de multiples étapes au sein de microcanaux permettant de travailler sur des volumes inférieurs au microlitre. Les « puces » microfluidiques sont le support des microcanaux, par analogie avec les puces électroniques supportant les circuits intégrés, et c'est sur ce principe que va se développer une multitude d'applications. Il est important de mentionner ici que si, comme le suggérait déjà Feynman, la microfluidique n'a pas donné naissance à des phénomènes physiques nouveaux, elle a permis et motivé de nombreuses études théoriques fondamentales, évidemment sur différents types d'écoulements à petite échelle, mais aussi dans des domaines plus éloignés comme la cinétique chimique ou l'électrophorèse d'ADN[9].

## 1.2 Mise en œuvre

Les premières applications microfluidiques voient donc le jour dans les années 1990 et consistent principalement en la miniaturisation de techniques classiques d'analyse telles que la chromatographie en phase liquide ou l'électrophorèse [9]. Ces méthodes progressent jusqu'aux années 1995 avec l'intégration de détecteurs optiques ou électrochimiques et l'amélioration des performances de séparation, ainsi que l'utilisation sur puce de techniques de séparation plus élaborées.

---

1. **Poiseuille** 1797-1869 physicien et médecin français, réalisateur de différents ouvrages traitant l'hémodynamique.

2. **Richard Feynman** 1918-1988 physicien américain, lauréat du Nobel de physique 1965 sur des travaux en électrodynamique quantique.

Il est difficile de désigner tel ou tel système comme étant le premier élément microfluidique jamais fabriqué. Néanmoins, deux systèmes apparaissent régulièrement dans la littérature comme des précurseurs. L'équipe de Little a développé en 1978 un microsystème réfrigérant pouvant descendre à la température de 80 K en quelques minutes avec un cycle de Joule-Thomson, les échanges thermiques étant grandement accrus grâce à la miniaturisation.

En 1979, le premier système de chromatographie miniaturisé a été réalisé pour séparer des hydrocarbures en phase gazeuse. Ce système possédait déjà plusieurs fonctions avancées, telles une vanne pneumatique et un capteur de débit, mais il a fallu attendre près de 20 ans pour assister à un réel développement de la microfluidique. On peut expliquer ce retard par la technicité nécessaire à la fabrication des microsystèmes et aux cloisonnements existants entre technologues, physiciens et chimistes. Le transfert des connaissances a été permis par la multiplication des centres de micro-fabrication au sein des grandes universités.

La redécouverte des microcanaux a permis à des physiciens d'étudier des phénomènes fondamentaux, puis des chimistes et des biologistes commencèrent à utiliser la microfluidique à partir du milieu des années 90. Parmi le grand nombre de publications relatives à la microfluidique, deux orientations principales peuvent être distinguées.

D'une part, la microfluidique peut concerner l'étude fine des phénomènes à microéchelle. Dans cette optique nous pouvons mentionner, entre autres, les phénomènes de glissements à l'interface liquide-solide, et le processus de micromélange de deux fluides, qui sera traité dans notre mémoire.

D'autre part, la microfluidique peut s'intéresser à des systèmes finalisés ayant des applications précises : c'est le cas notamment des systèmes d'analyses chimiques ou biologiques. Les apports de la microfluidique sont alors multiples : grande sensibilité, portabilité ou haut débit. Ce domaine des microsystèmes capables d'effectuer des analyses totales intégrées, plus connu sous le nom de MicroTaS (micro total analysis system), est actuellement un des plus actifs.

### 1.3 Propriétés des systèmes miniaturisés

Dans les dispositifs microfluidiques, la miniaturisation peut être extrêmement poussée. Les microsystèmes permettent par exemple d'exécuter des analyses chimiques complexes sur des échantillons de volume inférieur au nanolitre, et les imprimantes à jet d'encre de dernière génération manipulent des gouttes dont le volume est de l'ordre du picolitre. Par comparaison avec les systèmes macroscopiques, ces dispositifs offrent beaucoup d'avantages, permettant notamment de réaliser des réactions chimiques beaucoup plus rapidement et sur des échantillons de taille très réduite[2].

La question qui nous préoccupe ici est l'impact de cette miniaturisation poussée sur le comportement des écoulements internes ?

Bien évidemment, la réduction d'échelle ne se résume pas à une seule homothétie, et le fonctionnement des microsystèmes à fluides ne se déduit pas de celui des organes hydrauliques ou pneumatiques conventionnels par une simple règle de proportionnalité. Ceci pour plusieurs raisons. Tout d'abord, la forme même des microsystèmes

est généralement assez éloignée de ce qu'on connaît à une échelle traditionnelle, les techniques de fabrication étant elles-mêmes bien différentes. Ensuite, les écoulements sont régis par une série de paramètres qui pour la plupart ne sont pas simplement proportionnels à une longueur caractéristique. Enfin, certaines hypothèses, justifiées en mécanique des fluides classique, n'apparaissent plus valides à l'échelle des microécoulements[2].

Aussi, si certaines conséquences de la miniaturisation ne se résument qu'à des effets d'échelle, qui peuvent conduire à donner plus ou moins d'importance à certains phénomènes physiques, on peut également considérer que la miniaturisation nécessite la prise en compte de véritables micro-effets, qui nécessitent quant à eux une reformulation du système classique des équations de Navier-Stokes associées à des conditions aux limites d'adhérence et de continuité de la température à la paroi. Ainsi l'augmentation du nombre de Knudsen dans les micro-écoulements gazeux peut nécessiter de prendre en compte des effets de raréfaction ou des effets dus à l'accumulation de charges dans les doubles couches électriques en paroi [2].

On sait qu'au-delà d'un certain débit l'écoulement devient turbulent (fluctuations spatiales et temporelles de la vitesse autour d'une valeur moyenne). La transition entre écoulement laminaire et turbulent se discute en termes de nombre de Reynolds, qui compare les effets de la viscosité aux effets d'inertie. Pour des écoulements de type conduite, la transition se situe vers  $Re_c=2000$ .

si  $Re$  est défini par

$$Re = \frac{\rho v D_h}{\mu} \quad \text{Où} \quad v = \frac{Q}{wh} \quad (1.1)$$

Pour un microcanal typique rempli d'eau aux conditions usuelles :

$$w = 200 \mu\text{m}, h = 100 \mu\text{m}, \mu = 10^{-3} \text{ kg}\backslash\text{m}^3\text{s}, \rho = 10^3 \text{ kg}\backslash\text{m}^3$$

Atteindre le Reynolds de transition nécessiterait :

$$U = \frac{\mu Re_c}{\rho h} \simeq 20 \text{ m}\backslash\text{s}, \text{ soit } Q \simeq 400 \mu\text{L}\backslash\text{s}$$

Soit un différentiel linéique de pression  $\frac{\Delta P}{L} = 2,4 \text{ bar}\backslash\text{cm}$

( $\Rightarrow$  2,4 bar représente 24m de hauteur d'eau ; ou la surpression de gonflage d'un pneu automobile)

*Conclusion* la quasi-totalité des systèmes microfluidiques usuels fonctionnent en régime d'écoulement laminaire [10]

Un autre aspect important en microfluidique, particulièrement dans le cas des écoulements diphasiques, est la valeur du *nombre capillaire* qui compare les effets visqueux aux effets capillaires, défini par :

$$Ca = \frac{\mu U}{\sigma} \quad (1.2)$$

La situation est moins tranchée que dans le cas du nombre de Reynolds. Pour des liquides dont la tension interfaciale varie de quelques  $m N/m$  à quelques dizaines de  $m N/m$ , et des vitesses toujours « raisonnables », ce nombre peut atteindre l'unité. Ce qui signifie que les forces liées à la viscosité ont la même importance que celles liées aux effets capillaires.

Il s'agit cependant de situations relativement « rares », et on restera souvent dans une configuration où le nombre capillaire est inférieur à 1, avec des effets capillaires dominant les effets visqueux.

Concrètement, une goutte placée dans un flux de fluide immiscible dans une situation de bas nombre capillaire sera peu déformée par le flux de liquide continu, tandis que les lignes de champ de vitesse de ce dernier seront perturbées autour de la goutte.

A l'inverse, à nombre capillaire relativement élevé, la goutte sera déformée par l'écoulement et le perturbera peu. Plus généralement, cette prééminence des forces capillaires fait ressortir l'importance que revêtent les effets de surface par rapport aux effets en volume à cette échelle[9].

### 1.3.1 Validité de l'approche hydrodynamique

la question qui se pose est la compatibilité ou pas de l'approche hydrodynamique (hypothèse domaine continue) ?

Pour un liquide simple avec un volume correspondant de quelques  $nm$  d'échelle caractéristique contenant déjà plusieurs milliers de molécules (un cube d'eau de  $10nm$  de côté, soit  $1000nm^3$ , en contient environ 30000).

Les distances intermoléculaires sont inférieures au  $nm$  et les molécules sont en constante interaction avec leurs voisines.

L'analyse de l'écoulement microfluidique de liquides rentre donc, en général, dans le cadre de l'approximation hydrodynamique.

Pour un gaz avec un volume correspondant à quelques  $nm$  d'échelle caractéristique ne contient que quelques dizaines de molécules ( $1000nm^3$  d'air ne contiennent qu'environ 20 molécules).

Les distances intermoléculaires sont grandes par-rapport à la portée des forces d'interaction. Le libre parcours moyen est de l'ordre de  $100nm$  (dans les conditions usuelles).

Dans le cas des gaz, la validité de l'approche hydrodynamique se discute en termes de nombre de Knudsen défini par :

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (1.3)$$

La littérature s'accorde sur 4 régimes :

- $Kn \leq 0,01 \Rightarrow$  régime de l'approche hydrodynamique classique.
- $0,01 < Kn \leq 0,3 \Rightarrow$  l'approche hydrodynamique reste valable mais le gaz "glisse aux parois".
- $0,3 < Kn \leq 10 \Rightarrow$  les équations de l'hydrodynamique doivent être amendées (équations de Burnett).

- $Kn > 10 \Rightarrow$  l'approche hydrodynamique n'est plus correcte et il faut en venir à des modèles de dynamique moléculaire[10].

Néanmoins

- Pour un système donné, il faut rester vigilant quant à la pertinence d'une telle approche "macroscopique".
- La validité de l'approche hydrodynamique n'induit pas que l'on retrouve la phénoménologie habituelle de l'hydrodynamique à grande échelle :
  - ↪ Par exemple, la rugosité des parois peut devenir un phénomène critique à échelle microfluidique (grand rapport surface/volume).
  - ↪ Les effets électromagnétiques, même non volontaires (différence de potentiel entre fluide et paroi, par exemple), peuvent jouer un rôle important. Ils sont d'ailleurs souvent utilisés pour agir sur les fluides.
  - ↪ Les technologies habituelles à grande échelle ne sont pas nécessairement (ou pas judicieusement) miniaturisables[10].

### 1.3.2 Avantages de la miniaturisation

Comme toujours, pourrait-on dire, il y a du bon et du mauvais dans les caractéristiques décrites ci-dessus. De par leur faible encombrement, une des plus grandes promesses des systèmes microfluidiques est certainement, par analogie avec la révolution survenue au cours des 50 dernières années dans le monde de l'électronique, est la possibilité entrevue d'une intégration poussée de multiples composants au sein d'une même puce.

Dans le cadre de systèmes d'analyse, cette intégration permet de regrouper diverses étapes de façon automatisée, amenant ainsi un gain de temps et de sensibilité. Dans le cadre de microsystèmes pour la synthèse chimique, cette intégration permet un gain important en débit par des échanges thermiques facilités et le multiplexage<sup>3</sup> des opérations. Dans tous les cas, la réduction drastique des volumes utilisés pour l'analyse permet de faire des économies tant de réactifs que d'échantillons.

D'un point de vue plus fondamental, la diminution des dimensions et le contrôle accru des conditions qui en découle permet l'étude d'objets microscopiques uniques. Enfin, la prédominance des effets de surface présente plusieurs avantages que ce soit pour le piégeage de molécules d'intérêt ou les transferts thermiques accrus.

Chaque médaille ayant son revers, les effets de surface peuvent au contraire nuire à la qualité des analyses du fait de l'adsorption<sup>4</sup> des produits d'intérêt sur les parois. D'autre part, la réduction des volumes utiles est souvent une chimère du fait des importants volumes morts nécessaires pour introduire un échantillon dans une puce.

C'est le célèbre problème du «world to chip» pointé par Ramsey dès 1999. En corollaire de ce problème, se pose celui de l'encombrement des systèmes miniaturisés :

---

3. **multiplexage** une technique qui consiste à faire passer plusieurs informations à travers un seul support de transmission

4. **adsorption** est un phénomène de surface par lequel des atomes ou des molécules de gaz ou de liquides (adsorbats) se fixent sur une surface solide

si une fois de plus l'idée d'une puce laisse envisager un système portable, celle-ci ne représente souvent que la partie émergée de l'iceberg et nécessite souvent un appareillage complexe et volumineux associé pour permettre une analyse fiable.

Au-delà de ces généralités, certains traits caractéristiques des systèmes microfluidiques ont donné naissance à de vastes domaines d'études[9].

**Mélange** (notre thèse sera portée à ce sujet); De la laminarité des écoulements découle directement le problème du mélange dans les systèmes microfluidiques. Les deux formes de transport « naturel » d'espèces dans un écoulement, convectif et diffusif, sont généralement comparées par le nombre de Péclet  $Pe$ .

La simple analyse dimensionnelle pourtant traditionnelle du domaine peut ici s'avérer trompeuse : du fait de la faible valeur du coefficient de diffusion, aux échelles que nous considérons, le nombre de Péclet s'avère généralement élevé. En d'autres termes, le mélange de deux flux devrait principalement s'effectuer par convection. Pourtant, du fait de la laminarité des écoulements, le mélange de deux solutés perpendiculairement au flux les transportant a lieu lentement par diffusion. Pour qu'un composé diffuse perpendiculairement au flux sur une distance  $d$ , la longueur nécessaire de canal dans le sens de l'écoulement est donné par  $(Pe \cdot d)$ .

Le flux laminaire et le mélange lent au sein des microsystèmes peuvent être exploités pour accéder aux propriétés d'un liquide (concentration en soluté, pH, viscosité), par exemple au sein du désormais classique capteur en T.

De la même façon, cette possibilité de contrôle précis de flux variés au sein d'un microsystème permet de soumettre un objet d'intérêt (une cellule par exemple) à des variations localisées de concentration ou de soluté et d'étudier sa réponse[9].

A l'inverse, l'absence de mélange efficace peut s'avérer un problème dans le cas d'applications impliquant une réaction rapide entre deux solutés transportés par deux flux laminaires ou certaines études de cinétique à temps courts. Le mélange a ainsi fait l'objet de nombreuses études en microfluidique définissant bien les bases mathématiques de ce qu'on entend par mélange et chaos[9].

## 1.4 Contrôle des écoulements

La manière la plus classique de provoquer un mouvement de fluide consiste évidemment comme dans le monde « macroscopique » à contrôler les écoulements en imposant un débit ou une pression à l'entrée du microcanal.

Ces deux méthodes partagent l'inconvénient d'impliquer un profil parabolique de flux. Pour une réaction en flux continu dans un microcanal, les solutés se déplaçant près des parois avanceront moins vite que les composés se trouvant au centre du canal. Cette inhomogénéité en concentration dans le flux implique une diffusion des espèces perpendiculairement à la direction du flux. Celles-ci explorant ainsi toutes les vitesses possibles, on a une diffusion dans le sens de l'écoulement avec un coefficient de diffusion effectif supérieur à celui de la diffusion moléculaire pure.

Ces effets combinés impliquent un phénomène d'étalement du soluté connu sous le nom de dispersion de Taylor-Aris, qui conduit à une dilution du soluté et une possible contamination entre plusieurs produits se suivant dans un canal. Dans le

cas par exemple de séparations par chromatographie, les résultats peuvent ainsi être faussés par ce phénomène.

D'autre part, du fait des faibles dimensions des microsystèmes, provoquer un écoulement à une vitesse donnée implique souvent une chute de pression (c'est à dire la pression à exercer pour contrer les pertes liées à la viscosité du fluide) importante. Celle-ci varie à débit donné comme l'inverse du rayon à la puissance 4 pour un capillaire circulaire, et prend donc vite une grande importance dans des microcanaux.

Enfin, alors qu'un contrôle du flux en pression permet d'arrêter celui-ci rapidement par équilibrage des pressions, un contrôle en débit (avec une pompe pousse seringue par exemple) implique d'attendre un certain temps après l'arrêt de la pompe avant de voir le flux dans le canal devenir nul. Cet effet est lié à la compressibilité des liquides considérés dans le canal combinée avec les importantes chutes de pression mentionnées plus haut. Le contrôle en pression, soit par pression hydrostatique, soit grâce à des appareils peut ainsi pour certaines applications se révéler avantageux.

D'autres types de contrôle d'écoulement, ceux-ci propres à la dimension des canaux utilisés peuvent être mis en œuvre, par exemple des effets électroosmotiques. Une surface chargée attire près d'elle des contre-ions contenus en solution, formant une double couche électronique appelée couche de Debye-Huckel. L'application d'un champ électrique parallèlement aux parois met ces ions en mouvement, ce qui entraîne par effets visqueux l'ensemble du fluide. Si la couche de Debye-Huckel est fine par rapport aux dimensions du canal, on se retrouve cette fois-ci avec un écoulement de type « bouchon », par opposition à un profil parabolique, sans dispersion des solutés. Deux désavantages nuisent cependant à cette méthode : d'abord, l'homogénéité du flux dépend fortement de l'état de surface, parfois difficile à maîtriser ; ensuite, on ne peut déplacer que des solutions portant des charges libres, donc généralement aqueuses. Dans la même veine, l'électrophorèse, déplacement de charges libres sous l'effet d'un champ électrique, est aussi utilisée pour déplacer un soluté au sein d'un microcanal : cette technique est généralement dédiée à la séparation des composants de celui-ci dans un réseau d'obstacles, et peut être « parasitée » ou au contraire optimisée par la superposition d'effets électroosmotiques[9].

## 1.5 Fabrication de microsystèmes

Les premières méthodes utilisées pour construire des microsystèmes découlaient naturellement des technologies silicium de la microélectronique.

Si le silicium présente d'un point de vue industriel l'avantage de la facilité de fabrication, il n'est pas idéal du fait de son opacité gênant une éventuelle détection optique, et sa mise en œuvre n'est pas aisée pour des laboratoires non spécialisés.

Le verre permet de contourner l'inconvénient de l'opacité, mais la gravure sur verre reste difficile à réaliser. Les chercheurs se sont donc rapidement tournés vers des méthodes dites « molles » utilisant des élastomères<sup>5</sup>.

---

5. **élastomère** : polymère synthétisé en laboratoire

## Lithographie molle

On peut dire sans peur de se tromper que ce sont les méthodes de « lithographie molle » qui ont permis l'explosion des méthodes microfluidiques au sein de laboratoires aux cultures pourtant très différentes, allant de la physique à la chimie en passant par la biologie.

Quel que soit l'élastomère utilisé, ces techniques permettent de produire une multitude de puces identiques par moulage sur un « master » préalablement préparé, généralement par photolithographie. La grande vedette de la lithographie molle est sans conteste le PolydiMethylSiloxane (PDMS). Bien que le déroulement exact de son développement semble plus trouble qu'il n'y paraît, l'histoire a retenu qu'il fut introduit dans le monde de la microfluidique en 1998 par le groupe de G.M. Whitesides à Harvard[1]. L'utilisation du PDMS étant devenue monnaie courante, les méthodes correspondantes sont décrites dans de nombreux articles et ouvrages.

Le moule (master) est le plus souvent préparé par photolithographie. En résumé, une résine photosensible est étalée par spincoating (par rotation à quelques milliers de tours par minute) sur un substrat plan et propre (type verre ou silicium). Moyennant quelques étapes de chauffage et une exposition aux UV à travers un masque, on obtient après développement les motifs désirés dans des gammes allant du micron jusqu'à quelques centaines de microns, selon la viscosité de la résine et la vitesse de rotation à laquelle celle-ci est étalée. On peut utiliser des résines négatives (type SU8, Microchem), qui réticulent là où elles sont exposées, ou au contraire des résines positives, ces dernières permettant d'accéder à des canaux arrondis plutôt que carrés.

Le moule étant prêt, le PDMS est mélangé avec un réticulant dans une proportion de l'ordre 10 :1, cette proportion pouvant être variée selon le module élastique final désiré pour le matériau. Le mélange est coulé sur le master placé au fond d'un récipient et le tout est placé au four pour au moins deux heures pour permettre la réticulation. Le PDMS durci ayant épousé les formes du master est démoulé. Afin de finaliser les canaux, le moulage obtenu doit être collé sur un support. Ce dernier consiste généralement en une surface de verre (hydrophile), ou une surface lisse de PDMS (hydrophobe), selon les propriétés désirées. Les deux surfaces à coller sont placées dans un plasma pendant un temps compris entre 30 et 90 secondes.

Les deux surfaces alors oxydées se collent facilement de façon irréversible. La liaison obtenue est solide et c'est généralement une autre partie du circuit qui est détériorée avant que celui-ci ne se décolle. Juste après oxydation et collage, les surfaces obtenues sont hydrophiles et chargées, et selon les applications il faut replacer le circuit à 65°C pour une nuit afin d'avoir récupération hydrophobe du PDMS [9].

Le PDMS permet incontestablement une microfabrication simple et rapide des microsystèmes. Il présente cependant des défauts, le principal étant d'être gonflé par de nombreux solvants. Selon le composé organique utilisé, il sera possible de travailler quelques heures avec un circuit en PDMS (avec des huiles de type alcane ou silicone par exemple), mais dans le cas de solvants plus agressifs (acetone, styrène), la puce sera inutilisable en moins d'une minute.

Deux autres caractéristiques du PDMS peuvent se révéler importantes dans le cadre de certaines applications : il est perméable à l'air, et du fait de son élasticité se déforme pour des pressions supérieures à quelques centaines de milli-bars[9].

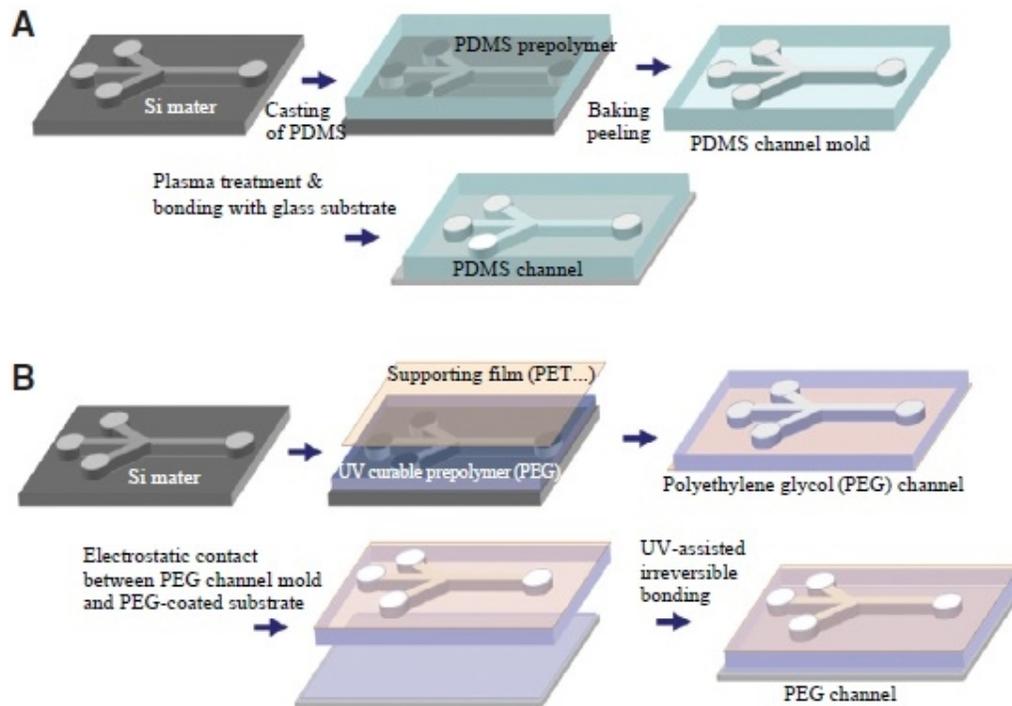


FIGURE 1.1 – Représentation schématique de la fabrication d’un canal microfluidique : (a) par moulage (b) par collage [1]

Divers techniques de micro/nanofabrication peuvent être utilisées pour la fabrication des systèmes microfluidiques intégrés

Ici, deux méthodes lithographiques douces sont introduites pour fabriquer des micro/nanomotifs sur une surface ou à l’intérieur d’un canal microfluidique : **l’impression par contact** et le **moulage capillaire**

**Méthode d’impression** Cette méthode génère une surface non-structurée, modifiée chimiquement, tandis que le moulage capillaire fabrique une micro physique/nanostructure modifiée topographiquement.

L’impression par contact est un procédé de mise en forme directe à l’aide d’un timbre(négatif) en élastomère souple préparé par lithography molle. Après durcissement, les timbres en PDMS sont trempés dans une encre moléculaire et mis en contact conforme avec un substrat pour transférer l’encre sur la surface substrat.

L’impression par contact permet la reproduction facile du timbre, l’impression rapide en utilisant la parallélisation, et la production en série à faible coût.

les timbres en polymère minimisent aussi les problèmes de transport de l’échantillon ainsi que la contamination.

cependant l’impression par contact a certaines limites qui sont principalement causées par l’utilisation de timbres à polymère souple. Le gonflement d’un timbre lors de l’encre se traduit souvent par une augmentation la taille du motif par diffusion des molécules excessives imprimés sur le substrat.

En outre, l'impression par contact génère un modèle unidimensionnel à l'intérieur d'un canal[1].

**Méthode de moulage** Le moulage capillaire est une version améliorée de la lithographie molle par une combinaison de l'utilisation de nano-impression et d'un moule élastomère.

Quand un motif (positif ou négative) de moule PDMS est placé sur une surface polymère et chauffé au-dessus de la température de transition vitreuse du polymère ( $T_g$ ), la capillarité force le polymère à se fondre dans l'espace vide des canaux formés entre le moule et le polymère, ce qui génère une réplique négative du moule[1].

De nouveaux procédés utilisant des substrats plastiques en lieu et place du PDMS ainsi que d'autres méthodes de fabrication des moules ont été développées afin de contourner ces propriétés du PDMS. A partir de masters supportant une température de travail plus élevée que ceux en SU8<sup>6</sup>, des canaux peuvent être formés par lamination à chaud d'un film en COC (cyclic olefin copolymer) sur le moule puis collage du motif obtenu sur un film plat de COC grâce à un mélange de solvants. Cette méthode est éventuellement transposable à d'autres matériaux thermoplastiques, fluorés par exemple. Dans ce cadre, l'utilisation de films photosensibles (type SY300, Elga Europe) appliqués par laminage avant exposition permet une fabrication facile de moules robustes. D'autres procédés permettent également d'accéder à un prototypage rapide et bon marché à partir de résines thiolènes ou d'un équivalent fluoré du PDMS, photoréticulable [Rolland et al., 2004]. Des méthodes de photoablation laser, moins « haut débit », permettent de créer des microcanaux dans d'autres matériaux, polyimide par exemple [9].

## 1.6 Les méthodes d'expérimentation

Une fois les microsystèmes fluidiques réalisés, il est nécessaire de pouvoir mesurer leurs performances et analyser les micro-écoulements en leur sein. Les grandeurs habituellement mesurées dans les macro-écoulements, telles que pression, température et vitesse restent souvent du même ordre de grandeur que dans les macro-écoulements, les vitesses pouvant toutefois atteindre des valeurs assez basses. Leur détermination, surtout d'un point de vue local, est néanmoins complexe.

Les débits véhiculés par les microsystèmes ont quant à eux des ordres de grandeur très liés au confinement. Ils sont généralement très faibles (jusqu'à  $10^{-13} m^3/s$ ) et leur mesure nécessite des techniques spécifiques dédiées aux micro-écoulements. [2].

### 1.6.1 Mesures de pression

Une des premières grandeurs à mesurer est la pression à l'entrée et à la sortie d'un microsystème. Cette mesure ne pose pas de problème particulier et peut se faire dans des mini-chambres connectées de part et d'autres du microsystème (Figure 1.2).

---

6. **SU8** une résine photosensible négative couramment utilisée dans la fabrication de microsystème

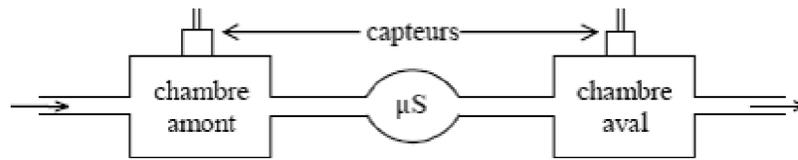


FIGURE 1.2 – Mesure de pression[2]

Les mesures locales de pression au sein du microsysteme ne peuvent être réalisées aussi facilement, et requièrent l'emploi de capteurs ultraminiatures. Pour des mesures dans des microcanaux de quelques micromètres carrés de section (Figure 1.3), il est nécessaire de concevoir des micro-capteurs intégrés au moment de la fabrication du microsysteme et de réaliser des mesures déportées, ce qui ne permet pas d'effectuer des mesures en régime transitoire .

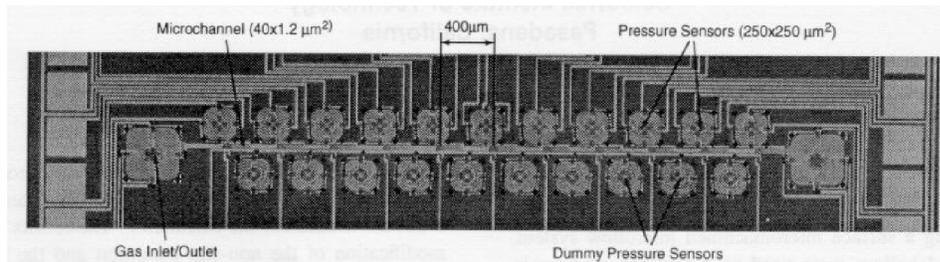


FIGURE 1.3 – Microcanal équipé de microcapteurs de pression [Liu et al., 1995].

En fait, il est actuellement impossible d'effectuer des mesures correctes des variations de pression rapidement variable à l'intérieur de microcanaux avec les capteurs présents sur le marché. Ceci pour deux raisons principales : l'encombrement de l'élément sensible du capteur est non négligeable à cette échelle et le déplacement de la membrane peut perturber le microécoulement.

### 1.6.2 Mesures de température

La problématique est sensiblement la même en ce qui concerne les mesures de températures, une des difficultés pour des mesures locales étant de ne pas modifier localement cette température par un apport thermique du capteur.

#### Caméra infrarouge

L'utilisation de caméras infrarouges équipées d'objectifs spécifiques est un moyen externe non intrusif pour effectuer des mesures de température dans les microcanaux (Figure 1.4).

Cette méthode permet d'atteindre une précision de l'ordre du degré Kelvin, une résolution spatiale submicronique et une résolution temporelle de 2ms[3]. Néanmoins l'utilisation de caméras infrarouges nécessite une parfaite connaissance des

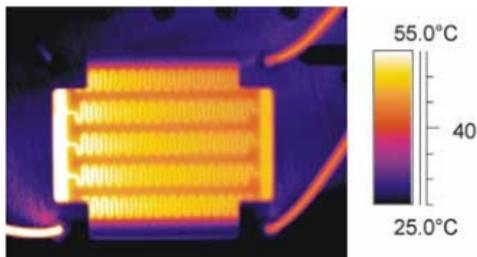


FIGURE 1.4 – Image infrarouge d'un micro échangeur thermique[3].

caractéristiques d'absorption et d'émission des matériaux constituant le dispositif microfluidique et demande souvent un traitement lourd de l'information reçue.

### Les marqueurs fluorescents

Il est également possible de mesurer la température à l'intérieur d'un canal microfluidique en injectant dans celui-ci un marqueur dont l'intensité de fluorescence varie avec la température (Figure 1.5). Des recherches sur la Rhodamine B, ont montré une résolution en température de l'ordre du degré Kelvin, et des résolutions spatiales inférieures au micron. Néanmoins l'addition de rhodamine dans le liquide contenu dans le microcanal est une méthode qui peut être considérée comme trop intrusive pour beaucoup d'applications microfluidiques[3].

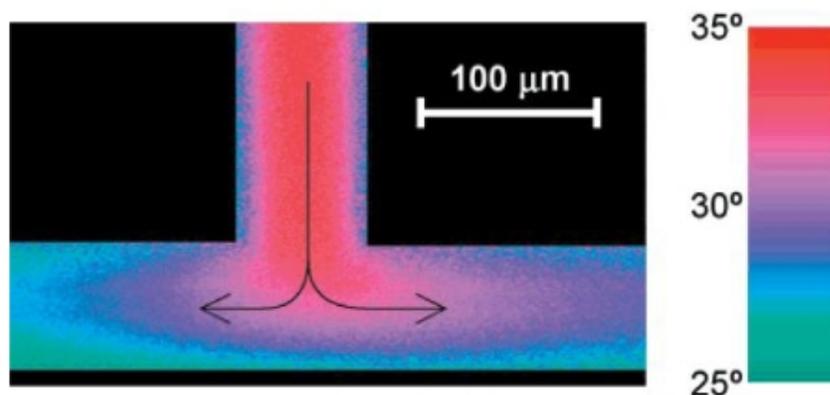


FIGURE 1.5 – Image en fausse couleur de la distribution de température d'un micro canal. Les couleurs sont calculées en fonction de la fluorescence de la rhodamine.[3]

### 1.6.3 Mesure de débit

Les mesures de débits dans les microsystèmes peuvent s'effectuer soit de manière globale, soit par intégration ou extrapolation de mesures locales de vitesses dans une section donnée.

### 1.6.4 Mesures de vitesse

#### Par réinjection optique

Grâce au phénomène de réinjection optique, il est possible de mesurer des vitesses, des distances et des vibrations. En effet, quand une cible en mouvement est éclairée par un faisceau laser, une partie de la lumière rétrodiffusée par la surface de cette cible est réintroduite dans la cavité du laser. Le fonctionnement du laser est alors perturbé. Ces perturbations modulent la fréquence propre et la puissance d'émission du laser, et sont fonction du mouvement de la cible. Elles sont observables sur la tension de jonction de la diode laser.

Quand un faisceau laser est rétrodiffusé par une cible se déplaçant à une vitesse  $V_{cible}$ , la fréquence d'émission du laser est décalée d'une quantité Doppler. Dans le cas où cette fréquence décalée est mélangée à la fréquence d'origine, une fréquence de battement  $f_d$  apparaît :

$$f_d = \frac{2.U.n.\cos(\theta)}{\lambda} \quad (1.4)$$

Où  $\theta$  représente l'angle entre le faisceau et la direction de déplacement,  $n$  l'indice de réfraction du milieu environnant, et  $\lambda$  la longueur d'onde du laser[11].

Ainsi, si l'on trace le spectre en fréquence du signal mesuré sur la tension du laser quand celui-ci est pointé sur une cible en mouvement, un pic apparaît à  $f_d$ . Il est donc possible de remonter à la vitesse  $U$  de cette cible à travers la relation (1.4).

## Conclusion

A l'heure actuelle, les microsystèmes à fluides sont présents, dans tous les secteurs économiques. Les techniques de fabrication spécifiques développées et les méthodes d'expérimentation spécialement mises au point ont permis des progrès rapides pour la réalisation de microsystèmes fluidiques de plus en plus performants.

Une des opérations délicates à réaliser à micro-échelle reste le mélange de fluide, du fait de la laminarisation des écoulements due à la forte diminution des échelles de longueurs caractéristiques. Dans ce domaine, de nombreuses idées originales ont vu le jour pour tenter de pallier à cet inconvénient. Nous les analysons dans le chapitre 2 avant de proposer nos propres solutions, développées dans les chapitres suivants.

# Chapitre 2

## Les mélangeurs micro-fluidiques

### Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Difficultés du mélange dans la microfluidique . . . . .</b>	<b>17</b>
<b>2.2</b>	<b>Processus de diffusion . . . . .</b>	<b>19</b>
<b>2.3</b>	<b>Loi de Fick . . . . .</b>	<b>19</b>
<b>2.4</b>	<b>Coefficient de diffusion . . . . .</b>	<b>20</b>
<b>2.5</b>	<b>Principaux micro-systèmes pour le mélange . . . . .</b>	<b>20</b>
2.5.1	Micro-mélangeurs passifs . . . . .	21
2.5.2	Micro-mélangeurs actifs . . . . .	27
2.5.3	Le diagramme Peclet Reynolds . . . . .	31

---

Ce chapitre est une mise en évidence de la problématique de mélange à l'échelle microscopique et porte sur une brève analyse des différents systèmes utilisés et leurs plages de fonctionnement.

### 2.1 Difficultés du mélange dans la microfluidique

Un domaine important dans la recherche microfluidique concerne le mélange de produits réactifs, qui peuvent contenir de petites molécules, des macromolécules, des particules, et des bulles ou des gouttes. Le mélange peut s'effectuer de manière simple entre deux écoulements laminaires adjacents, par exemple dans un micro-canal. Dans le cas où on cherche à observer la cinétique d'une réaction chimique, le caractère laminaire des écoulements peut s'avérer avantageux, le mélange se produisant alors par diffusion transversale. On peut ainsi avoir une vision globale de l'évolution temporelle de la réaction chimique en analysant la réaction en différentes positions le long du micro-canal.

Dans le cas fréquent où on recherche un mélange complet et rapide, le caractère laminaire des écoulements est alors un inconvénient, et des stratégies de mélange doivent être développées. Sous un régime à bas nombre de Reynolds, les forces visqueuses dominent les forces d'inertie, et toute perturbation de l'écoulement est

rapidement atténuée. De telles caractéristiques rendent le mélange difficile dans les dispositifs microfluidique[2].

L'objectif d'un mélange homogène est de réaliser une distribution uniforme des molécules, ce qui requiert généralement un processus aléatoire et irréversible.

À l'échelle macroscopique, là où les forces d'inertie dominent, les instabilités locales liées à la turbulence peuvent être facilement exploitées pour augmenter le mélange. En revanche, quand le nombre de Reynolds est petit, la diffusion devient le seul processus aléatoire et irréversible à l'origine du mélange.

Malheureusement, la diffusion normale à travers un volume de  $1 \mu l$ ; un volume classique dans les dispositifs microfluidiques, prend typiquement de l'ordre de 8 à 9 minutes. Par conséquent, les dispositifs microfluidiques qui utilisent la diffusion en tant qu'unique mécanisme de mélange ne pourront pas répondre aux exigences de mélange rapide de l'analyse biochimique notamment.[2]

Pour quantifier les choses, deux nombres adimensionnels sont à considérer. Le premier est le nombre de Reynolds

$$Re = \frac{UL}{\nu} \quad (2.1)$$

Qui compare les effets inertiels aux effets visqueux. Dans cette équation,  $U$  est une vitesse caractéristique de l'écoulement,  $L$  une longueur caractéristique (par exemple la profondeur d'un microcanal) et  $\nu$  la viscosité cinématique du fluide. Le nombre de Reynolds peut également être vu comme le rapport du temps de diffusion sur le temps de convection de la quantité de mouvement. Plus il est petit, plus les effets de viscosité sont prépondérants, et plus le transport de quantité de mouvement s'effectue par diffusion. D'autre part, la faible valeur du nombre de Reynolds dans les microsystèmes traduit l'absence de turbulence.

Le second nombre adimensionnel intéressant pour le micromélange est le nombre de Péclet :

$$Pe = \frac{UL}{D} \quad (2.2)$$

Qui mesure l'importance relative des termes de convection vis-à-vis des termes de diffusion de la masse. Il est ainsi équivalent au nombre de Reynolds pour ce qui concerne le transport de masse (au lieu du transport de la quantité de mouvement) et apparaît donc pertinent lorsqu'on s'intéresse au mélange. Ici,  $D$  représente le coefficient de diffusion moléculaire, plus le nombre de Péclet est élevé, plus l'influence de l'écoulement est grande vis-à-vis de la diffusion moléculaire. L'ordre de grandeur typique des coefficients de diffusion moléculaire est de  $10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}$  pour des liquides classiques, mais les vitesses d'écoulements rencontrées dans les microsystèmes peuvent être très variables et peuvent conduire à des nombres de Péclet aussi bien de l'ordre de  $10^{-2}$  que de l'ordre de  $10^{+2}$ .

Enfin, le rapport entre le nombre de Péclet et le nombre de Reynolds est appelé nombre de Schmidt et s'exprime donc par :

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad (2.3)$$

Ce nombre dépend de la nature du fluide et de sa température.

## 2.2 Processus de diffusion

« La diffusion est l'une des manifestations les plus directes, à notre échelle, des mouvements d'agitation thermique des molécules, ions ou atomes » [2].

C'est un processus qui se produit lorsqu'une distribution de particules est non uniforme et qu'aucune action extérieure (force gravitationnelle, champ électrique. . .) ne permet de la compenser. La diffusion consiste en un transport de matière permettant la suppression des gradients de concentration. Elle intervient dans les gaz, les liquides et les solides.

Dans les systèmes ordinaires, la diffusion moléculaire mène au mélange, mais c'est un processus lent, il faut par exemple des jours à de l'encre dans de l'eau pour se répandre sur quelques  $cm^2$ . Le temps ( $\tau_m$ ) nécessaire pour répandre un colorant le long d'une distance  $L$  dans un fluide au repos est estimé par :

$$\tau_m = \frac{L^2}{D} \quad (2.4)$$

Le chimiste écossais **Thomas Graham**<sup>1</sup> est le premier à entreprendre des études systématiques sur la diffusion dans les gaz. Ses recherches s'étendent de 1828 à 1833. Il réalise la première expérience quantitative de diffusion et la première mesure fiable d'un coefficient de diffusion.

## 2.3 Loi de Fick

« En 1855 la réflexion de Fick<sup>2</sup> sur les résultats de Graham le conduit à percevoir l'analogie entre la diffusion de la chaleur et de la masse. Autrement dit, la diffusion de matière doit pouvoir être décrite sur la même base mathématique que la loi de Fourier pour la chaleur. Ainsi la densité de flux molaire (respectivement massique) de matière  $J$  qui traverse un élément de surface  $\delta A$  est proportionnel au gradient de concentration molaire (respectivement massique)  $\nabla C$  » [2].

$$J = -D\nabla C \quad (2.5)$$

$D$  étant le coefficient de diffusion et  $C$  la concentration molaire (respectivement massique) de l'espèce chimique considérée.

Le domaine de validité de cette équation est très grand. Elaborée à l'origine pour le cas des liquides, elle se généralise pour les gaz et les solides. Différentes méthodes existent pour résoudre cette équation, par intégration analytique ou par résolution numérique .

---

1. **Thomas Graham** [1805-1869] professeur de chimie et fondateur de la loi de Graham sur la diffusion des gaz.

2. **Adolf Eugene Fick** [1829-1901], Médecin (depuis 1851) il introduit la loi de Fick en 1855, démontrée par Einstein en 1905.

## 2.4 Coefficient de diffusion

Le coefficient de diffusion  $D$  s'exprime en  $m^2/s$ , Il dépend de la mobilité moléculaire, c'est-à-dire du mouvement brownien des molécules, qui peut être décrit comme une succession de sauts moléculaires. Par exemple en écoulement unidirectionnel, est schématisé comme un marcheur sur une ligne effectuant des sauts aléatoires de longueur moyenne  $\pm l$ .

### Ordre de grandeur du coefficient de diffusion

L'ordre de grandeur du coefficient de diffusion de différents milieux est schématisé dans la (Figure 2.1). Pour les gaz, il est d'environ  $0,15 \text{ cm}^2/s$  et atteint des valeurs beaucoup plus faibles pour les liquides (il est de  $10^{-5} \text{ cm}^2/s$  pour de l'eau).

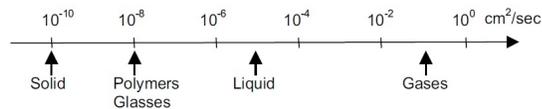


FIGURE 2.1 – ordre de grandeur des coefficients de diffusion[4]

## 2.5 Principaux micro-systèmes pour le mélange

En général, les micromélangeurs peuvent être classés comme micromélangeurs passifs et micromélangeurs actifs (Figure 2.2). Les micromélangeurs passifs ne nécessitent pas d'énergie externe et utilisent seulement l'énergie cinétique des fluides en mouvement, le processus de mélange repose entièrement sur la diffusion et/ou l'advection chaotique. Ils peuvent être classés en outre par la disposition de leurs phases de mélange : lamination parallèle, lamination en série, injection, advection et gouttelettes chaotique.

Les micromélangeurs actifs utilisent les perturbations générées par un champ externe pour le processus de mélange. Ainsi, ils peuvent être classés selon les types des effets des perturbations externes telles que la pression, la température, L'électrohydrodynamique, dielectrophoretique, L'électrocinétique, la magnétohydrodynamique et l'acoustique.

Avec les champs externes et les composants intégrés correspondants, les structures des micromixeurs actifs sont souvent compliquées et nécessitent de complexes procédés de fabrication. En outre, les sources d'alimentation externes sont nécessaires pour leur fonctionnement. Ainsi, l'intégration des mélangeurs actifs dans un système microfluidique est à la fois difficile et coûteuse.

En revanche, Les micromélangeurs passifs ne nécessitent pas d'actionneurs externes à l'exception de ceux pour la distribution de fluide. Les structures passives

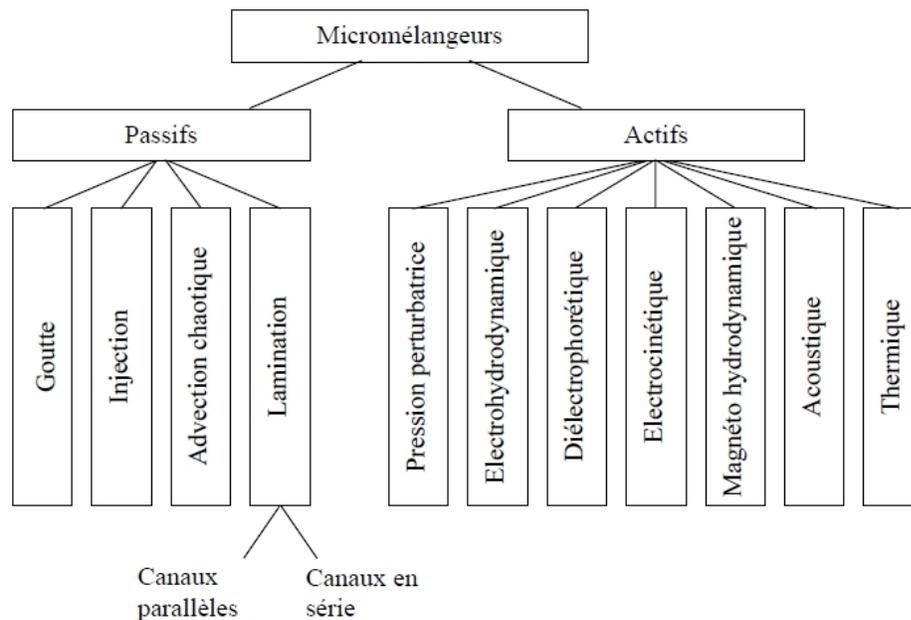


FIGURE 2.2 – La classification des micro-mélangeurs[2]

souvent simples sont robustes, stable en fonctionnement et facilement intégré dans un complexe système. Du coup, plus d'attention est accordée aux micromélangeurs passifs ou statiques. Et cela consitue la raison pour laquelle on a proposé la configuration du micromélangeur passif en serpentin pour notre étude.

### 2.5.1 Micro-mélangeurs passifs

En raison de son concept simple, le mixeur passif a été l'un des premiers dispositifs microfluidiques signalés. Mais la domination du régime laminaire à l'échelle microscopique exige que le mélange dans les micromixeurs passifs repose principalement sur la diffusion moléculaire et l'advection chaotique.

L'augmentation de la surface de contact entre les différents fluides et la diminution du chemin de diffusion entre eux pourraient améliorer la diffusion moléculaire.

L'advection chaotique peut être réalisée par la manipulation de l'écoulement laminaire dans les microcanaux. La configuration résultante de l'écoulement raccourcit le chemin de diffusion, et donc améliore le mélange.

#### Micro-mélangeurs avec lamination en parallèle

Comme mentionné ci-dessus, un mélange rapide peut être réalisé par la diminution du chemin de la diffusion et l'augmentation de la surface de contact entre les deux phases. La lamination parallèle divise l'entrée du flux en  $(n)$  sous-flux, qui se rejoignent après en un seul flux.

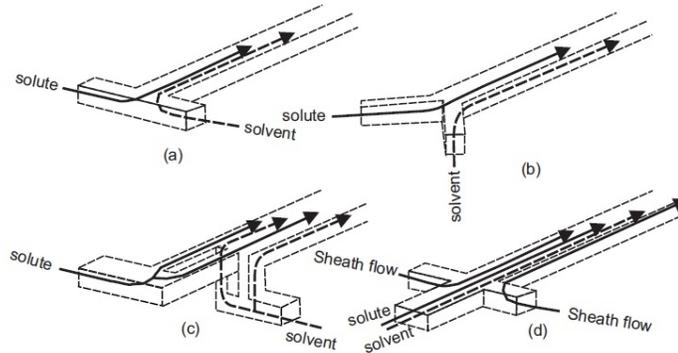


FIGURE 2.3 – micro-mélangeurs avec lamination en parallèle[5]

La conception de base est un long microcanal avec deux entrées ( $n = 2$ ); ces configurations sont souvent appelées le mélangeur T ou Y (Figures 2.3 (a) et (b)).

Pour un canal de mélange plane ( $W \gg H$ ), la distribution de la concentration du mélange dans le canal peut être obtenue analytiquement. En supposant la même viscosité dans chaque flux, et donc une vitesse d'écoulement uniforme  $U$ , la distribution de concentration adimensionnelle  $C^* = C/C_0$  dans le microcanal pour un rapport de mélange arbitraire de  $r/(1-r)$  entre un soluté ( $C = C_0$ ) et un solvant ( $C = 0$ ) est[4] :

$$C^*(x^*, y^*) = r + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{nr\pi}{n} \cos(n\pi y^*) \times \exp\left(-\frac{2n^2\pi^2}{Pe + \sqrt{Pe^2 + 4n^2\pi^2}}\right) \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Comme un modèle de base, le mélangeur T est idéal pour l'investigation des phénomènes de transport de base à l'échelle microscopique, On l'utilisera par la suite dans la démonstration des effets de la viscosité ainsi que celle de Reynolds et de la longueur.

Le conception T de base peut être améliorée en rendant les parois du canal plus rugueuses ou en étranglant le canal d'entrée.

À Reynolds élevé on peut ajouter des obstacles au mélangeur de base, ces obstacles vont générer des tourbillons qui aideront à améliorer l'advection chaotique. L'effet des obstacles sera démontré par la suite dans la configuration du serpent.

### Micro-mélangeurs avec lamination en série

Semblable aux micromélangeur avec lamination en parallèle, le micromixeurs avec lamination en série améliore également le mélange en fractionnant et plus tard reliant les flux (Figure 2.4) . Les courants d'entrée sont d'abord rejoint horizontalement, puis à l'étape suivante verticalement.

Après ( $m$ ) étapes de fractionnement et d'assemblage,  $2^m$  couches liquides peuvent être stratifiées. Le processus conduit à une amélioration de  $4^{m-1}$  fois le temps de mélange.

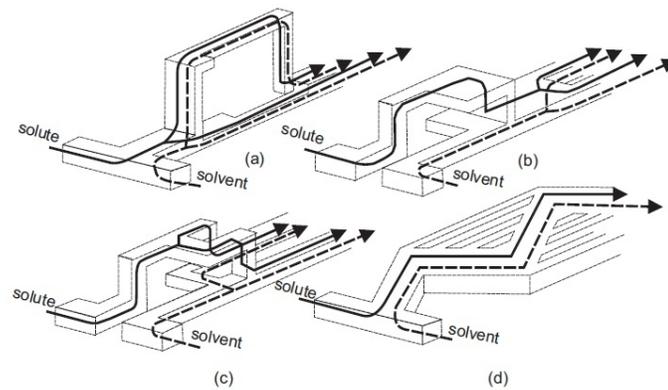


FIGURE 2.4 – micro-mélangeurs avec lamination en série[5]

### Micromélangeurs multi lamellaires

Dans ce type de mélangeur, les fluides à mélanger sont répartis dans une multitude d'embranchements (le nombre peut atteindre plusieurs milliers) qui aboutissent dans une chambre de mélange. Cette répartition des fluides permet d'obtenir une faible longueur de diffusion et un temps de mélange très court. Il existe dans la littérature différentes géométries permettant de diviser l'écoulement.

Les micromélangeurs en V et à canaux parallèles ont des géométries très proches. Dans le cas du micromélangeur de type V (Figure 2.5 [a]), les microcanaux utilisés sont rectilignes, pour les micromélangeurs parallèles (Figure 2.5 [b]), les microcanaux sont arqués.

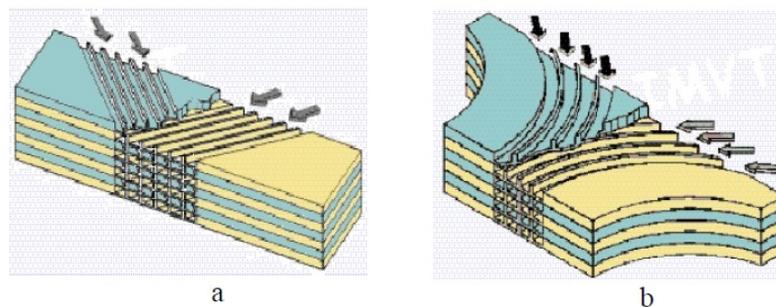


FIGURE 2.5 – Micro-mélangeurs : (a) en V (b) parallèle[2]

Les géométries mises en oeuvre peuvent présenter des dessins plus ou moins élaborés,

### Micromélangeur à injection

Le concept micromixeur à injection est similaire à celui du mélangeur avec stratification parallèle. Au lieu de diviser les deux flux d'entrée, ce type de mélangeur

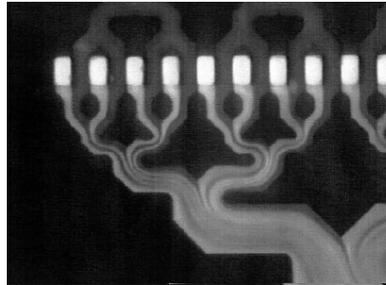


FIGURE 2.6 – Visualisation de l'écoulement dans un micro-mélangeur passif avec lamination en parallèle[2]

divise seulement le flux du soluté dans de nombreux jets et les injecte dans le flux de solvant qui passe au-dessus du réseau de jets, ce qui crée un certain nombre de microplumes du soluté. Ces microbuses augmentent la surface de contact et diminuent le trajet de diffusion. L'efficacité du mélange peut être améliorée de manière significative.

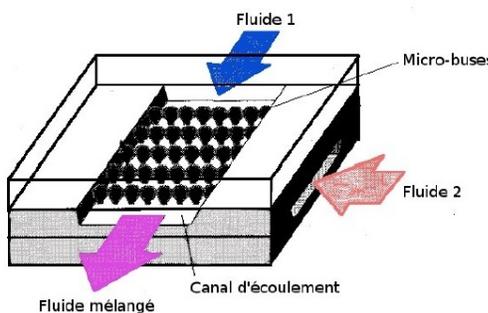


FIGURE 2.7 – Micro-mélangeur à injection[2]

### Micro-mélangeur à advection chaotique

**Notions sur le chaos et le mélange chaotique** Un état chaotique n'est pas lié au caractère turbulent ou laminaire d'un écoulement. C'est pourquoi il est intéressant d'essayer de l'obtenir dans des microsystèmes, au sein desquels le régime est laminaire. Le mélange par advection chaotique de fluides permet d'augmenter la diffusion entre les fluides ; en effet, la surface de l'interface entre les fluides s'étirant et se pliant est considérablement augmentée, autorisant un transfert de masse efficace entre les fluides (Figure 2.8).

Outre la diffusion, l'advection est une autre forme importante de transfert de masse dans les flux avec un faible nombre de Reynolds. Cependant, l'advection est souvent parallèle à la direction principale d'écoulement, et n'est pas utile pour le processus de mélange transversal.

L'advection chaotique peut améliorer le mélange de manière significative. En règle générale, elle peut être générée par des géométries spéciales des canaux de

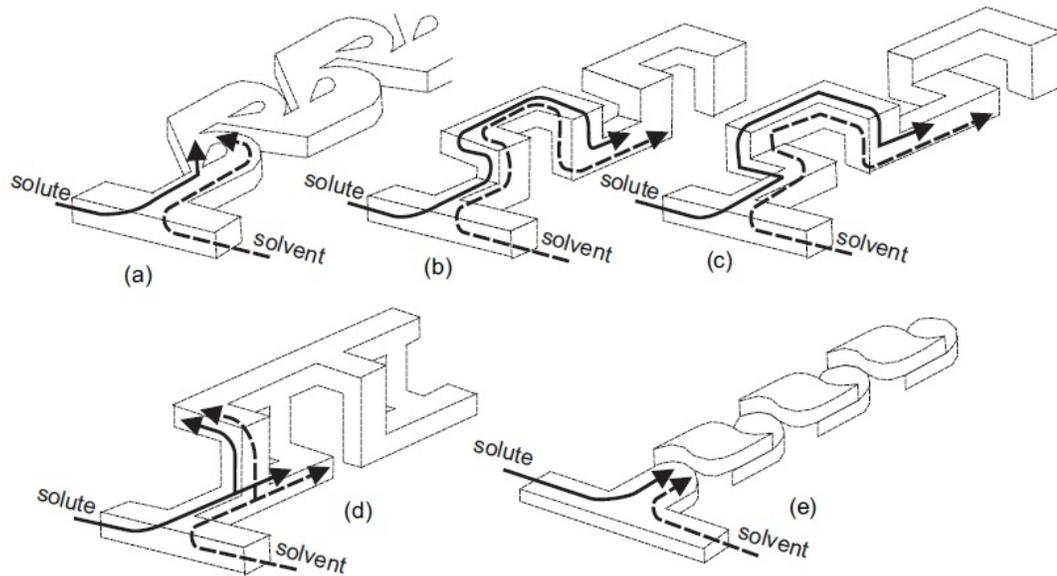


FIGURE 2.8 – Différentes configurations de micro-mélangeurs à advection chaotique[5]

mélange ou induite par une force externe. Alors que le premier type est un micro-mélangeur passive, la second Type appartient à la catégorie active et sera discuté plus tard.

Le concept des micro-mélangeurs basés sur l'advection chaotique est similaire à leurs homologues macroscopiques. L'idée de base est la modification de la forme du canal pour fractionnement, étirage, pliage et rupture de l'écoulement. En ce qui suit, des micro-mélangeurs pour différentes gammes du nombre Reynolds sont examinées individuellement. Bien qu'il n'existe pas une gamme fixe pour un design particulier, cette analyse prend en compte les plages  $Re > 100$  plus élevé,  $10 < Re < 100$  comme intermédiaire et  $Re < 10$  faible[4].

**Advection chaotique en régime de haut Reynolds** la méthode la plus simple pour obtenir une advection chaotique est d'insérer des structures obstacles dans le canal de mélange.

plusieurs investigations ont montré que les obstacles pourraient améliorer les performances de mélange à haut Reynolds.

Dans ces conditions, la disposition asymétrique des obstacles pourrait modifier les sens de circulation et force les fluides a fusionner et a créer un transport de masse transversale.

La méthode suivante pour générer l'advection chaotique utilise des microcanaux zig-zag pour produire une recirculation autour des zig-zag à grands nombres de Reynolds (Figure 2.9)

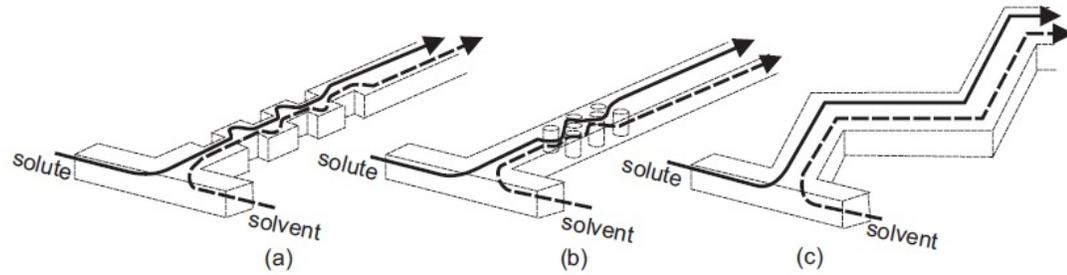


FIGURE 2.9 – Designs de micro-mixeur à advection chaotique en régime de haut Reynolds (a) structure avec obstacles dans les parois (b) structure avec obstacles dans le canal (c) géométrie en zig-zag[5]

**Advection chaotique en régime de bas Reynolds** Similaire aux mixeurs macroscopique, les rainures dans le canal peuvent produire une advection chaotique (figure 2.10).

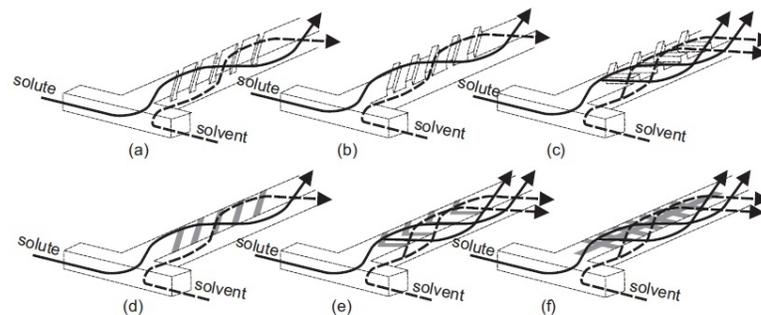


FIGURE 2.10 – Modification du canal de mélange à bas Reynolds [5]

Les rainures et les chevrons décalées seront utilisés dans la géométrie du serpentini proposée par la suite.

### Micro-mélangeurs à gouttelettes

Une autre solution pour réduire la distance de mélange est de former des gouttelettes de liquides mélangés. Le mouvement d'une gouttelette provoque un champ d'écoulement interne et rend le mélange à l'intérieur du gouttelette possible.

D'une manière générale, les gouttelettes peuvent être générés et transportés individuellement en utilisant les gradients de pression ou les effets capillaire tels que thermocapillaire et électromouillage [4].

En outre, les gouttelettes peuvent être générés en raison de la grande différence de forces de surface dans un petit canal avec multiples phases non miscibles tels que huile / eau ou eau / gaz .

[Hosokawa et al] ont rapporté le premier micro-mélangeur à goutte, qui a été fabriqué en PDMS et couvert par une plaque de PMMA. dans le concept a été utilisé un revêtement microcapillaires hydrophobe, qui a rejoint les deux gouttes initiales.[4]

L'autre conception de micro-mélangeur à gouttelettes a utilisé l'instabilité de l'écoulement entre deux liquides non miscibles. Avec l'utilisation d'un liquide tel que de l'huile, des gouttelettes d'échantillons aqueux sont formés (Figure 2.11). pendant leurs déplacement à travers le canal microscopique, la force de cisaillement entre le liquide porteur et l'échantillon accélère le processus de mélange dans la gouttelette[2].

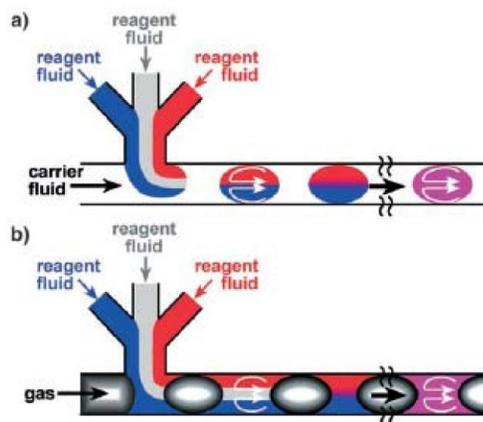


FIGURE 2.11 – Génération de gouttes par mise en contact de phases différentes pour le mélange : (a) par contact de liquides immiscibles (b) par contact avec une autre phase.[2]

## 2.5.2 Micro-mélangeurs actifs

La classification des micro-mélangeurs actifs se fait par référence au type de perturbation externe qui provoque le mouvement des deux fluides à mélanger.

### La perturbation du champ de pression

La perturbation du champ de pression a été utilisé dans l'un des premiers micro-mélangeurs actif. [Deshmukh et al] ont rapporté un mélangeur T avec perturbation de pression (Figure 2.12 [a])[4]. Le micromixeur est intégré dans un système micro-fluidique, qui a été fabriquée en silicium. Une micropompe planaire intégrée entraîne et arrête l'écoulement dans le canal de mélange pour diviser les liquides à mélanger en une série de segments et rendre le processus de mélange indépendant de la convection. La perturbation de pression peut également être généré par un micropompe externe .

[Suzuki et Ho] ont rapporté un micro-mélangeur avec des conducteurs intégrés. Les conducteurs électriques génèrent un champ magnétique , qui à son tour déplace

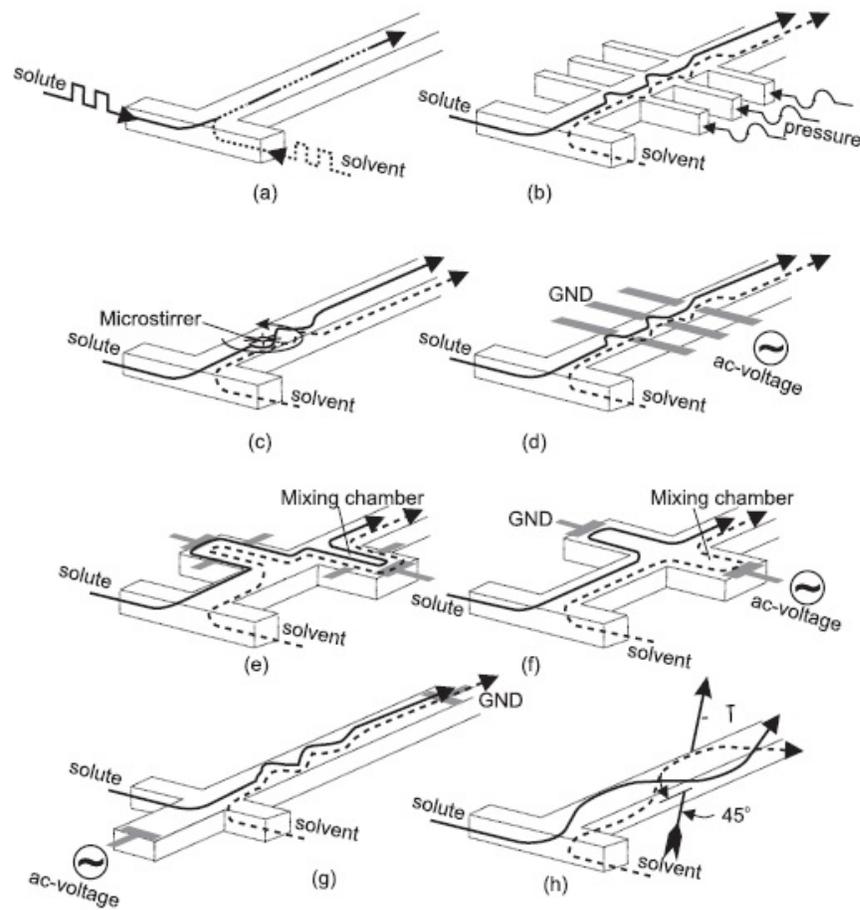


FIGURE 2.12 – Les différentes perturbations des micro-mélangeurs actifs : (a)segmentation en série (b)Perturbation de pression le long du microcanal (c)microstirrer intégré dans le microcanal (d)Perturbation électrohydrodynamique (e)Perturbation diélectrophoretique (f)Perturbation électrocinétique dans la chambre de mélange (g)Perturbation électrocinétique dans le canal de mélange [5]

des billes magnétiques de 1 à 10  $\mu\text{m}$  de diamètre. La perturbation causée par les billes magnétiques améliore le mélange de manière significative[4].

La perturbation peut aussi être générée par un microstirrer magnétique<sup>3</sup> intégré tel que rapporté par [Lu et al] (Figure 2.12[c]). L'agitateur est micro-usiné et placé à l'interface entre deux liquides dans un mélangeur T. un champ magnétique externe entraîne l'agitateur à une vitesse entre 100 tours par minute et 600 tours par minute[4].

---

3. **microstirrer** : micro-agitateur qui apporte une agitation directe dans les solutions améliorant ainsi la stratification des fluides

### **Perturbation électrohydrodynamique**

La structure du micro-mélangeur avec perturbation électrohydrodynamique est similaire à la notion rapportée par [Niu et Lee]. Plutôt que de sources de pression, des électrodes sont placées le long du canal de mélange (Figure 2.12 [d]). Le canal de mélange est de 30 mm de longueur, 250  $\mu\text{m}$  de large et 250  $\mu\text{m}$  de profondeur. Une série de fils en titane est placée dans la direction perpendiculaire au canal de mélange. En modifiant la tension et la fréquence des électrodes, un bon mélange a été atteint après moins de 0,1s à faible nombre de Reynolds (0,02) [4] .

### **perturbation diélectrophorétiques**

La diélectrophorèse (DEP) est la polarisation par un champ électrique d'une manière non uniforme d'une particule par rapport à son milieu environnant. Cet effet provoque la particule pour passer à une électrode. L'advection chaotique peut être générée dans un micro-mélangeur diélectrophorétique par des particules noyées, avec une combinaison d'actionnement électrique et des variations de la géométrie locale du canal (Figure 2.12[e])[4] .

### **Perturbation électrocinétique**

Comme mentionné plus haut, le flux électrocinétique peut être utilisé pour le transport de liquide dans les micro-mélangeurs comme une alternative aux écoulements avec gradient de pression. [Jacobson et al] ont rapporté un mélange électrocinétiquement conduit dans un mélangeur T classique. [Lettieri et al] ont proposé l'utilisation de l'effet électrocinétique afin de perturber l'écoulement par gradient de pression dans un micro-mélangeur [4] .

Dans une autre affaire, un flux électro-osmotique oscillant est causée par une tension alternative dans une chambre de mélange. L'écoulement par gradient de pression devient instable dans une chambre de mélange (Figure 2.12[f]) ou dans un canal de mélange (Figure 2.12 [g]).

[Tang et al] ont également utilisé un flux électrocinétique pour améliorer le mélange . Similaire à l'approche précédente par gradient de pression, l'application ou l'arrêt de la tension fournie à l'écoulement génère des segments de fluide dans le canal de mélange. ce schéma de modulation de flux était capable d'injecter des segments de fluide reproductibles et stables dans les micro-canaux pour une fréquence entre 0,01 Hz et 1 Hz [2].

### **Micro-mélangeur à barre magnétique**

L'utilisation de mélangeur actif à barre micro-magnétique a été introduite en 2002 par Lu [Lu et al., 2002]. La pièce maîtresse du mélangeur est une barre (rotor) faite de matériaux ferromagnétiques. Quand un champ magnétique externe tournant est appliqué, le rotor magnétisé développe un couple. Quand le couple excède la force de frottement, le rotor tourne autour du moyau (Figure 2.13 ) [2].

Ce type de micromélangeur affiche les particularités suivantes :

- le mélange est rapide,
- il est particulièrement efficace,

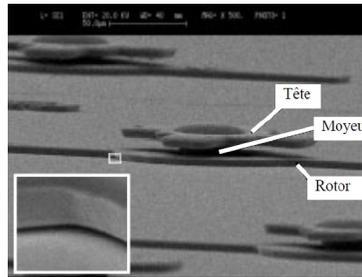


FIGURE 2.13 – Micro-mélangeur à barre magnétique[2]

- la mise en action magnétique, appliquée à distance, élimine le besoin de fils conducteurs et limite la complexité du contrôle,
- ce mélangeur peut être employé pour une grande variété de fluides.

### Perturbations acoustiques

Les actionneurs acoustiques ont été utilisés pour mélanger les liquides dans les micro-mélangeurs. Les vibrations peuvent être commandées par le changement de la fréquence et de la tension de signal d'entrée. La notion de flux induits acoustiquement, ou *acoustic streaming*, a également été utilisé comme un système de mélange actif [4].

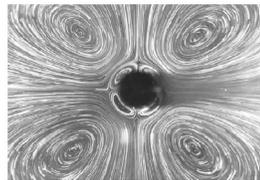


FIGURE 2.14 – Perturbations acoustiques autour d'un cylindre[6]

Les mélangeurs ultrasoniques peuvent avoir des problèmes dans les applications pour l'analyse biologique et chimique à cause de l'élévation de température provoquée par l'énergie acoustique. Beaucoup de fluides biologiques sont très sensibles à la température. En outre, les ondes ultrasonores environ 50 kHz sont nocif pour les échantillons biologiques à cause de la possibilité de cavitation.

### Perturbation thermique

Comme le coefficient de diffusion dépend fortement de la température, l'énergie thermique peut également être utilisée pour améliorer le mélange.

L'idée est d'utiliser une bulle thermique pour produire des perturbations dans un canal de mélange[4].

### 2.5.3 Le diagramme Peclet Reynolds

Le diagramme (Figure 2.15) nous renseigne sur les intervalles de fonctionnement des micro-mixeurs passifs ; il montre qu'ils fonctionnent à faible nombre de Reynolds avec faible nombre de Peclet (coin inférieur gauche,) ou à des nombres de Reynolds élevés en régime de transition à la turbulence (coin supérieur droit).

Les points de fonctionnement des mélangeurs passifs sur la base d'advection chaotique et mélangeurs actifs peuvent être distribués autour des lignes caractéristiques pour liquides et gaz pour une large gamme de Nombres de Reynolds.

Micromélangeurs avec lamination passif de multiples flux ont généralement un petit nombre de Peclet ( $Pe < 100$ ). dans la gamme de ( $Pe < 1,000$ ), le mélangeur peut être considéré comme diffusif.

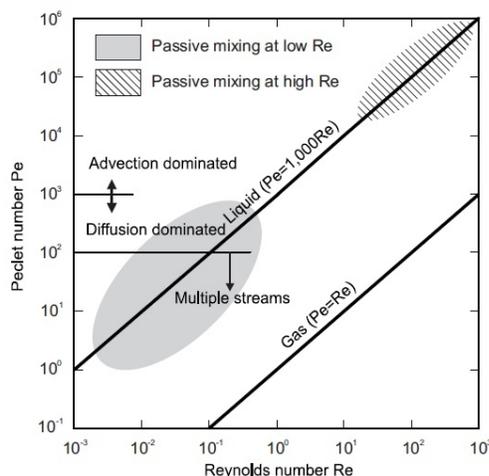


FIGURE 2.15 – Diagramme Pe-Re[5]

**Conclusion** Le développement des micromélangeurs a progressé rapidement au cours des dernières années. Depuis le début des dispositifs en silicium et de verre, un certain nombre de micromélangeurs polymères ont été fabriqués et testés avec succès.

En raison de leurs conceptions simples, les micromélangeurs passifs trouvent leurs places dans la plupart des applications en analyse chimique. Alors que les mélangeurs avec lamination classiques fonctionnent bien à faibles nombres de Reynolds et Péclet, les micromélangeurs basés sur l'advection chaotique peuvent être conçus pour s'adapter à une large gamme de nombres de Reynolds.

Le mélange basé sur l'advection chaotique ne dépend pas du nombre de Peclet.

Avec une tendance aux systèmes microfluidiques polymères, un micro-mélangeur passif simple mais efficace est le choix pour de nombreuses applications dans l'industrie chimique et biochimique.

# Chapitre 3

## Modèle mathématique

### Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Hypothèses simplificatrices . . . . .</b>	<b>32</b>
<b>3.2</b>	<b>Les équations gouvernantes . . . . .</b>	<b>33</b>

---

Dans ce chapitre seront introduites les différentes hypothèses adoptées pour la simulation ainsi que les équations gouvernantes du problème de mélange dans la microfluidique.

### 3.1 Hypothèses simplificatrices

La résolution des équations gouvernantes a été faite moyennant un certain nombre d'hypothèses cités ci-dessous.

- **Fluides miscibles** : La miscibilité désigne usuellement la capacité de divers liquides à se mélanger.
- **Fluides visqueux** on suppose que le processus de mélange ce fait à température constante et n'engendre pas de variations sur la viscosité des fluides.
- **Newtonien** : un fluide dont la loi contrainte – vitesse de déformation est linéaire  $\tau = \mu \cdot \frac{\partial u}{\partial y}$ .
- condition de non glissement sur les parois des canaux de mélange ( $v = 0$ ),profil développé de la vitesse à l'entrée.
- validité de l'approche hydrodynamique (continuité de l'écoulement).
- les parois du canal sont supposés être lisse (rugosité et imperfections expérimentale sont négligés).
- les variations de la concentration ne modifient par la viscosité et la densité des fluides.

- Écoulement **incompressible** et **isotherme**.
- Absence de réactions chimique ou de génération de masse.
- Comme a été démontré auparavant dans le chapitre 1, l'écoulement est laminaire dans la plupart des dispositifs microfluidique.

## 3.2 Les équations gouvernantes

On prendra un repère cartésien dans notre simulation donc toutes les équations qui suivent seront décrites dans le repère cartésien.

Le processus de mélange a été étudié en résolvant les équations de l'écoulement ainsi que celle de transfert de masse en deux étapes. Dans un premier lieu, l'équations de Navier-Stokes (3.2) et celle de la continuité (3.1) sont résolues pour un régime établi. Ensuite, la distribution de la concentration est obtenue en résolvant l'équation de la convection-diffusion (3.3) en supposant un régime établi ( $\frac{\partial c}{\partial t} = 0$ ), ainsi, les vitesses calculées en première étape sont introduites dans la deuxième équation.

### 1- Equation de continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (3.1)$$

- fluide **incompressible**  $\Rightarrow \rho$  constant.

Donc l'équation de continuité s'écrit :

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{v}) = 0$$

### 2- Equation de Navier-stokes

$$\rho \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \rho (\vec{v} \vec{\nabla}) \vec{v} = \rho \vec{f} - \vec{\nabla} p + \mu \vec{\nabla}^2 \vec{v} \quad (3.2)$$

-écoulement stationnaire  $\Rightarrow \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = 0$

-pour un fluide newtonien incompressible l'équation (3.2) s'écrit :

$$(\vec{v} \nabla v) = -\nabla P + \nu \nabla^2 v + f$$

### 3- Equation de la convection-diffusion pour quantifier la matière

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \underbrace{v \nabla \cdot c}_{\text{convection}} + \underbrace{\nabla \cdot (-D \nabla c)}_{\text{diffusion}} = \underbrace{R}_{\text{génération de masse}} \quad (3.3)$$

- écoulement stationnaire  $\Rightarrow \frac{\partial c}{\partial t} = 0$ .
- absence de réaction chimique ou de génération de masse  $\Rightarrow R = 0$ .
- coefficient de diffusion D constant (milieu isotropique).

Dans un repère cartésien l'équation (3.3) s'écrit :

$$u_x \frac{\partial c}{\partial x} + u_y \frac{\partial c}{\partial y} + u_z \frac{\partial c}{\partial z} = D \left[ \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right] \quad (3.4)$$

Dans le micro-mélangeur en forme  $\tau$  nous avons supposé que la convection domine suivant  $z$ , l'équation (3.4) s'écrit :

$$u_z \frac{\partial c}{\partial z} = D \left[ \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right]$$

#### 4- Évaluation des pertes de charges

pour quantifier les pertes de charges dans nos différentes configurations on a eu recours au théorème de **Bernoulli** généralisé décrit si dessous.

$$(P_{entrée} - P_{sortie}) + \frac{1}{2} \rho (v_{entrée}^2 - v_{sortie}^2) + \rho g (Z_{entrée} - Z_{sortie}) + W_{pompe} = \Delta P \quad (3.5)$$

- L'entrée et la sortie sont à la même hauteur  $\Rightarrow Z_{entrée} = Z_{sortie}$ .
  - Théorème appliqué entre l'entrée et la sortie du mélangeur  $\Rightarrow W_{pompe} = 0$ .
- L'équation (3.5) devient :

$$\Delta P = (P_{entrée} - P_{sortie}) + \frac{1}{2} \rho (v_{sortie}^2 - v_{entrée}^2)$$

#### 5- Évaluation de la qualité du mélange

L'évaluation de la qualité du mélange a été basée sur la loi de **Danckwerts**[7] définie par :

$$I_s = \frac{\sigma^2}{\sigma_{max}^2}$$

avec :

$$- \sigma^2 = \frac{1}{|v|} \int_V (c - \bar{c})^2 dV,$$

- $\sigma_{max}^2$  représente la variance maximale possible, ie la dispersion maximale de la concentration par rapport au cas du mélange parfait ( $\bar{c} = \frac{c_0}{2}$ ), elle se calcule dans la section où le mélange se produit le moins (l'entrée du canal).

La mesure de la qualité du mélange se déduit :

$$M_{quality} = 1 - \sqrt{I_s} = 1 - \frac{\sigma}{\sigma_{max}} \quad (3.6)$$

$$M_{quality} = 1 - CoV \implies CoV = \frac{\sigma}{\sigma_{max}} \quad (3.7)$$

# Chapitre 4

## Méthode numérique

### Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>La simulation numérique en mécanique des fluides . . . .</b>	<b>35</b>
<b>4.2</b>	<b>Les étapes à suivre . . . . .</b>	<b>36</b>
<b>4.3</b>	<b>Critique des résultats . . . . .</b>	<b>37</b>
<b>4.4</b>	<b>Méthode des éléments finis . . . . .</b>	<b>37</b>
<b>4.5</b>	<b>Comsol Multiphysics . . . . .</b>	<b>38</b>
4.5.1	Historique . . . . .	38
4.5.2	Description . . . . .	38
4.5.3	Introduction à l'interface utilisateur de COMSOL 4.2a .	39
<b>4.6</b>	<b>La modélisation 3D du phénomène de mélange sur Comsol-</b>	
	<b>multiphysics 4.2a . . . . .</b>	<b>40</b>
4.6.1	Le maillage . . . . .	42
4.6.2	La résolution . . . . .	43
<b>4.7</b>	<b>Conclusion . . . . .</b>	<b>43</b>

---

Ce chapitre présente la mécanique des fluides numérique en tant qu'outil pour l'ingénieur. L'objectif est donc de présenter le plus clairement possible les capacités de cet outil, mais également ses limites. En particulier, l'accent sera mis sur la méthodologie à adopter pour mener à bien une simulation, ainsi que la façon de s'assurer de la pertinence des résultats. enfin le logiciel de simulation Comsol-multiphysics sera présenté avec la configuration choisie pour modéliser le phénomène de mélange.

### 4.1 La simulation numérique en mécanique des fluides

La CFD, Computational Fluid Dynamics, se situe au carrefour de plusieurs disciplines scientifiques :

- ▷ la physique (mécanique des fluides, du solide, ...);
- ▷ les mathématiques (analyse numérique, ...);
- ▷ l'informatique (programmation, utilisation, ...).

La mécanique des fluides numérique (MFN), consiste à étudier les mouvements d'un fluide, ou leurs effets, par la résolution numérique des équations régissant le fluide. En

fonction des approximations choisies, qui sont en général le résultat d'un compromis en termes de besoins de représentation physique par rapport aux ressources de calcul ou de modélisation disponibles, les équations résolues peuvent être les équations d'Euler, les équations de Navier-Stokes, etc.

Historiquement, la CFD a commencé à se développer en génie mécanique, pour étudier les écoulements autour d'un objet afin de mieux le profiler (ailes d'avions, automobiles, etc). Dans le domaine du génie chimique, les problèmes sont, en général, beaucoup plus complexes de par, en particulier, le caractère multiphasique des écoulements, les réactions chimiques et le comportement rhéologique des fluides[12].

La CFD a grandi d'une curiosité mathématique pour devenir un outil essentiel dans pratiquement toutes les branches de la dynamique des fluides, de la propulsion aérospatiale aux prédictions météorologiques en passant par le dessin des coques de bateaux. Dans le domaine de la recherche, cette approche est l'objet d'un effort important, car elle permet l'accès à toutes les informations instantanées (vitesse, pression, concentration) pour chaque point du domaine de calcul, pour un coût global généralement modique par rapport aux expériences correspondantes.

## 4.2 Les étapes à suivre

De manière générale, la résolution d'un problème de CFD passe par trois grandes phases :

- 1. la préparation du problème : ceci passe par la définition d'une géométrie, d'un maillage discrétisant le domaine de calcul, du choix des modèles et méthodes numériques employées ;
- 2. la résolution numérique du problème qui passe par l'exécution d'un programme informatique. Bien des problèmes suscitant un minimum d'intérêt nécessitent des ordinateurs aux très grandes capacités ;
- 3. l'exploitation des résultats : on vérifie d'abord leur cohérence, puis ils sont examinés afin d'apporter des réponses aux questions posées par le problème de CFD de départ. L'exploitation des résultats passe le plus souvent par des logiciels de post-traitement scientifiques utilisés dans de nombreuses branches de la physique, ou bien par les modules de post-traitement disponibles dans certains logiciels de CFD commerciaux.

Chaque logiciel de simulation opte pour une certaine méthode de discrétisation en espace pour résoudre les équations aux dérivées partielles, parmi les différentes méthodes existantes on trouve :

- **Différences finies** :approximation des dérivées intervenantes dans les équations à l'aide de développement en série de Taylor ;
- **Les éléments finis** :cette méthode est utilisée dans notre logiciel de simulation(Comsol),elle sera expliquée dans le paragraphe[ 4.4] ;
- **Les volumes finis** :Bilan local des flux dans un petit volume de contrôle (Fluent,Ansys,etc) ;
- **CVFEM** :contrôle volume finite element method ; qui utilise une combinaison entre les deux techniques MEF,MVF.

### 4.3 Critique des résultats

La simulation numérique ne doit évidemment pas être confondue - comme le terme de simulation le suggère - avec le réel. Ce n'est pas parce que l'ordinateur dit que cela va se passer comme cela que cela se comporte effectivement comme tel dans la réalité (par exemple : simulations numériques des prévisions météorologiques). La simulation numérique n'est qu'une représentation de la réelle assise sur le modèle théorique sous-jacent. Si le modèle théorique ainsi informatisé est erroné, les résultats calculés sont alors faux et peuvent amener à des prises de décision elles-mêmes erronées. En particulier, un modèle est construit pour un usage donné, et son emploi dans un autre contexte à de fortes chances d'engendrer des résultats faux, d'où la nécessité de la validation des résultats.

L'analyse critique des résultats, la vérification de la validité des modèles théoriques utilisés, la confrontation des résultats prédits à l'expérience... sont autant de réflexes d'ingénieur à avoir et qui font alors partie même de l'éthique du professionnel utilisateur, ceci afin notamment de ne pas prendre de risques inconsidérés dans les décisions de logistique, de conception (par exemple : voir la catastrophe inhérente au joint d'étanchéité du booster de la Navette spatiale américaine dont la simulation numérique n'a pas détecté la faiblesse structurelle) et/ou d'investissement (par exemple : voir les ratés financiers dans le démarrage des recettes d'un important parc d'attraction parisien du fait de mauvaises simulations numériques des fréquentations et des dépenses prévisionnelles des consommateurs).

### 4.4 Méthode des éléments finis

Dans cette section nous présentons la méthode des éléments finis qui est la méthode numérique de référence pour le calcul des problèmes avec les conditions limites.

La méthode des éléments finis fait partie des outils de mathématiques appliquées. Il s'agit de mettre en place par les principes de formulation variationnelle une solution approchée d'une équation aux dérivées partielles (ou EDP) sur un domaine compact avec prises en compte des conditions aux limites ou frontières des éléments étudiés. L'approximation par éléments finis permet de réduire la dimension du problème en choisissant de le résoudre sur des sous-domaines de dimensions réduites. Nous recherchons sur ces sous-domaines une fonction approchée répondant aux conditions du problème. La solution sur la totalité du domaine sera ensuite obtenue par la juxtaposition sur les sous-domaines.

Dans un domaine  $W$  on commence par le découper en sous-domaine  $W_e$  de formes relativement simples appelées éléments finis. Pour cela, nous choisissons dans le domaine  $W$  un certain nombre de points : les nœuds géométriques. Ensuite nous relierons ces nœuds entre eux au moyen des lignes et nous obtenons les éléments finis qui sont caractérisés par la forme de leurs frontières et le nombre de nœuds géométriques nécessaires à leur définition. Cette opération s'appelle la discrétisation (ou maillage) du domaine  $W$ .

Il reste ensuite à définir une fonction approchée  $\hat{u}(x,y)$  sur le maillage obtenu. Il faut bien sûr que la solution approchée " $\hat{u}$ " converge vers la solution exacte " $u$ " au fur et à mesure que le maillage devient de plus en plus fin. (Courbe de dépendance

du maillage) .

Afin d'utiliser la méthode des éléments finis pour la résolution d'un problème, il est nécessaire d'effectuer un préalable des équations différentielles. Il s'agit d'obtenir une formulation intégrale équivalente qui s'adapte de façon naturelle à la géométrie discrétisée. En exprimant ensuite la solution "u" sous sa forme "û" approchée, on obtient directement un système d'équations algébriques nodales  $\hat{u}_i$ , équivalent discret du problème continu.

La résolution du système d'équations est une partie importante du temps de calcul dans un programme d'éléments finis. Un problème industriel complexe peut avoir un nombre impressionnant de degrés de liberté, dans certaines de nos simulations on est arrivé jusqu'à 3millions d'éléments de maillage.

Il existe deux catégories de méthodes de résolution, les méthodes directes et les méthodes itératives. Les premières regroupent les techniques de factorisation de type Gauss ou Choleski (matrices symétriques et définies positives), le temps de calcul croît généralement en  $n^3$ . Les méthodes itératives sont de type gradients conjugués. Elles sont nettement mieux adaptées que les méthodes directes pour une solution rapide. Jusqu'il y a peu d'éléments, on leur préfère les algorithmes directs en raison de leur robustesse et de leur comportement prédictif. Depuis les années 1980, on a cependant assisté au développement de techniques itératives performantes et fiables.

## 4.5 Comsol Multiphysics

### 4.5.1 Historique

Le logiciel COMSOL et la société correspondante ont été créés en 1986 par des étudiants de **Germund Dahlquist**<sup>1</sup>, dans la suite de son cours consacré à la simulation numérique à Institut royal de technologie (KTH)<sup>1</sup> à Stockholm en Suède. La première version de COMSOL Multiphysics est sortie en 1998. La version initiale (avant 2005) de COMSOL Multiphysics s'appelait FEMLab.

### 4.5.2 Description

#### La multi-physique

Comsol Multiphysics est conçu pour résoudre des problématiques multiphysiques.

La description d'un phénomène par une seule physique signifie qu'une seule variable, et son équation associée, suffit pour prédire le comportement du système. Température pour l'équation de la chaleur, champ de vitesse pour les écoulements par exemples. Il s'agit d'une simplification : la température d'un système est rarement à l'équilibre, les échanges de matière profitent des écoulements de fluide, la déformation d'un composant mécanique prend en compte les propriétés du matériau. Lorsque la modélisation saisit au moins deux physiques pour décrire totalement ou partiellement une problématique, on pénètre de plein pied dans le multiphysique.

---

1. **Germund Dahlquist**(1925-2005), mathématicien suédois fondateur du Nordic Journal of numerical analysis.

Cmsol Multiphysics est un logiciel d'analyse par éléments finis permettant d'effectuer différentes analyses de structure, thermique, écoulement fluide, acoustique, et plus .... L'interface graphique de Cmsol Multiphysics permet à l'utilisateur de définir avec aisance le problème 1D, 2D ou 3D à résoudre.

Le point fort de ce logiciel est la simulation multiphysique couplant de manière arbitraire les lois physiques des écoulements, de la mécanique des structures et de l'électromagnétisme. Le champ d'application couvert est donc extrêmement vaste et va du macroscopique au microscopique. Les solutions Cmsol sont en effet employées pour simuler aussi bien le comportement d'un volcan ou d'un mélangeur de produits chimiques que celui d'un circuit imprimé ou d'un vaisseau sanguin. Les aspects étudiés peuvent être le couplage entre la mécanique et les écoulements dans le cas du vaisseau sanguin, la chaleur et les courants électriques au sein d'un circuit électronique ou encore les déformations mécaniques d'un micro-actionneur sous l'action d'un courant électrique.

Cmsol Multiphysics peut être exploité pour du pré-dimensionnement en utilisant les fonctions les plus standards ou par des experts grâce à sa richesse de paramétrisation des calculs. Les logiciels de modélisation scientifique sont conventionnellement optimisés pour la résolution de problèmes dans un domaine spécifique.

Développé initialement comme une toolbox de Matlab, il dispose aujourd'hui de son propre environnement graphique permettant à la fois le dessin des géométries et l'affichage de résultats en post-traitement . L'utilisateur définit ses couplages ou sélectionne les interfaces prédéfinies.

En plus de sa particularité de disposer d'une base de données d'équations permettant de modéliser différents phénomènes physiques, Cmsol offre aussi des fonctions avancées permettant d'entrer manuellement des EDP spécifiques. De plus, les données du logiciels sont accessibles depuis Matlab, ce qui permet la réalisation de scripts.

Les différentes étapes du processus de modélisation : définir la géométrie, les propriétés matériaux, le maillage, choisir la ou les physiques, résoudre et afficher les résultats, sont intégrées dans une seule interface. Des modules d'applications optionnels offre des interfaces spécialisées notamment avec les logiciels de CAO comme SOLID-WORKS,PRO-ingenieur,Katia,etc et autres logiciels comme Matlab pour le post-traitement des données.

### 4.5.3 Introduction à l'interface utilisateur de COMSOL 4.2a

Les différents éléments de l'interface utilisateur de COMSOL 4.2a sont présentés à la figure[ 4.1].

L'interface de COMSOL peut être séparée en quatre parties. À gauche, on retrouve le Model Builder où il est possible de définir des variables et autres paramètres du problème (Parameters), le modèle (Model) où se retrouvent la géométrie (Geometry), les propriétés des matériaux formant la géométrie, le ou les modèles de physique s'appliquant au problème étudié et les paramètres de maillage (Mesh). Le Model Builder comporte aussi le type de problèmes et les paramètres de solveur (Study) et les options d'affichage et de post traitement des données (Results).

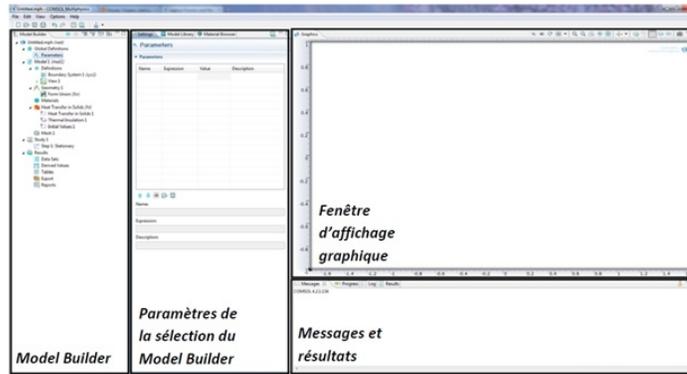


FIGURE 4.1 – Les quatre parties de l’interface Comsol-multiphysics

La colonne directement à droite comporte les options relatives à ce qui est sélectionné dans le Model Builder, par exemple, les dimensions d’un objet qui vient d’être créé dans Geometry. C’est aussi à cet endroit que les paramètres initiaux de la simulation et les modèles physiques nécessaires sont définis.

En haut à droite, la fenêtre d’affichage graphique (Graphics) permet de visualiser la géométrie, le maillage ou les résultats. Au haut de cette fenêtre se retrouvent diverses options permettant de changer le grossissement de l’affichage, l’orientation d’un objet tridimensionnel, etc. Les options permettant de sélectionner des objets, des domaines, des frontières ou des points se retrouvent aussi au haut de cette fenêtre.

Finalement, directement au-dessous de la fenêtre d’affichage graphique, il y a une fenêtre permettant de visualiser les messages d’erreurs, le progrès des simulations, la liste des opérations effectuées lors du calcul de la solution ainsi que des résultats numériques calculés une fois la simulation terminée.

## 4.6 La modélisation 3D du phénomène de mélange sur Comsol-multiphysics 4.2a

Comsol-multiphysics offre la possibilité de réaliser des simulations en 3D, pour le faire il faut choisir l’option 3D comme dimension de l’espace lors de la conception de la géométrie (figure 4.2).

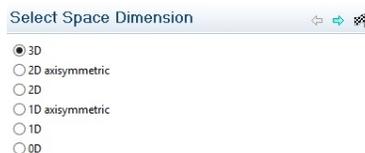


FIGURE 4.2 – Le choix de la dimension de l’espace

Le phénomène physique est modélisé sur Comsol Multiphysics par le choix des modèles physiques qui le constituent, dans le cas d’un mélange de fluides miscibles en microfluidique, deux modèles s’avèrent nécessaires, en premier lieu le modèle

écoulement laminaire (**laminar flow**) pour décrire l'écoulement laminaire dans le mélangeur, ensuite le modèle transport des espèces dilués(**transport of diluted species**) pour caractériser le phénomène de transfert de matière(figure 4.3).

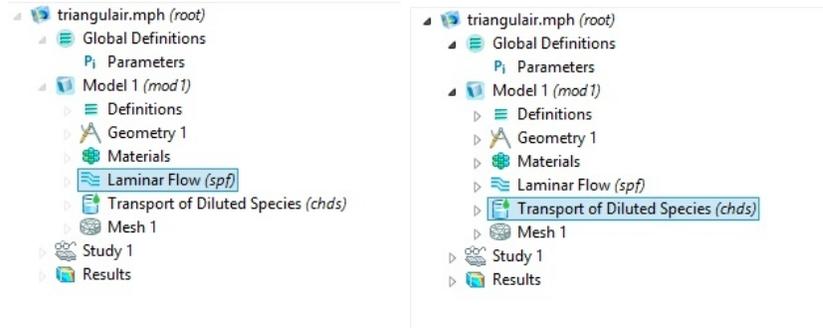


FIGURE 4.3 – les modèles utilisés pour décrire le mélange

Après le choix des modèles physiques et la conception de la géométrie(le domaine fluide) on doit préciser la nature des fluides en question, pour cela on peut choisir parmi plusieurs fluides dans la bibliothèque de Comsol, ou bien entrer manuellement les propriétés des fluides.

Enfin,reste a préciser le type d'étude à effectuer, pour cela on doit choisir entre le régime stationnaire, transitoire, étude de résonance,etc.Dans notre cas, le régime stationnaire a été choisi(figure 4.4).

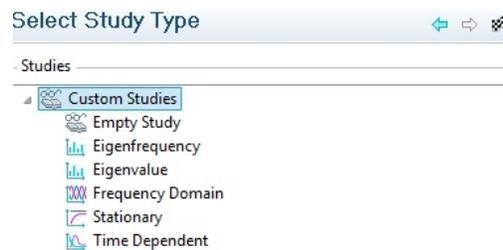


FIGURE 4.4 – les différents types d'études proposés par Comsol multiphysics

Pour bien définir le problème à étudier, différentes conditions aux limites doivent être introduites.

-Les conditions initiales(vitesses ou pressions initiales, les différents coefficients,etc) sont définies respectivement à chaque configuration.

-Pour caractériser le profil développé de la vitesse, on impose la condition de non glissement sur les parois (figure 4.5).



FIGURE 4.5 – la condition de non glissement au parois

-La condition d'imperméabilité des parois est définie par un flux nul(figure 4.6).



FIGURE 4.6 – la condition de flux nul

-Pour avoir plus de précision dans les résultats nous avons pris en considération jusqu'au terme de troisième degré pour la concentration (**cubic**),le deuxième pour la vitesse(P2) et le premier(P1) pour la pression comme le montre la figure( 4.7). On précise ici que nous avons utilisé un calcul séquentiel avec un couplage entre les deux modèles choisis.



FIGURE 4.7 – L'ordre de discrétisation

### 4.6.1 Le maillage

Un maillage est la discrétisation spatiale d'un milieu continu, ou aussi, une modélisation géométrique d'un domaine par des éléments proportionnés finis et bien définis.

La question qui se pose est le type de maillage le plus approprié pour avoir des résultats proche du cas réel, sachant que le type de maillage a des répercussions directes sur le résultat final.

Pour choisir le type de maillage on a fait une comparaison entre deux types de maillage.

– **Le maillage cubique**

Comme son nom l'indique le **cubic** est un maillage qui discrétise le domaine en cubes de 8 nœuds par élément.

– **Le maillage tétraédrique**

c'est un maillage qui discrétise le domaine en tétraèdre formant ainsi 4 nœud par élément,comme le montre la figure( 4.8)

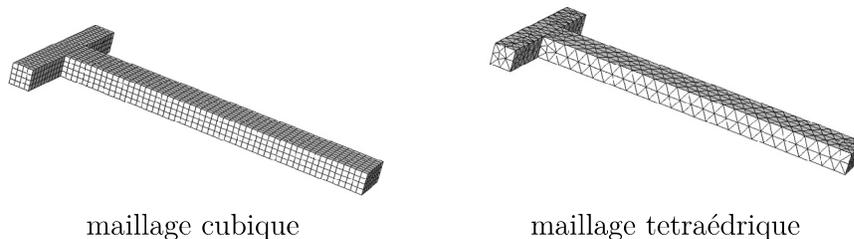


FIGURE 4.8 – un micro-mélangeur en forme de T avec différents type de maillage

Deux simulations ont été réalisées pour un micro-mélangeur en forme de T avec les mêmes dimensions et des conditions initiales identiques.

Lors de la comparaison on a constaté que pour un maillage cubique grossier la solution prend beaucoup de temps que celle en tétraédrique et pour un maillage raffiné elle converge pas.

Pour ces raisons nous avons opté pour l'utilisation d'un maillage tétraédrique dans toutes les simulations qui seront effectuées par la suite.

### 4.6.2 La résolution

Le cœur numérique de Comsol Multiphysics est constitué d'une famille de solveurs pour des équations bilan (analyse linéaire, non-linéaire, stationnaire, temporelle, modale, paramétrée). Une équation bilan représente le bilan d'une inconnue dans un élément de volume : apport – perte = source. C'est ce type d'équations qui est à la base des équations de la physique (transport de chaleur, de quantité de mouvement, etc.). Pratiquement toutes les équations sont transposables sous cette forme d'équation bilan. Dès lors, le logiciel propose par défaut de résoudre simultanément les inconnues du système d'équations. Puisque toutes les équations sont traduites sous forme d'équations bilan, il suffit de considérer un vecteur regroupant toutes les inconnues et de choisir le solveur adapté à l'analyse que l'on souhaite effectuer, pour résoudre d'un bloc toutes les équations.

Avantage : la résolution prend en compte les fluctuations des inconnues en même temps (indispensable en piézo-électricité, en réaction chimique à forte cinétique par exemple). Bien sûr, la résolution séquentielle des équations est également possible selon le choix de l'utilisateur.

## 4.7 Conclusion

Les logiciels et les outils de CFD se développent très rapidement. Les entreprises qui commercialisent les logiciels font de la recherche à la fois dans le domaine des algorithmes numériques et sur les modèles physiques proposés aux utilisateurs. Les produits commerciaux s'appuient également largement sur les résultats publiés par la recherche académique.

Du fait de la parallélisation massive des ordinateurs, ainsi que leur évolution très rapide, de très fortes améliorations des performances peuvent être attendues dans les années à venir.

# Résultats et Discussions

# Chapitre 5

## Mise en évidence de l'influence des différents paramètres physiques sur le mélange

### Sommaire

---

5.1	La différence entre l'efficacité du mixeur et la qualité du mélange . . . . .	44
5.2	Le micromixeur T . . . . .	45
5.3	L'influence de la variation de Re . . . . .	45
5.3.1	Utilisation de l'interface consol livelink to matlab . . . . .	46
5.4	Effet de la longueur du micro-mixeur sur l'intensité de mélange . . . . .	47
5.5	Effet de la viscosité des deux fluides sur la qualité du mélange . . . . .	47

---

L'amélioration du mélange nécessite une connaissance approfondie des mécanismes régissant l'écoulement et les échanges de matière entre les espèces. Dans ce chapitre une caractérisation numérique de l'écoulement et de la qualité du mélange a été effectuée dans un micro-mélangeurs à géométrie en T afin de mettre en évidence l'influence des différents paramètres physiques sur la qualité du mélange.

### 5.1 La différence entre l'efficacité du mixeur et la qualité du mélange

Malheureusement, ces termes sont souvent utilisés de manière interchangeable, en particulier dans les spécifications de processus pour mélangeurs statiques. Il est important de comprendre la différence entre l'efficacité du mélangeur et la qualité du mélange, afin de spécifier correctement les exigences de performance d'un mélangeur statique.

La qualité du mélange ( $M_{quality} = 1 - CoV$ )(Voir modèle mathématique équation 3.6), définit l'objectif de mélange et, pour la plupart des applications, un CoV

de 0,05 ( $M_{quality} = 95\%$ ) assure une parfaite homogénéité du mélange<sup>1</sup>

L'efficacité du mélangeur, par contre, indique comment l'objectif de mélange est atteint, et pas l'objectif lui-même. La même qualité de mélange peut généralement être réalisée par des conceptions à la fois inefficace et efficace de mélangeurs statiques :

- Une conception de mélangeur inefficace aura une chute de pression relativement élevée et / ou un temps de mélange plus long.
- Une conception de mélangeur efficace aura une chute de pression relativement faible et / ou un court temps de mélange.

## 5.2 Le micromixeur T

Pour démontrer l'influence des différents paramètres physiques sur la qualité du mélange, nous avons effectué une simulation du mélange de deux fluides le long du canal d'un micro-mélangeur basique sous forme de T, la figure 5.1 montre la géométrie utilisée avec les conditions initiales de simulation.

Afin de comparer et valider nos résultats, on a pris les mêmes dimensions du mélangeur utilisé dans les travaux de Dieter et al[7].

À chaque fois, nous avons varié un paramètre pour voir son influence directe sur le mélange.

Les simulations ont été effectuées en utilisant la station de calcul HP-Z800 du laboratoire de génie mécanique et développement.

TABLE 5.1 – Les caractéristiques de la station de calcul utilisée

Référence	workstation HP-Z800
Processeur	Intel dual processor Xeon(R), X5660 2,8 Ghz
Ram	12Go

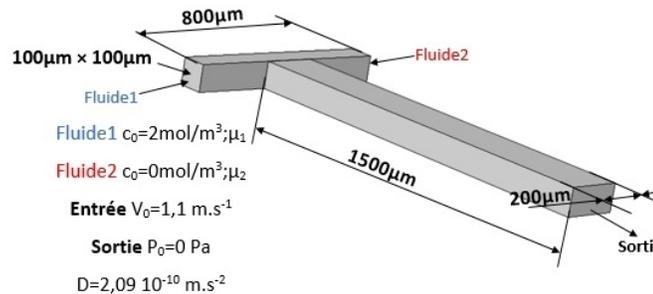


FIGURE 5.1 – schéma du micro-mélangeur T avec les conditions initiales

1. résultat publié par le BHR group spécialisé dans le fluid engineering, organisation qui dérive du BHRA (The British Hydromechanics Research Association[13]).

### 5.3 L'influence de la variation de Re

La vitesse à laquelle les deux fluides entrent dans le mélangeur a un effet direct sur la qualité du mélange, et elle est proportionnelle au gradient de pression imposé entre les deux bouts du mélangeur. Pour obtenir une qualité de mélange bien précise on doit choisir une vitesse d'entrée précise et par conséquent un gradient de pression cohérent. La figure 5.2 montre la sensibilité de la qualité du mélange aux variations

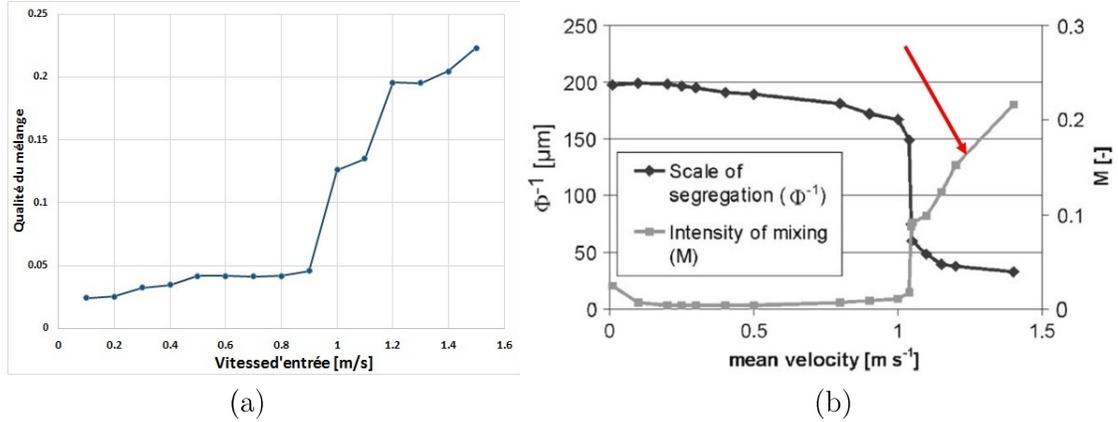


FIGURE 5.2 – Évolution de la qualité du mélange en fonction de la vitesse d'entrée (a)Présent travail (b)Dieter et al[7]

des vitesses d'entrée, on remarque que pour des vitesses allant de 0.1 à 0.8 m/s, la qualité du mélange ne dépasse pas les 5% et se réalise seulement par diffusion à cause de la laminarité des écoulements.

L'augmentation de la vitesse d'entrée engendre plus de chevauchement entre les deux écoulements générant ainsi plus de surface de contact ce qui améliore la diffusion, quant à la convection, elle profite aussi bien du chevauchement que de l'augmentation des vitesses. ce qui explique l'amélioration du mélange pour des vitesses plus grandes.

De ce fait, il est plus intéressant d'augmenter les vitesses d'entrée du canal dans la mesure de capacité des dispositifs de contrôle d'écoulement.

#### 5.3.1 Utilisation de l'interface consol livelink to matlab

L'interface **Consol livelink to matlab** (Figure 5.3) permet à travers un serveur qui connecte les deux logiciels de récupérer les résultats de la modélisation numérique du processus de mélange effectué sur COMSOL, et ensuite réaliser une boucle via Matlab qui permet de générer plusieurs plans à travers la longueur du micro-mixeur et ainsi évaluer notre coefficient de qualité de mélange en chaque plan exprimé par le coefficient  $M_{quality}$ .

Pour évaluer le  $M_{quality}$  on a programmé une boucle `M_quality_eval` [voir Annexe A]

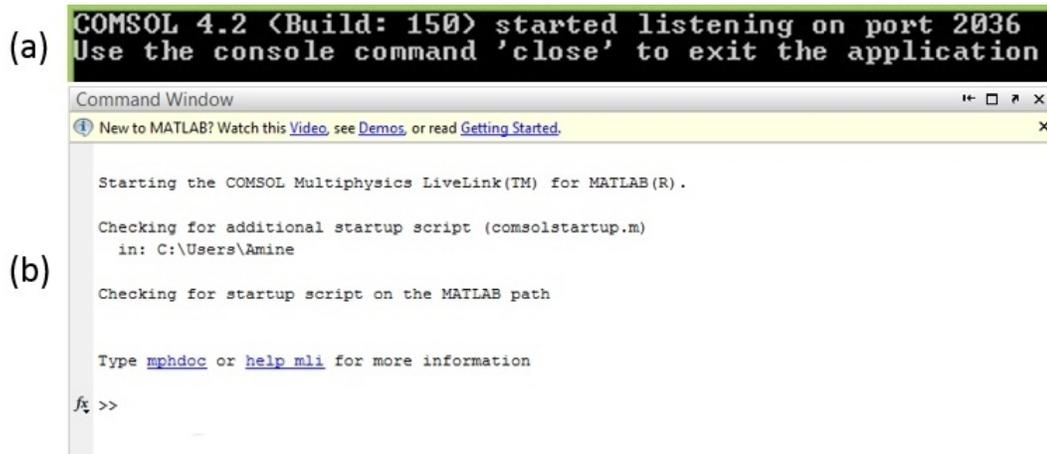


FIGURE 5.3 – (a)comsolserver avec matlab, (b)L'interface Comsol livelink to matlab

## 5.4 Effet de la longueur du micro-mixeur sur l'intensité de mélange

Dans cette section, on s'est intéressé à l'effet de la longueur du micro-canal, la vitesse des deux entrées a été fixée à  $1.1\text{ m/s}$ , la fonction `M_quality_eval`, a été utilisée afin de déterminer la qualité du mélange sur différentes sections du canal.

### Résultats

la figure 5.4 montre le résultat de la simulation, en utilisant la fonction `M_quality_eval`, on remarque que l'intensité du mélange varie en fonction de la longueur du micro-mixeur suivant la direction Y. Cette variation est interprétée par le fait qu'une longueur plus importante permet aux particules des deux fluides d'avoir plus de temps de contact ainsi qu'une surface de contact plus grande et par conséquent une influence plus grande de la diffusion et de la convection le long de Y.

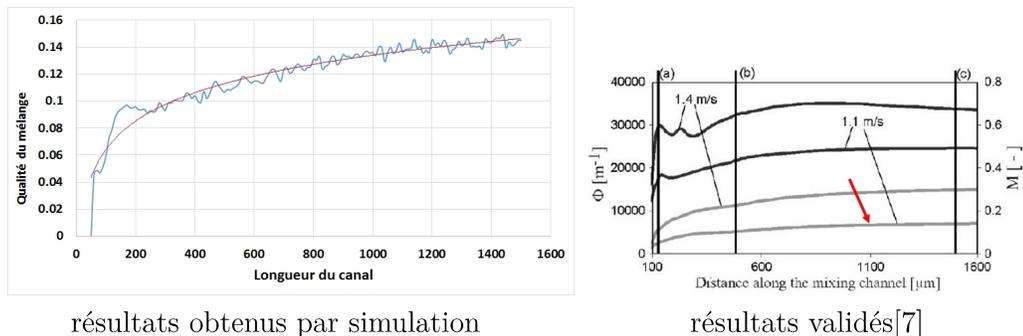


FIGURE 5.4 – Evolution de la qualité du mélange en fonction de la longueur du canal dans un micro-mélangeur T

On remarque aussi qu'après une certaine distance ( $1500\mu\text{m}$  dans notre cas), l'intensité du mélange tend à se stabiliser en atteignant sa valeur maximale.

## 5.5 Effet de la viscosité des deux fluides sur la qualité du mélange

Dans certaines applications micro-fluidiques spécialement biologiques, le mélange de fluides avec différentes viscosités s'impose, c'est un problème plus compliqué par rapport à celui du mélange de fluides similaires et la difficulté apparait dans le choix du rapport approprié qui conduit à la meilleure qualité du mélange à la sortie du micro-mixeur.

Pour mettre en évidence l'influence de la viscosité sur le processus de mélange, on a effectué une simulation en variant le rapport de viscosité  $\mu_{ratio} = \frac{\mu_1}{\mu_2}$  dans un intervalle allant de 0.3 à 2.

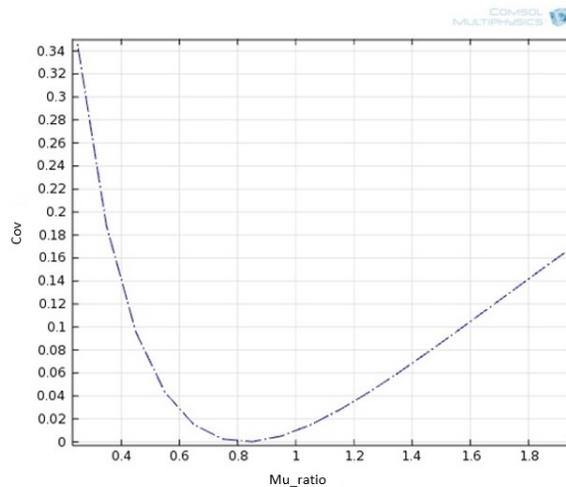


FIGURE 5.5 – La variation du CoV avec le rapport de viscosités

Les résultats obtenus coïncident avec les conclusions expérimentales obtenues par [Xia et al][14] lors du mélange de deux fluides avec différentes viscosités ; ils montrent qu'à bas Re le mélange de fluides se produit mieux quand les deux fluides ont des viscosités proches, plus la différence des viscosités augmente plus la qualité du mélange se détériore[14].

Pour avoir le meilleur rendement du mélangeur, les fluides doivent être choisis avec des viscosités de la même grandeur, Dans le cas inverse, des mélangeurs spécifiques doivent être utilisés afin de vaincre la dominance du fluide le plus visqueux.

# Chapitre 6

## Proposition d'un micro-mélangeur optimisé

### Sommaire

---

<b>6.1</b>	<b>Avantage de la géométrie en serpent</b>	<b>49</b>
<b>6.2</b>	<b>Comparaison entre deux configurations avec 4 et 6 entrées</b>	<b>51</b>
<b>6.3</b>	<b>Variation du rapport hauteur\largeur</b>	<b>51</b>
<b>6.4</b>	<b>Serpentin 6 entrées simple</b>	<b>55</b>
6.4.1	La conception	55
6.4.2	Le maillage	55
6.4.3	Les résultats	56
<b>6.5</b>	<b>Serpentin 6 entrées avec obstacles triangulaires</b>	<b>61</b>
6.5.1	La conception	61
6.5.2	Le maillage	62
6.5.3	Les résultats	62
<b>6.6</b>	<b>Serpentin 6 entrées avec obstacles circulaires</b>	<b>66</b>
6.6.1	La conception	66
6.6.2	Le maillage	67
6.6.3	Les résultats	67
<b>6.7</b>	<b>Serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles triangulaires</b>	<b>71</b>
6.7.1	La conception	71
6.7.2	Le maillage	72
6.7.3	Les résultats	72
<b>6.8</b>	<b>Serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles circulaires</b>	<b>76</b>
6.8.1	La conception	76
6.8.2	Le maillage	77
6.8.3	Les résultats	77
<b>6.9</b>	<b>Comparaison des différentes configurations</b>	<b>81</b>

---

L'analyse des échantillons biologiques issues d'un mélange nécessite une homogénéité parfaite du mélange pour éviter tout risque d'erreur pouvant induire de fausses conclusions. Les micro-mélangeurs actifs impliquent des sources d'énergie externes et augmentent l'encombrement des systèmes microfluidiques alors que ceux passifs en forme basique nécessitent des longueurs exagérées pour atteindre l'homogénéité nécessaire, d'où le besoin de géométries optimisées qui réduisent l'espace et améliorent le mélange.

Dans ce chapitre sera étudié un micro-mélangeur sous forme de serpent avec différentes variantes afin d'optimiser au maximum la conception d'un côté et le mélange de l'autre côté.

## 6.1 Avantage de la géométrie en serpent

Ce dimensionnement purement analytique a pour but d'illustrer l'avantage de la géométrie en serpent par rapport à celle d'un  $\Upsilon$  simple.

Pour mélanger complètement l'éthanol avec de l'eau dans un micro-mélangeur parallèle en forme de Y avec deux entrées sachant que le débit des deux fluides est de  $Q = 10 \mu L \cdot \text{min}^{-1}$  et que le coefficient de diffusion à la température de  $25^\circ C$  est égal à  $0.8410^{-5} \text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ .

Le nombre de Fo pour ce cas est supposé égale à 0.5.

Le but est de déterminer la longueur L du canal, on prendra une section de  $S = 100 \mu m \times 100 \mu m$ .

La longueur caractéristique du mélange est la largeur du canal  $L_{\text{mélange}} = 100 \mu m$  le temps de mélange requis :

$$Fo = \frac{D\tau}{L_{\text{mélange}}^2} \rightarrow \tau = Fo \frac{L_{\text{mélange}}^2}{D} \rightarrow \tau = 5.95 \text{s}$$

La vitesse moyenne du fluide mélangé

$$U = \frac{2.Q}{S} = \frac{2 \times 10 \times 10^{-9}}{60 \times (100 \times 10^{-6})^2} = 33.33 \times 10^{-3} \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$$

Ce qui fait une longueur L du canal de mélange

$$L = U \cdot \tau = 33.33 \times 10^{-3} \times 5.95 = 198 \text{mm}$$

Maintenant on veut transformer notre Y en une configuration en serpent et cette dernière sera placée dans une surface carré A de côté a, comme le montre la figure( 6.1).

Ce qui donnera une surface A de

$$A = 2.100.198.10^3 = 3.96 \times 10^7 \mu m^2$$

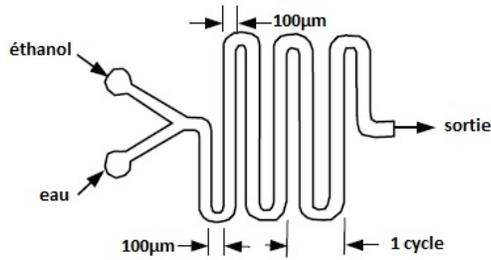


FIGURE 6.1 – la configuration serpentine

et des côtés a de

$$a = \sqrt{A} \approx 6.293mm$$

sachant que chaque tour consomme  $2 \times 100\mu m$  pour les murs et  $2 \times 100\mu m$  de largeur de canal. Le nombre (N) total de cycle est

$$N = \frac{6.293}{4 \times 100} = 16 \text{ cycle}$$

ce qui représente une amélioration dans les dimensions de  $\frac{198 - 6,239}{198} = 86,84\%$

Vu le gain significatif et l'importance de l'espace à l'échelle microscopique, il s'avère plus judicieux de concevoir le mélangeur passif sous forme serpentine.

## 6.2 Comparaison entre deux configurations avec 4 et 6 entrées

Dans cette section seront comparées deux variantes de l'entrée du canal du mélangeur, la première avec 4 entrées et la deuxième avec 6 entrées, on présentera les géométries avec les conditions de simulations, ainsi que les courbes de dépendance du maillage.

la figure 6.2 montre les deux variantes de l'entrée du serpentin avec les conditions initiales de simulation.

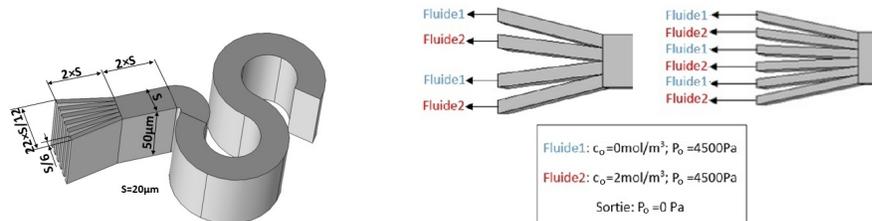


FIGURE 6.2 – schéma des deux variantes d'entrée avec les conditions initiales

### Les résultats

Les deux géométries ont été maillées avec des éléments tétraédrique, ensuite une étude de la sensibilité des résultats au nombre des éléments du maillage a été faite. La figure 6.3 montre que les deux courbes se stabilisent après un certain nombre d'éléments du maillage, la configuration avec 4 entrées donne une qualité du mélange de 14%, alors que celle avec 6 entrées arrive jusqu'à  $M_{quality} = 32\%$  ce qui illustre clairement l'avantage d'une configuration avec 6 entrées, cette dernière donne au deux fluides plus de surface de contact pour la convection, et réduit le parcours de la diffusion.

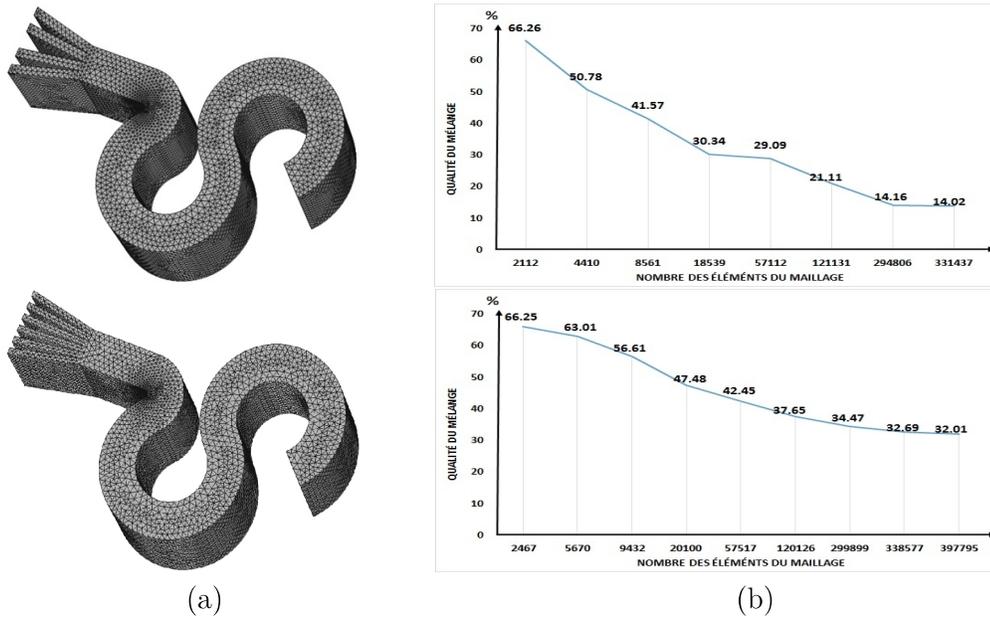
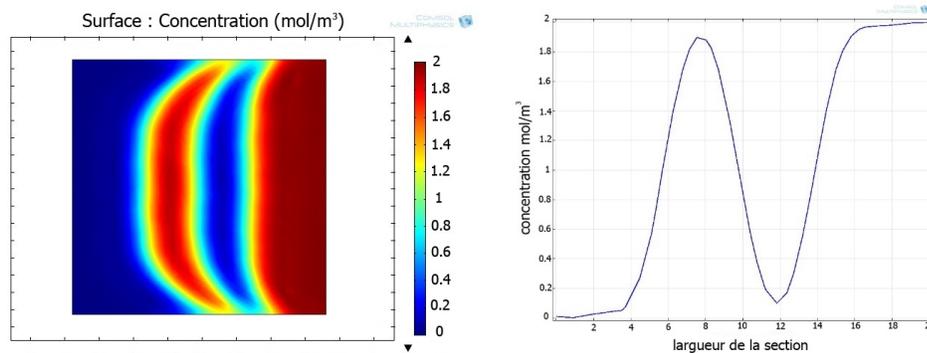
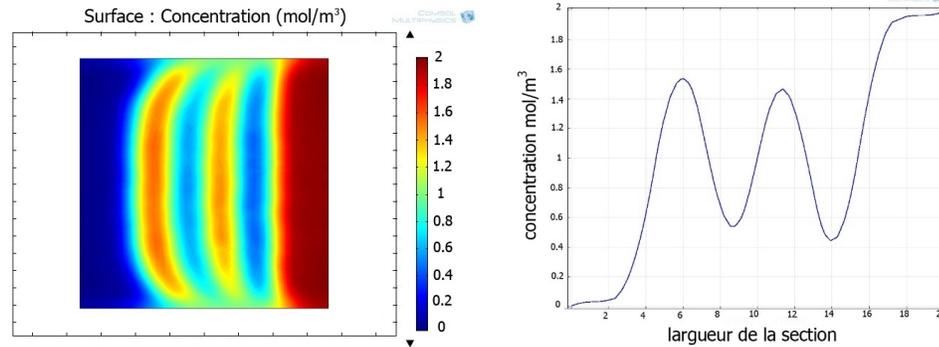


FIGURE 6.3 – (a)les deux géométries maillées (b)les courbes de dépendance du maillage des deux variantes d'entrée



La configuration avec 4 entrées

La comparaison montre clairement que la variante avec 6 entrées est nettement meilleure, elle sera utilisée dans les prochaines simulations.



La configuration avec 6 entrées

FIGURE 6.4 – les résultats de simulation d'un cycle de serpentin avec deux variantes d'entrée

### 6.3 Variation du rapport hauteur\largeur

Le rapport hauteur\largeur ( $Ra$ ) représente un facteur très important dans la conception d'un mélangeur microfluidique, pour illustrer l'influence directe de ce facteur sur la qualité du mélange, une simulation du processus de mélange a été faite avec différentes valeurs de ce facteur ( $\frac{2}{5}, 1, \frac{5}{2}$ ) tout en gardant la même surface de coupe du canal ( $1000\mu m^2$ ).

Les résultats montrent clairement que la configuration avec le plus grand facteur ( $\frac{5}{2}$ ) est meilleure car elle diminue le trajet de la diffusion et augmente la surface de contact entre les deux fluides, elle sera utilisée dans les configurations suivantes.

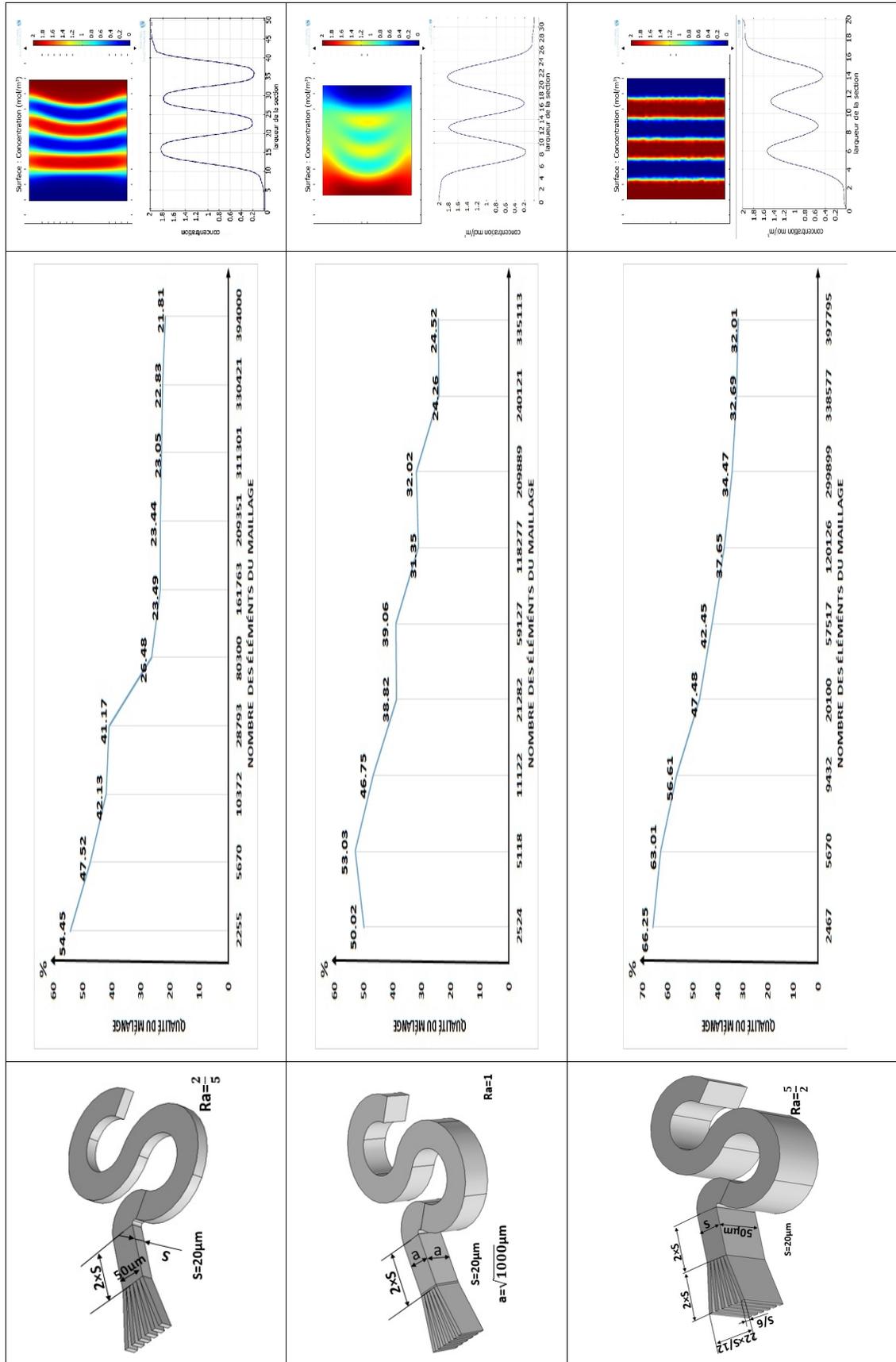


TABLE 6.1 – Tableau récapitulatif de la comparaison entre les différentes configurations de la section du canal

## 6.4 Serpentin 6 entrées simple

### 6.4.1 La conception

La (figure 6.5) schématise la géométrie d'un cycle du serpentin à 6 entrées simple, avec les conditions d'entrée. On a utilisé une alternance dans les entrées des deux fluides afin d'augmenter le nombre de surfaces de contact (fluide1/fluide2).

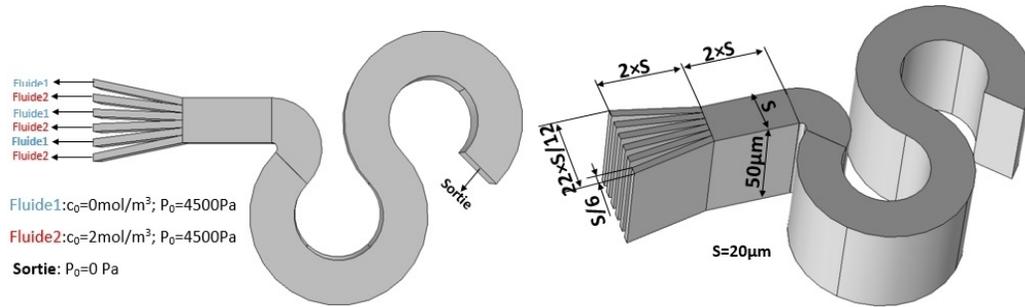


FIGURE 6.5 – schéma représentatif du serpentin 6 entrées simple

le Tableau[ 6.2] est un récapitulatif des paramètres de simulation, la configuration du maillage, ainsi que le temps nécessaire pour le calcul sur COMSOL 4.2a.

TABLE 6.2 – Détails de configuration de la simulation du serpentin 6 entrées simple

Serpentin 6 entrées simple		
Configuration des éléments du maillage	Type	tétrahédrique (calibre dynamique des fluides)
	Nombre	1005383
	Taille min	2.67 [ $\mu m$ ]
	Taille max	6.5 [ $\mu m$ ]
Configuration de Pression et Vitesse		P2+P1
Configuration de la concentration		Cubique
Modèle de couplage		[spf\fp1]
Coefficient de diffusion		$1^{-10} [m^2 \setminus s]$
Gradient de concentrations		2 [ $mol \setminus m^3$ ]
Gradient de pression		4500 [Pa]
Temps de calcul		12538 [s]

### 6.4.2 Le maillage

L'une des caractéristiques de la CFD, est la dépendance des résultats obtenues du maillage considéré. pour s'assurer de la cohérence des résultats une étude par-

métrique du maillage s'impose.

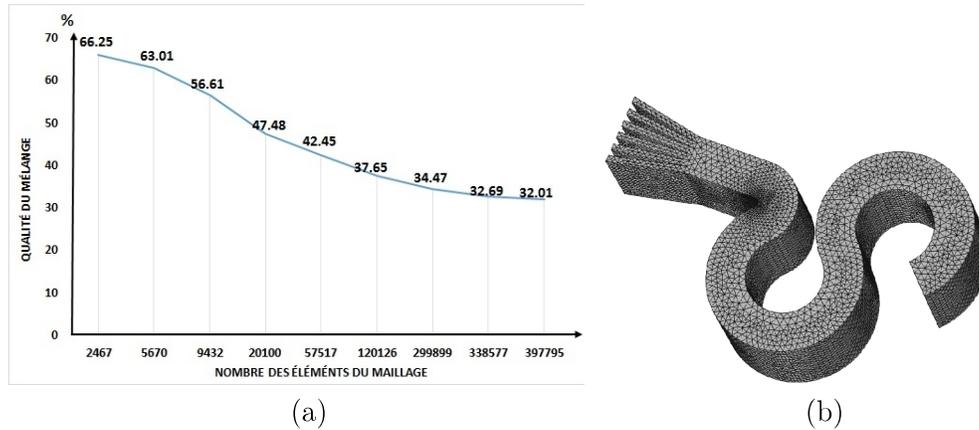


FIGURE 6.6 – (a) la sensibilité au maillage pour un serpentin 6 entrées simple, (b) géométrie maillée

La figure 6.6 résume l'étude du maillage d'un cycle du serpentin 6 entrées simple et montre une stabilité de la qualité du mélange au bout de 350000 éléments (noeuds).

Il est certain qu'un nombre d'éléments plus important donnera plus de précision dans les résultats, mais, compte tenu du temps de calcul un compromis doit être pris pour assurer le meilleur rapport temps\precision.

### 6.4.3 Les résultats

la configuration du serpentin 6 entrées simple nous a permis d'atteindre une qualité du mélange de 32% pour un seul cycle, on remarque clairement le chevauchement des lignes de courant traversant le virage avant l'entrée du cycle. ce genre de phénomène a une contribution efficace dans l'amélioration du mélange. il sera utilisé par la suite et on verra une amélioration de ce résultat (32%) dans les configurations suivantes en incluant des obstacles et de chevrons.

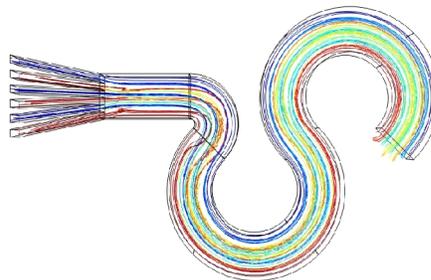


FIGURE 6.7 – les lignes de courants avec leurs concentrations pour un serpentin 6 entrées simple

Ensuite un serpentin composé de 20 cycles en série a été testé, la figure 6.8 illustre la qualité du mélange à travers les cycles.

Il est a noté qu'un Cov de 0.05, donc  $M_{quality} = 95\%$  assure une parfaite homogénéité du mélange.

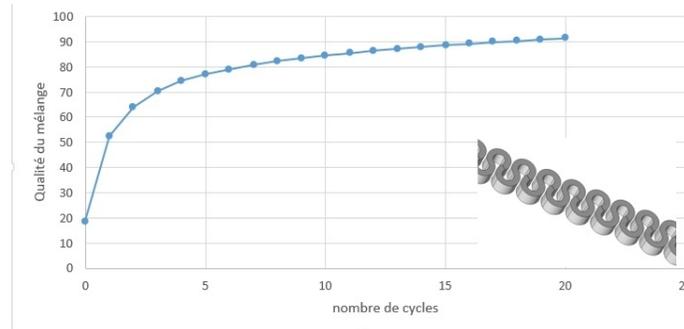
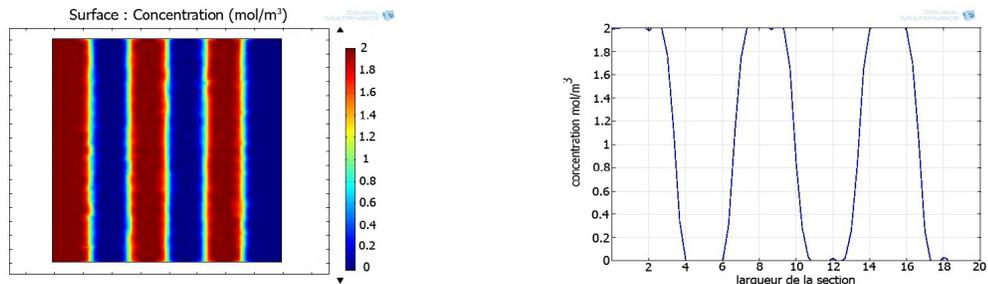
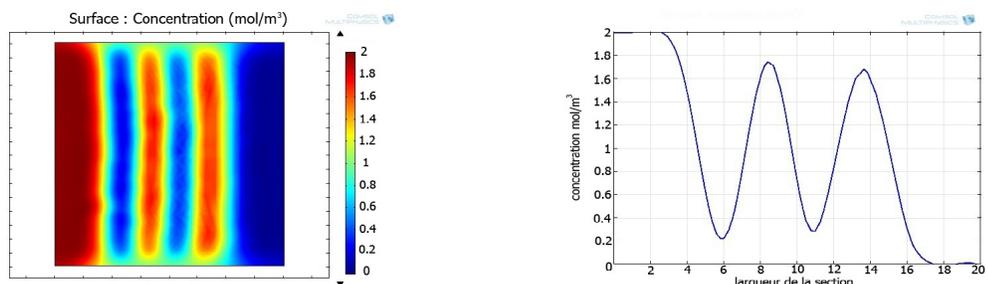


FIGURE 6.8 – la qualité du mélange en fonction du nombre de cycle pour une configuration de serpentin 6 entrées simple

Le serpentin 6 entrées simple en 20 cycles a donné un  $M_{quality} = 91.43\%$ , une analyse complète de la distribution de la concentration le long des cycles est illustrée ci-dessous dans la Figure 6.9.

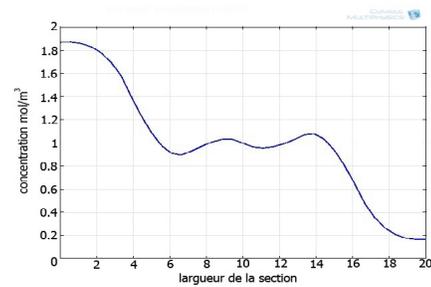
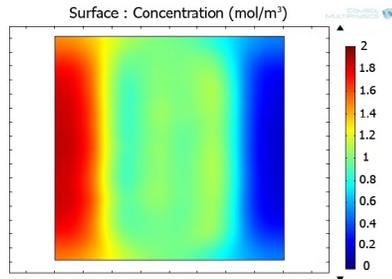


entrée du canal

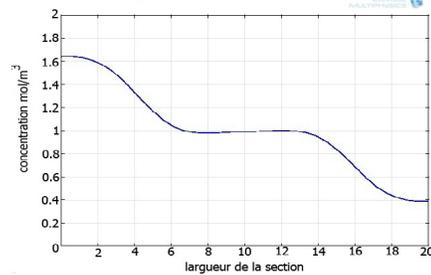
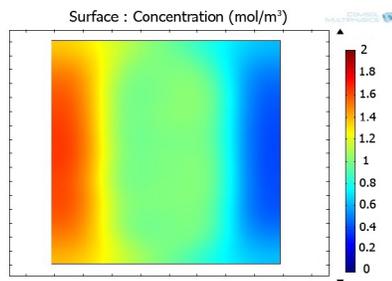


entrée du 1<sup>er</sup> cycle

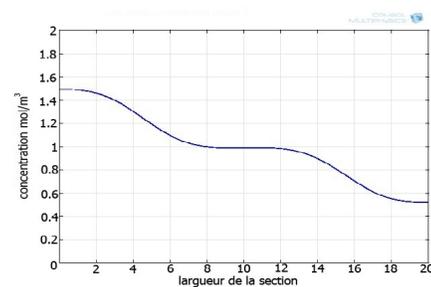
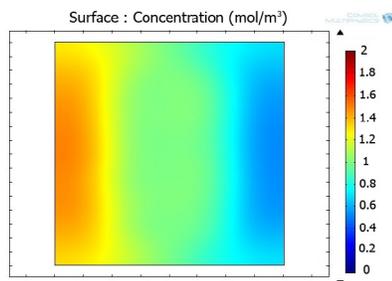
On remarque que même avant l'entrée du premier cycle du serpentin le mélange commence à s'effectuer surtout après que les deux fluides traversent le premier virage, cela est due au chevauchement des lignes de courants ce qui augmente les surfaces de contact entre les deux fluides donnant ainsi plus d'espace aussi bien à la diffusion qu'à la convection.



sortie du 1<sup>er</sup> cycle

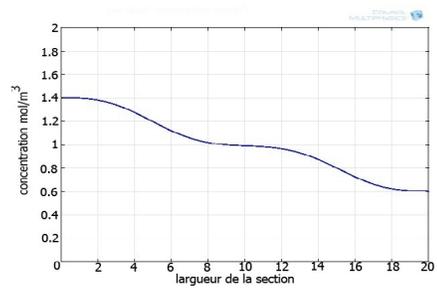
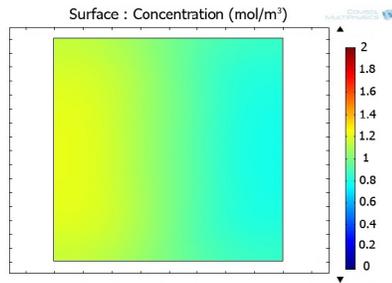


sortie du 2<sup>ème</sup> cycle

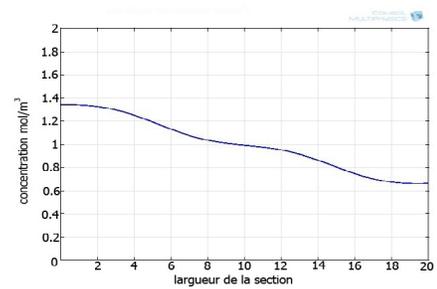
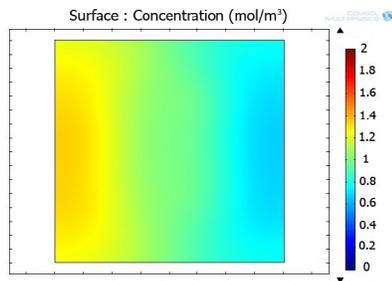


sortie du 3<sup>ème</sup> cycle

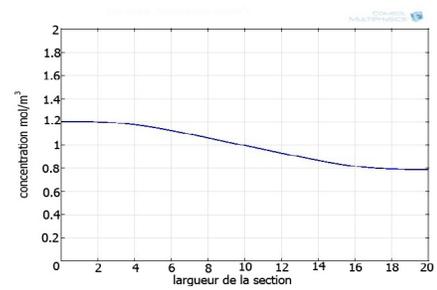
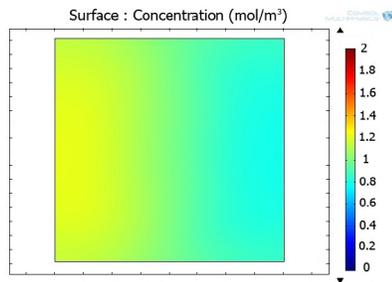
On remarque que le gradient de concentration tend à s'équilibrer au fur et à mesure que les deux fluides traversent les cycles,



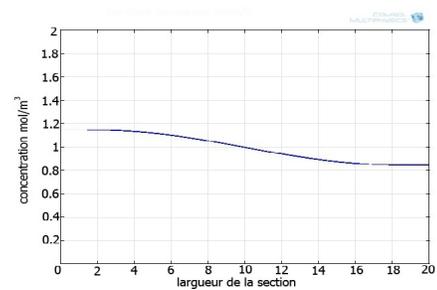
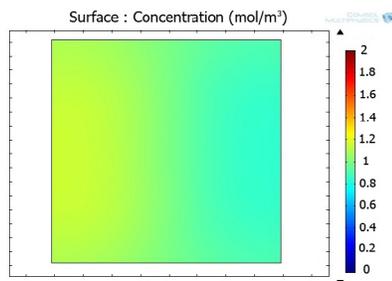
sortie du 4<sup>ème</sup> cycle



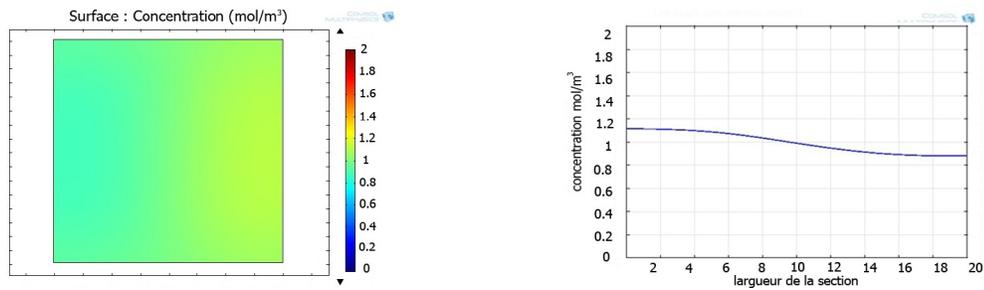
sortie du 5<sup>ème</sup> cycle



sortie du 10<sup>ème</sup> cycle



sortie du 15<sup>ème</sup> cycle



sortie du 20<sup>ème</sup> cycle

FIGURE 6.9 – Analyse de la distribution de la concentration à travers les cycles d’un serpentin 6 entrées simple

La configuration du serpentin avec 6 entrées simple n’arrive pas à réaliser un mélange parfait, et arrive seulement à 90% ce qui ne satisfait pas la condition d’homogénéité du mélange et peut conduire à des résultats erronés lors de l’analyse d’un échantillon du mélange.

Par conséquent des améliorations doivent être apportées afin d’améliorer le fonctionnement de notre mélangeur, nous expérimentons par la suite l’ajout d’obstacles de différentes formes afin d’améliorer la performance du mélangeur.

## 6.5 Serpentin 6 entrées avec obstacles triangulaires

### 6.5.1 La conception

La figure( 6.10) schématise la géométrie d'un cycle du serpentin à 6 entrées mené d'obstacle triangulaires, avec les conditions d'entrée. en plus de l'alternance dans les entrées des deux fluides afin d'augmenter le nombre des surfaces de contact (fluide1/fluide2), on a ajouté des obstacles de formes triangulaires dans le but d'augmenter les surfaces de brassage et de générer une composante de la vitesse dans la direction perpendiculaire à l'écoulement ce qui favorisera le chevauchement entre les lignes de courant des deux fluides améliorant ainsi le mélange.

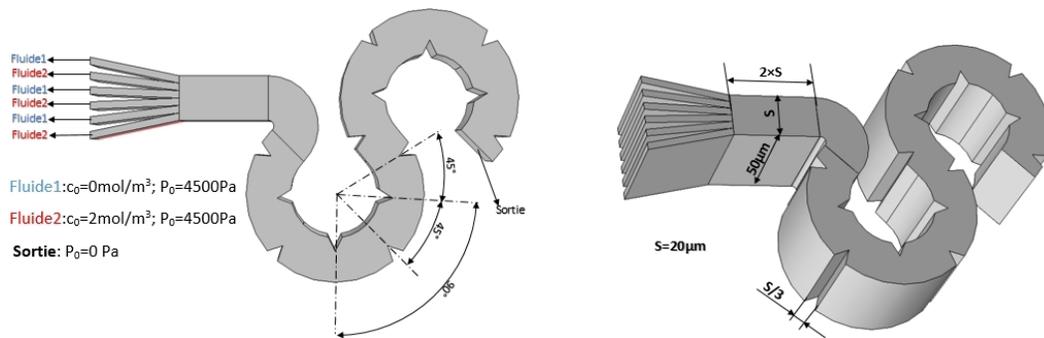


FIGURE 6.10 – schéma représentatif du serpentin 6 entrées avec obstacles triangulaires

le Tableau[ 6.3] résume les paramètres de simulation, la configuration du maillage, ainsi que le temps nécessaire pour le calcul sur COMSOL 4.2a.

TABLE 6.3 – Détails de configuration de la simulation du serpentin 6 entrées avec obstacles triangulaires

Serpentin 6 entrées avec obstacles triangulaires		
Configuration des éléments du maillage	Type	tétraédrique (calibre dynamique des fluides)
	Nombre	1014303
	Taille min	0.5 [ $\mu m$ ]
	Taille max	4.7 [ $\mu m$ ]
Configuration de Pression et Vitesse		P2+P1
Configuration de la concentration		Cubique
Modèle de couplage		[spf\fp1]
Coefficient de diffusion		$1^{-10}[m^2\backslash s]$
Gradient de concentrations		2 [ $mol \backslash m^3$ ]
Gradient de pression		4500 [Pa]
Temps de calcul		13464 [s]

### 6.5.2 Le maillage

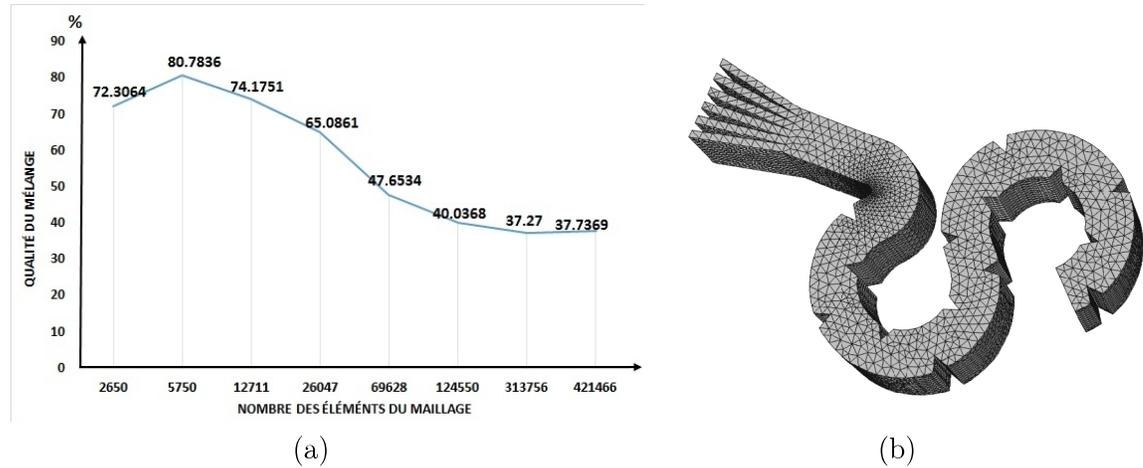


FIGURE 6.11 – (a) la sensibilité au maillage pour un serpentin 6 entrées avec obstacles triangulaires, (b) géométrie maillée

À raison de la complexité de la géométrie avec obstacles, la stabilisation des résultats requiert plus d'éléments que la configuration simple. On note une stabilité de la qualité du mélange au bout de 360000 éléments (noeuds), ce qui représente 10000 éléments de plus que la configuration simple, ces éléments serviront pour la compensation des obstacles triangulaires.

### 6.5.3 Les résultats

La configuration du serpentin 6 entrées avec obstacles triangulaires nous a permis d'atteindre une qualité du mélange de 37.73% pour un seul cycle, ce qui représente +5% d'amélioration par rapport à la configuration simple, on remarque clairement le chevauchement des lignes de courant traversant les obstacles triangulaires améliorant ainsi le mélange.

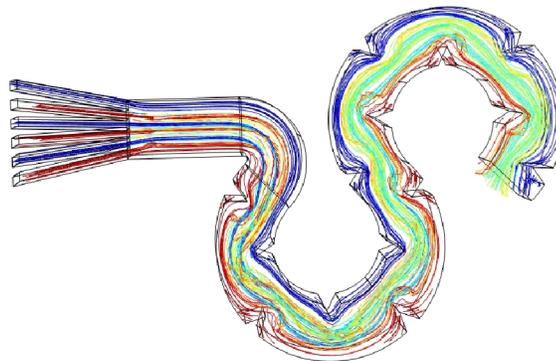


FIGURE 6.12 – les lignes de courants avec leurs concentrations pour un serpentin 6 entrées avec obstacles triangulaires

Ensuite une études d'une série de 20 cycles avec obstacles triangulaires a été réalisée, la figure 6.23 montre l'amélioration de la qualité du mélange à travers les cycles.

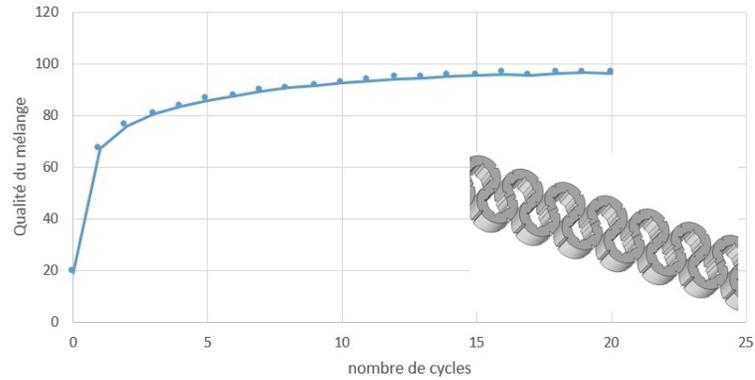
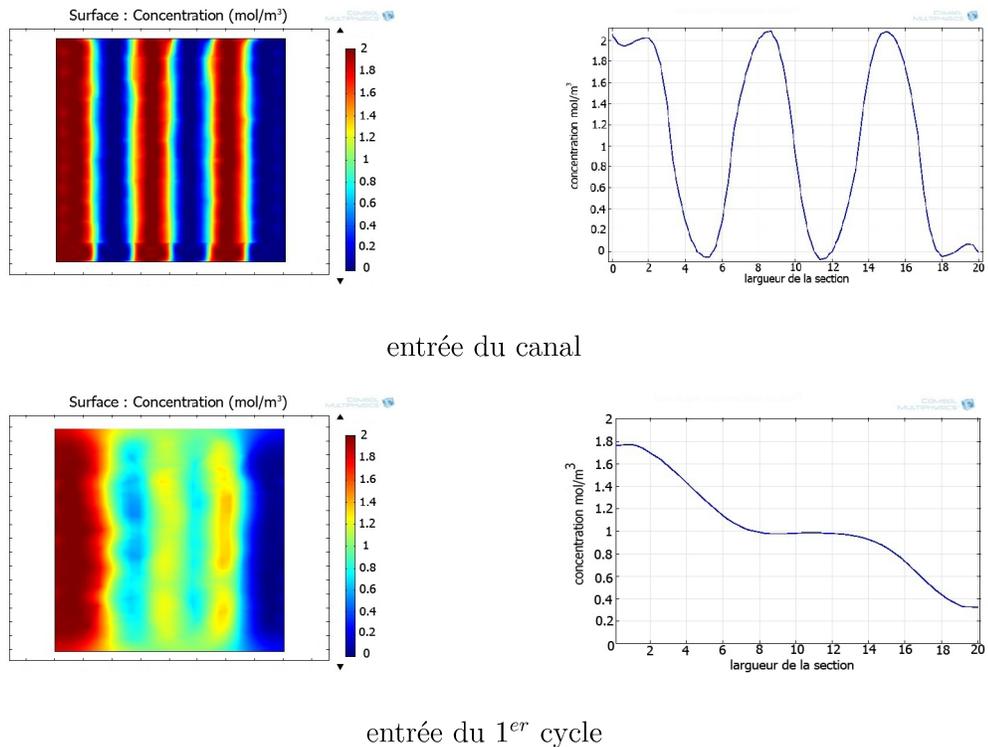
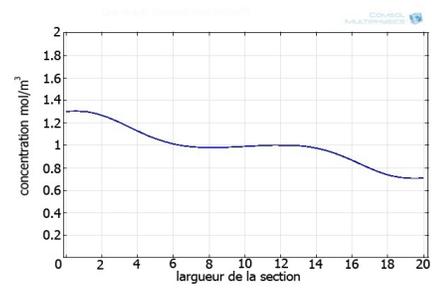
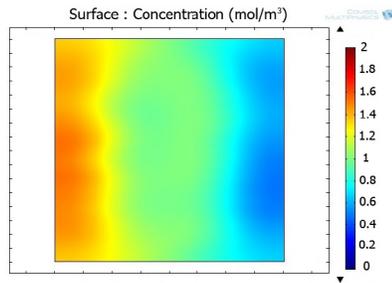
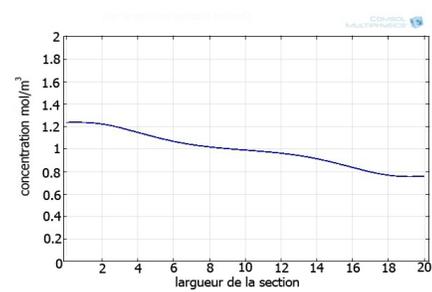
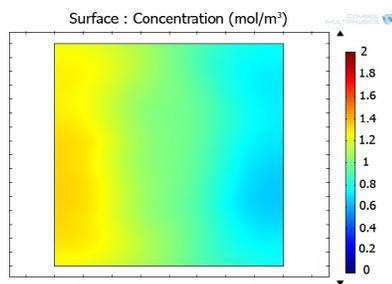
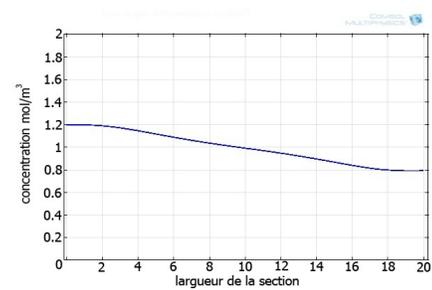
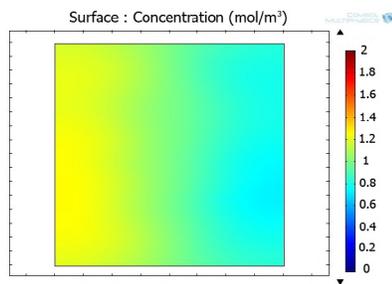
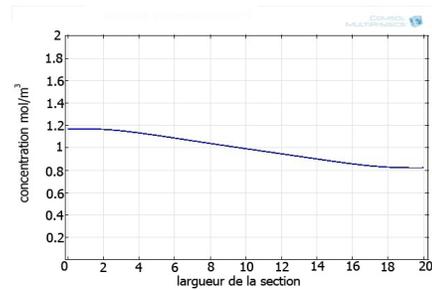
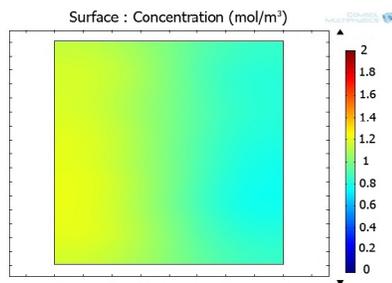


FIGURE 6.13 – la qualité du mélange en fonction du nombre de cycle pour une configuration de serpentin 6 entrées avec obstacles triangulaires

le serpentin 6 entrées avec obstacles triangulaires a donné un  $M_{quality} = 96.24\%$ , et atteint le mélange parfait ( $M_{quality} = 95\%$ ) au bout de **14 cycles**. la disposition asymétrique des obstacles modifie les sens de circulation et force les fluides a fusionner et a créer un transport de masse transversale.



sortie du 1<sup>er</sup> cyclesortie du 2<sup>ème</sup> cyclesortie du 3<sup>ème</sup> cyclesortie du 4<sup>ème</sup> cycle

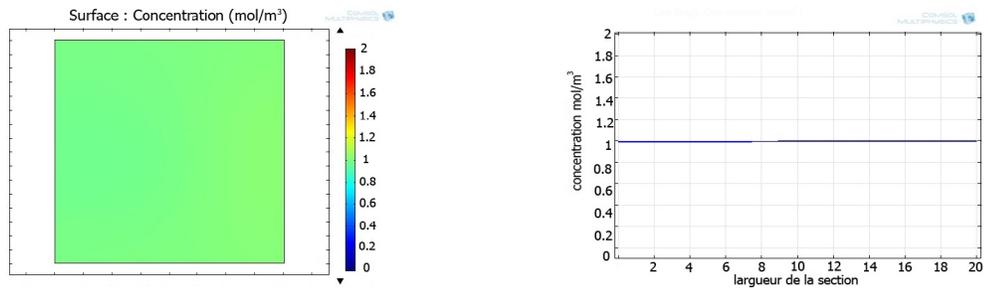
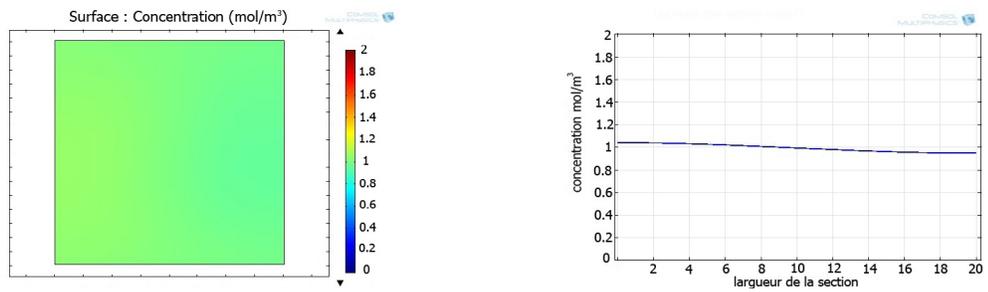
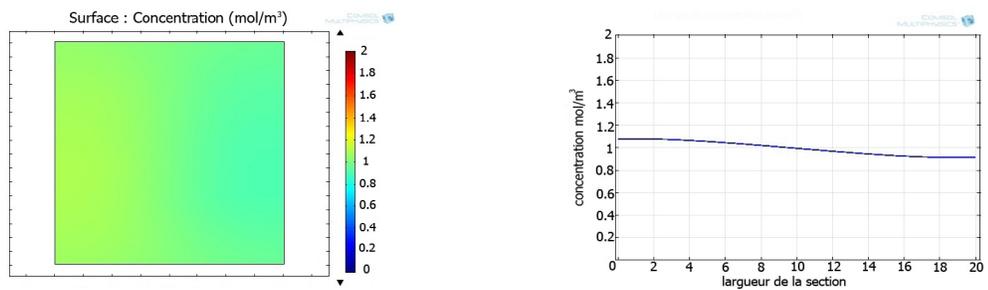
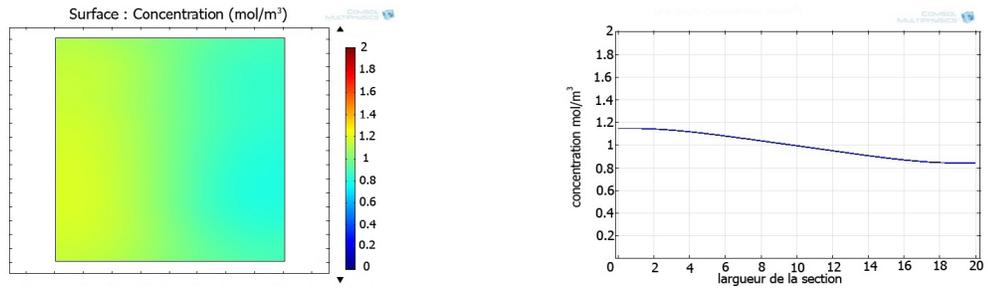


FIGURE 6.14 – Analyse de la distribution de la concentration à travers les cycles d'un serpentin 6 entrées avec obstacles triangulaires

## 6.6 Serpentin 6 entrées avec obstacles circulaires

### 6.6.1 La conception

La figure( 6.15) schématise la géométrie avec les conditions d'entrées d'un cycle du serpentin à 6 entrées avec obstacles circulaires. Cette géométrie est similaire à la précédente, sauf que dans cette configuration des obstacles de formes circulaire ont été utilisés, tout en gardant la même distance de pénétration des obstacles dans le canal ( $s/3$ ).

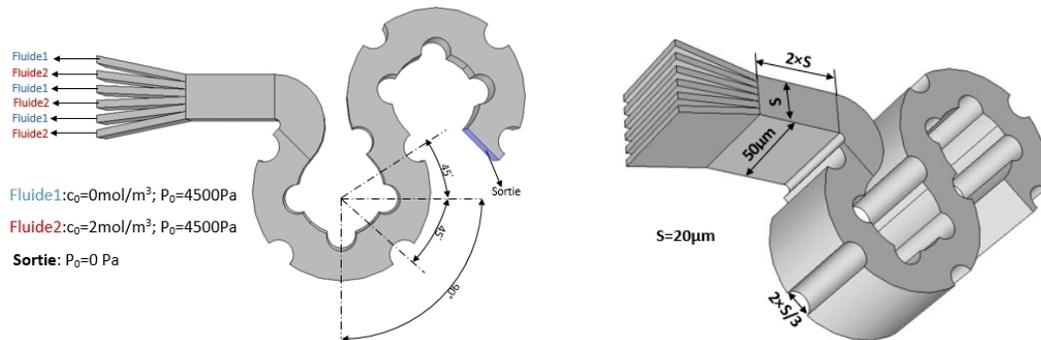


FIGURE 6.15 – schéma représentatif du serpentin 6 entrées avec obstacles circulaires

le Tableau [ 6.4] résume les paramètres de simulation, la configuration du maillage, ainsi que le temps nécessaire pour le calcul sur COMSOL 4.2a.

TABLE 6.4 – Détails de configuration de la simulation du serpentin 6 entrées avec obstacles circulaires

Serpentin 6 entrées avec obstacles circulaires		
Configuration des éléments du maillage	Type	tétrahédrique (calibre dynamique des fluides)
	Nombre	1023876
	Taille min	3.72 [ $\mu m$ ]
	Taille max	12.4 [ $\mu m$ ]
Configuration de Pression et Vitesse		P2+P1
Configuration de la concentration		Cubique
Modèle de couplage		[spf\fp1]
Coefficient de diffusion		$1^{-10}[m^2 \ s]$
Gradient de concentrations		2 [ $mol \ m^3$ ]
Gradient de pression		4500 [Pa]
Temps de calcul		14542 [s]

### 6.6.2 Le maillage

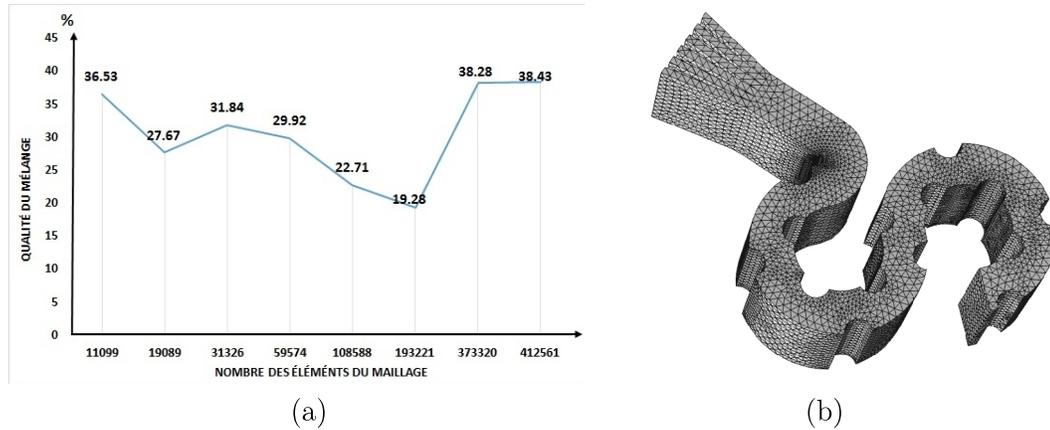


FIGURE 6.16 – (a) la sensibilité au maillage pour un serpentin 6 entrées avec obstacles circulaires, (b) géométrie maillée

On note une stabilité de la qualité du mélange au bout de 380000 éléments (noeuds), ce qui représente 30000 éléments de plus que la configuration simple, et 15000 éléments de plus que celle avec obstacle triangulaires ceci peut être expliqué par le fait que les courbes des obstacles circulaires sont plus difficiles à compenser que celles des triangulaires.

### 6.6.3 Les résultats

La configuration du serpentin 6 entrées avec obstacles circulaires nous a permis d'atteindre une qualité du mélange de 38.43% pour un seul cycle, ce qui représente +6% d'amélioration par rapport à la configuration simple, et peut même être considérée meilleure que celle avec les obstacles triangulaires comme les obstacles circulaires occupent plus de volume et sont plus courbés que les triangulaires et par conséquent elles dévient mieux les lignes de courant améliorant ainsi le mélange.

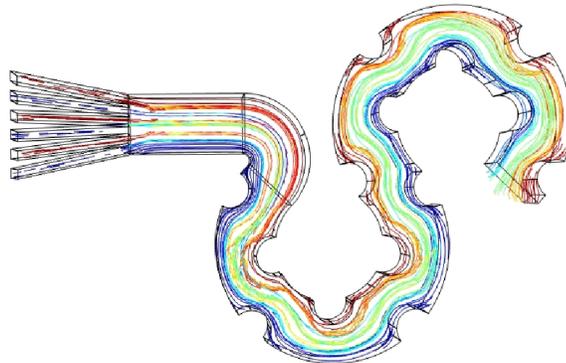


FIGURE 6.17 – les lignes de courants avec leurs concentrations pour un serpentin 6 entrées avec obstacles circulaires

Ensuite une études d'une série de 20 cycles avec des obstacles circulaires a été réalisée, la figure 6.18 montre l'amélioration de la qualité du mélange à travers les cycles.

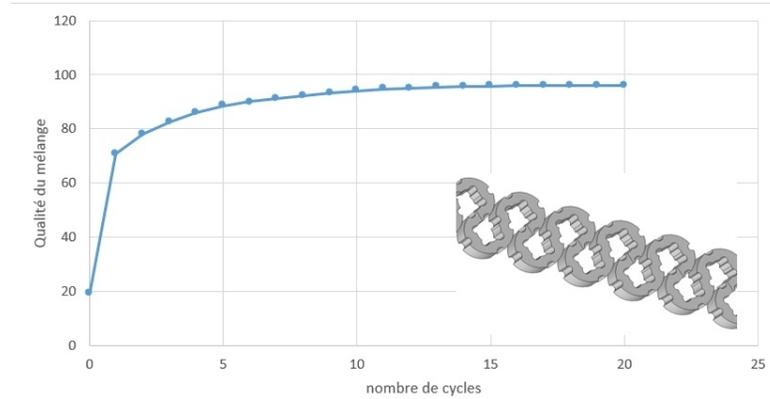
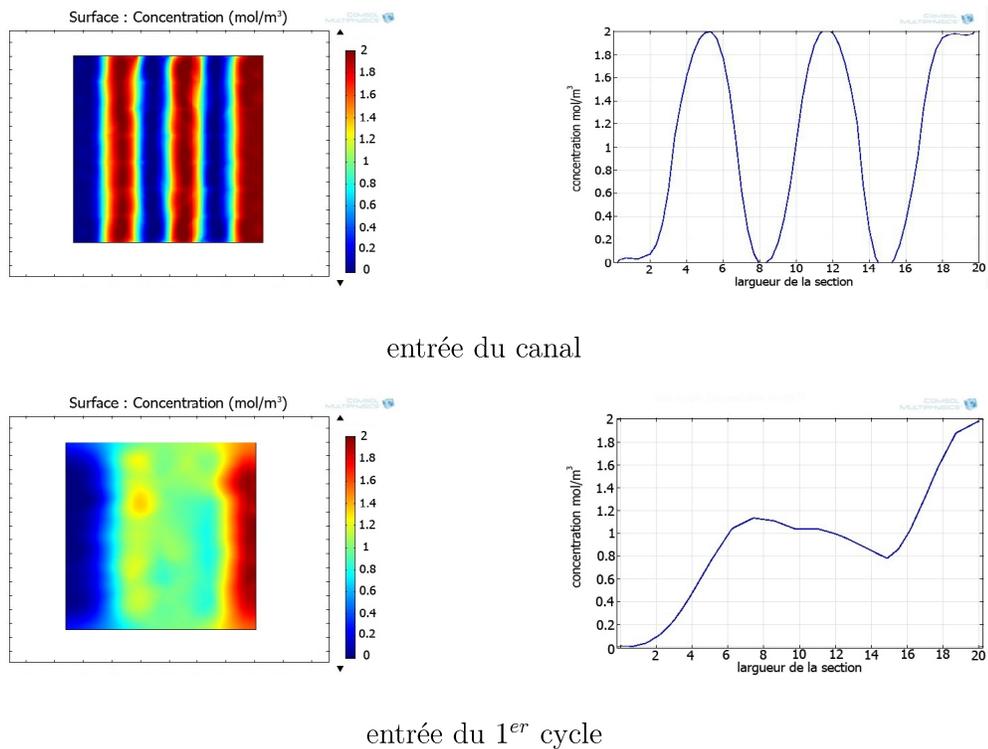
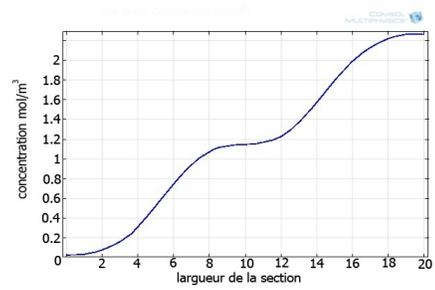
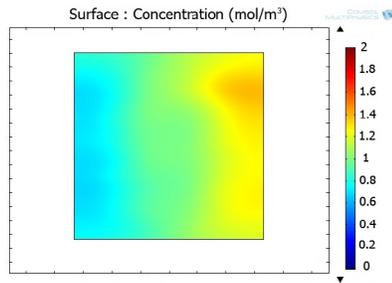
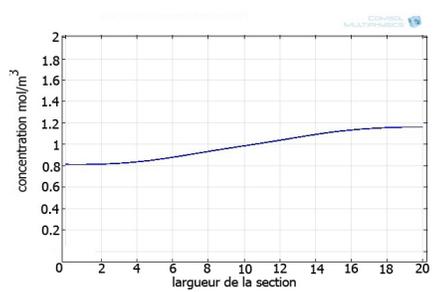
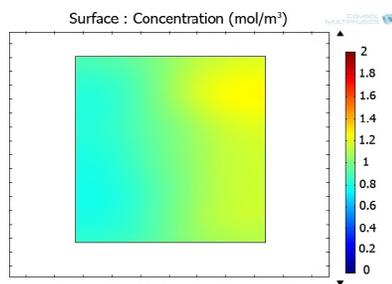
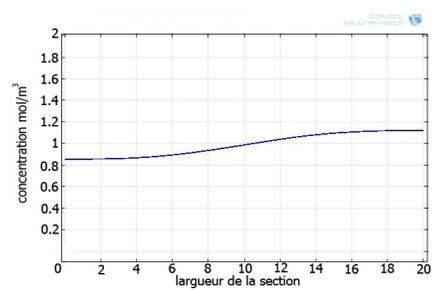
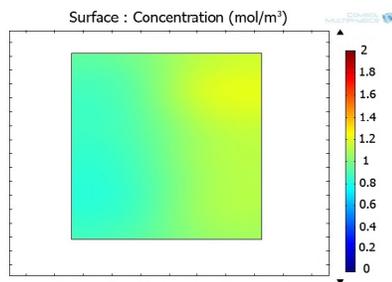
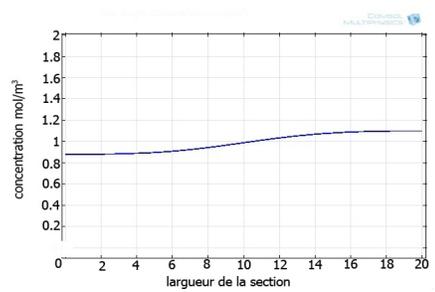
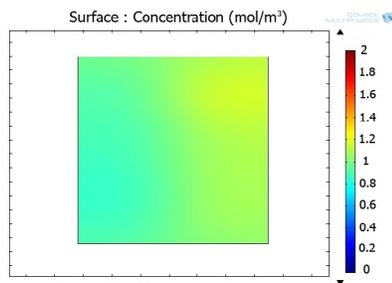


FIGURE 6.18 – la qualité du mélange en fonction du nombre de cycle pour une configuration de serpentin 6 entrées avec obstacles circulaires

Au bout de 20 cycles en série on obtient une qualité du mélange  $M_{quality} = 96.15\%$ , l'homogénéité parfaite de mélange ( $M_{quality} = 95\%$ ) est atteinte au bout de **12 cycles**, ce qui représente 2cycles d'amélioration. une analyse complète de la distribution de la concentration le long des cycles est illustrée dans la Figure 6.19.



sortie du 1<sup>er</sup> cyclesortie du 2<sup>ème</sup> cyclesortie du 3<sup>ème</sup> cyclesortie du 4<sup>ème</sup> cycle

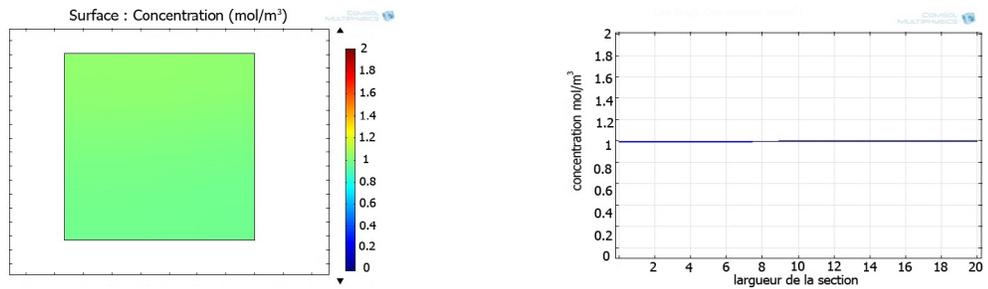
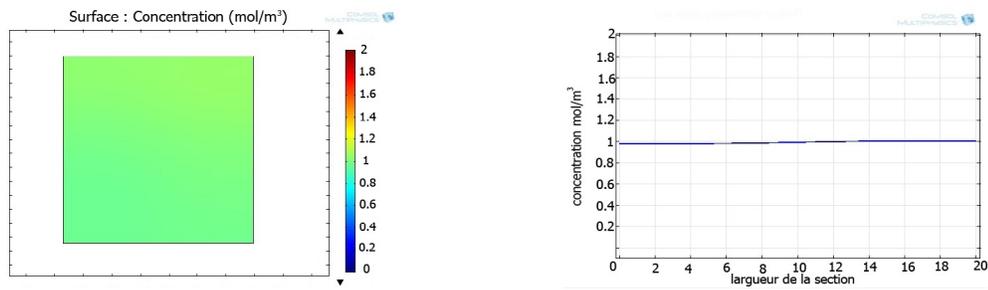
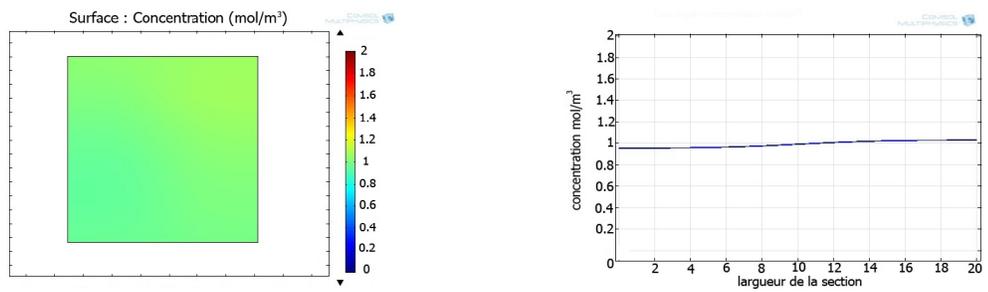
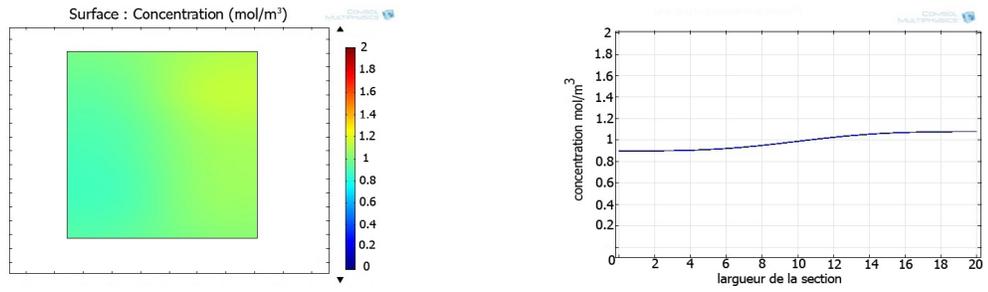


FIGURE 6.19 – Analyse de la distribution de la concentration à travers les cycles d'un serpentin 6 entrées avec obstacles circulaires

## 6.7 Serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles triangulaires

### 6.7.1 La conception

La figure( 6.20) schématise la géométrie d'un cycle du serpentin à 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles triangulaires, avec les conditions d'entrée. la même géométrie que celle du serpentin avec des obstacles triangulaire à laquelle on a ajouté des chevrons obliques en bas du canal qui permettront de dévier les lignes de courant vers le haut.

Les chevrons ont été conçus d'une façon asymétrique et ont été alternés par rapport à l'axe du canal pour diviser l'écoulement à chaque fois que ce dernier traverse un cycle de chevron.

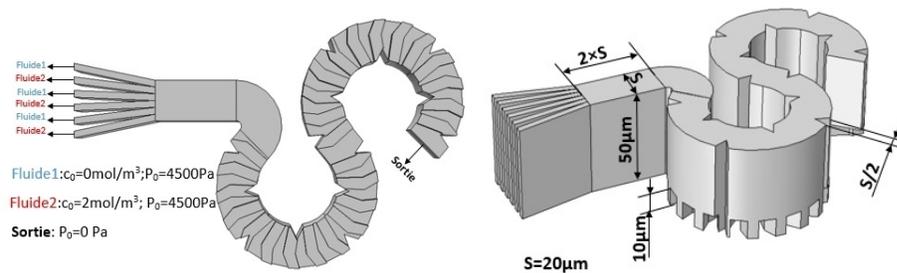


FIGURE 6.20 – schéma représentatif de la géométrie du serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles triangulaires

le Tableau[ 6.5] résume les paramètres de simulation, la configuration du maillage, ainsi que le temps nécessaire pour le calcul sur COMSOL 4.2a.

TABLE 6.5 – Détails de configuration de la simulation du serpentin avec chevrons obliques et obstacles triangulaires

Serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles triangulaires		
Configuration des éléments du maillage	Type	tétrahédrique (calibre dynamique des fluides)
	Nombre	1046433
	Taille min	5.06 [ $\mu m$ ]
	Taille max	16.4 [ $\mu m$ ]
Configuration de Pression et Vitesse		P2+P1
Configuration de la concentration		Cubique
Modèle de couplage		[spf\fp1]
Coefficient de diffusion		$1^{-10} [m^2 \setminus s]$
Gradient de concentrations		2 [ $mol \setminus m^3$ ]
Gradient de pression		4500 [Pa]
Temps de calcul		16346 [s]

### 6.7.2 Le maillage

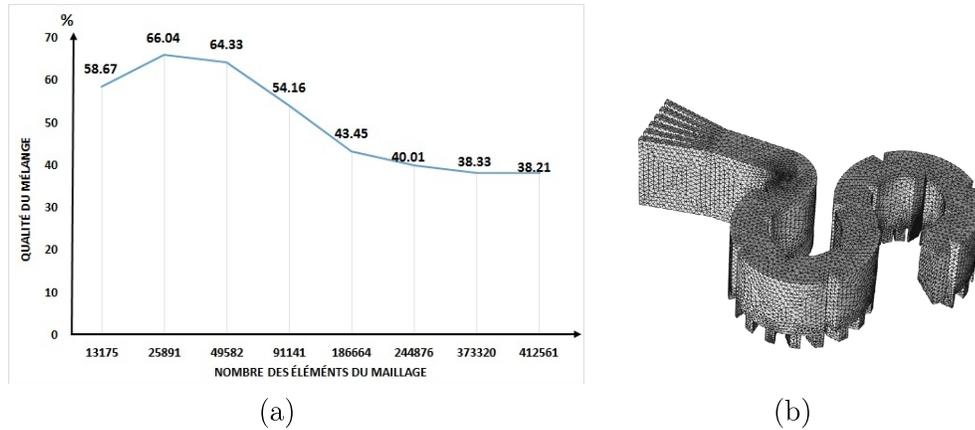


FIGURE 6.21 – (a) la sensibilité au maillage pour un serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles triangulaires, (b) géométrie maillée

L'ajout de chevrons à la géométrie oblige que la stabilisation des résultats requiert plus d'éléments que la configuration avec obstacles triangulaires simples. On note une stabilité de la qualité du mélange au bout de 380000 éléments (noeuds), ce qui représente 20000 éléments de plus pour mailler les chevrons en bas du canal.

### 6.7.3 Les résultats

La configuration du serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles triangulaires a donné une qualité du mélange de 38.21% pour un seul cycle, ce qui représente +6% d'amélioration par rapport à la configuration simple, et presque 1% par rapport à celle sans chevrons, l'amélioration apportée par les chevrons apparaîtra nettement au bout de quelques cycles.

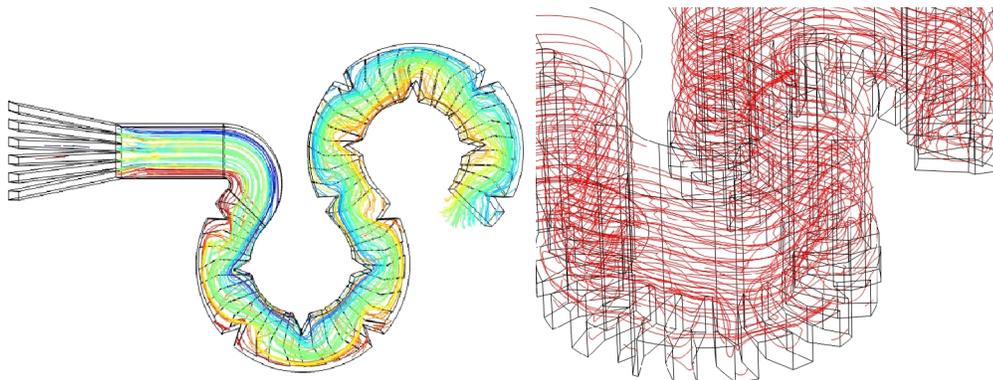


FIGURE 6.22 – les lignes de courants avec leurs concentrations pour un serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles triangulaires

## 6.7. Serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles triangulaires 73

Ensuite une études d'une série de 20 cycles avec obstacles triangulaires a été réalisée, la figure 6.23 montre l'amélioration de la qualité du mélange à travers les cycles.

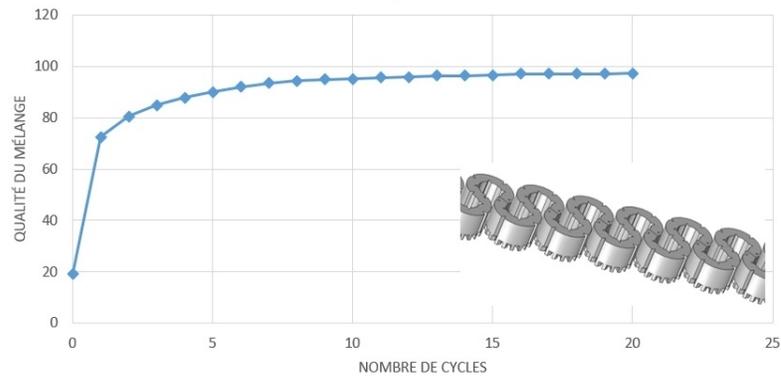
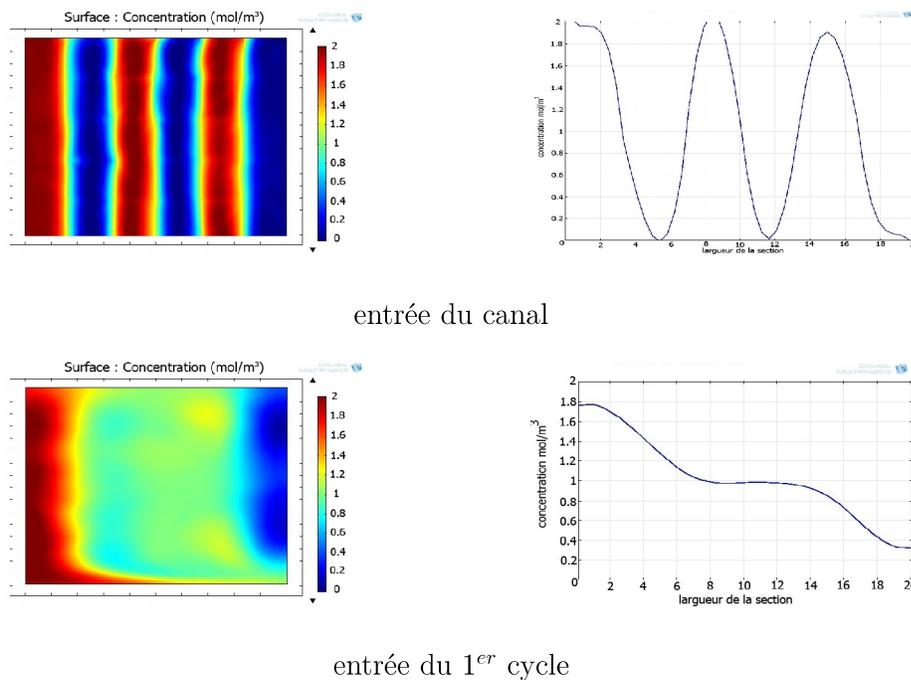
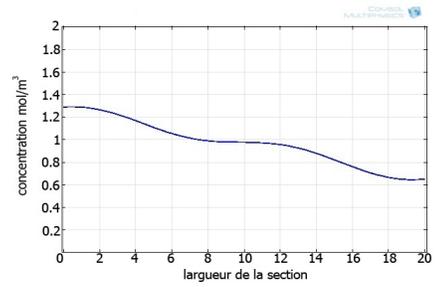
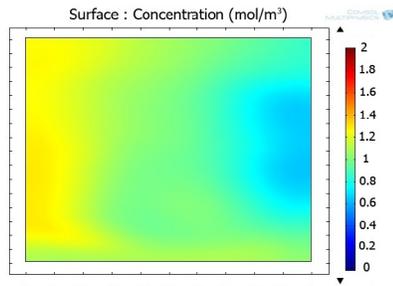


FIGURE 6.23 – la qualité du mélange en fonction du nombre de cycle pour une configuration de serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles triangulaires

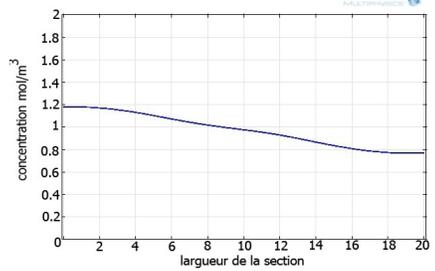
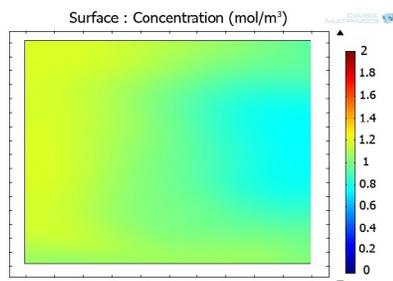
la configuration avec chevrons en 20 cycles a donné un  $M_{quality} = 97.25\%$ , et atteint le mélange parfait ( $M_{quality} = 95\%$ ) au bout de **10 cycles** ce qui représente **4 cycles** de moins que celle sans chevrons. une analyse complète de la distribution de la concentration le long des cycles est illustrée dans la Figure 6.24.



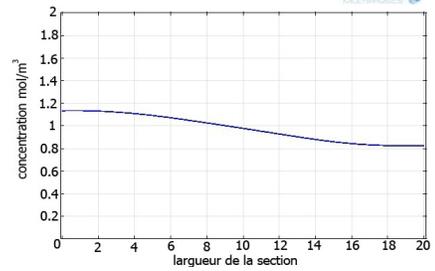
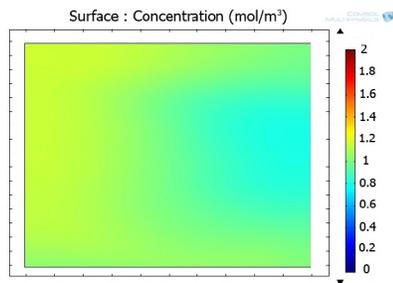
## 6.7. Serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles triangulaires 74



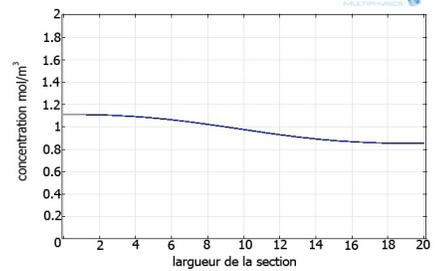
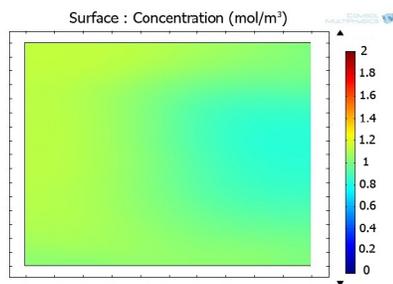
sortie du 1<sup>er</sup> cycle



sortie du 2<sup>ème</sup> cycle



sortie du 3<sup>ème</sup> cycle



sortie du 4<sup>ème</sup> cycle

## 6.7. Serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles triangulaires 75

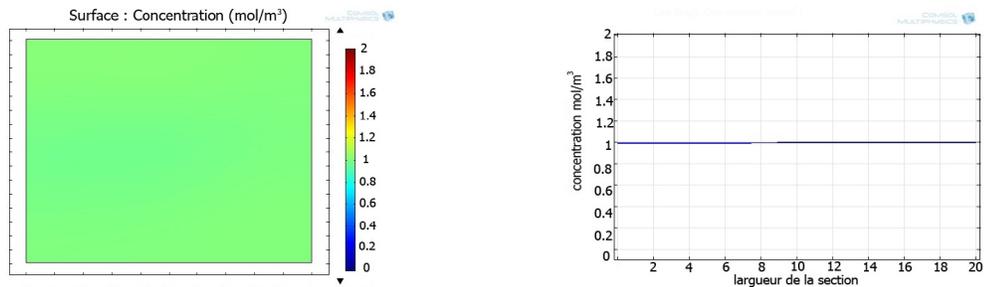
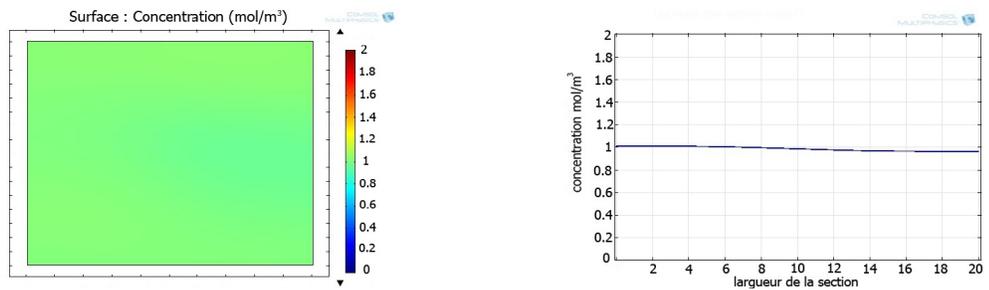
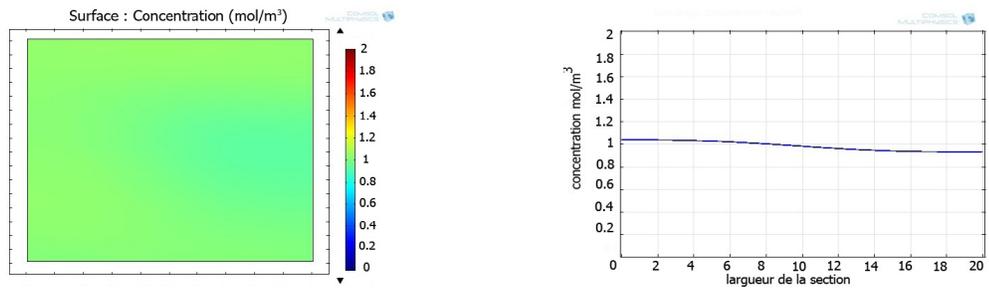
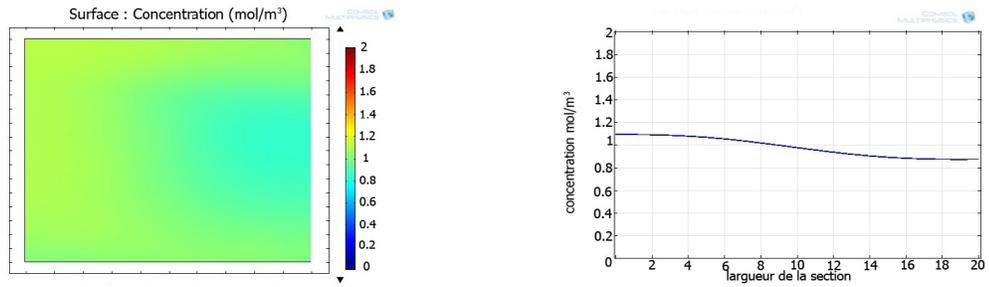


FIGURE 6.24 – Analyse de la distribution de la concentration à travers les cycles d'un serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles triangulaires

## 6.8 Serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles circulaires

### 6.8.1 La conception

La figure( 6.25) schématise la géométrie d'un cycle du serpentin à 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles circulaires, la dimension des chevrons est de  $0.2 \times h$ [8].

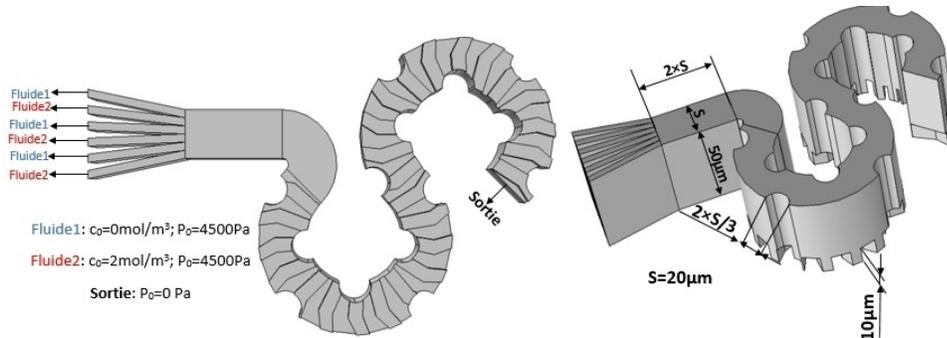


FIGURE 6.25 – schéma représentatif du serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles circulaires

La figure 6.26 représente des images expérimentales illustrant l'intérêt des chevrons dans la création de courant secondaires perpendiculairement à la direction de l'écoulement.

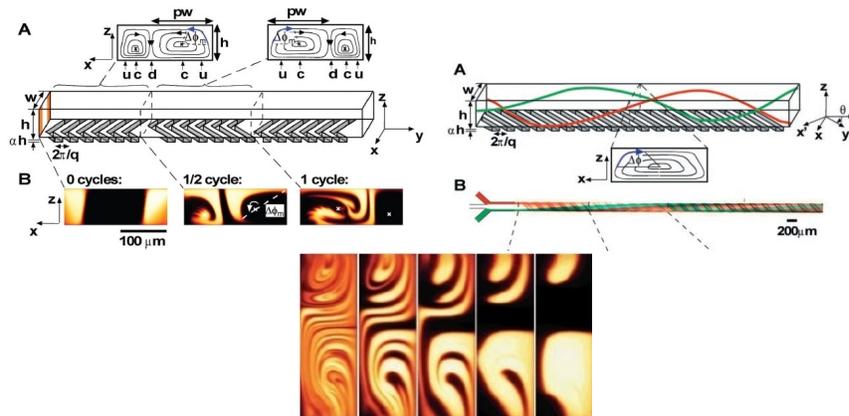


FIGURE 6.26 – schéma d'un canal de mélangeur avec chevrons asymétriques[8]

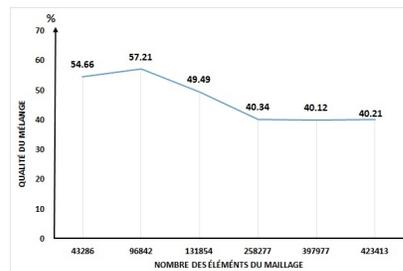
Les chevrons obliques en bas du canal peuvent être fabriqués facilement en utilisant les méthodes lithographique connues dans la microfluidique. on note que la combinaison des obstacles circulaires avec les chevrons obliques peut engendrer des pertes supplémentaire de pression le long du mélangeur, par conséquent un compromis doit être pris entre qualité de mélange et exigence du mélangeur en terme de pression. les différentes valeurs de pertes de pression sont présentés dans la comparaison des résultats(section6.9).

Le Tableau[ 6.6] résume les paramètres de simulation, la configuration du maillage, ainsi que le temps nécessaire pour le calcul sur COMSOL 4.2a.

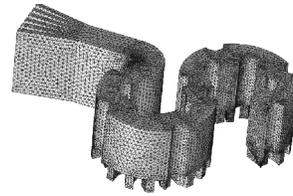
TABLE 6.6 – Détails de configuration de la simulation du serpentin avec chevrons obliques et obstacles circulaires

Serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles circulaires		
Configuration des éléments du maillage	Type	tétrahédrique (calibre dynamique des fluides)
	Nombre	1108876
	Taille min	6.43 [ $\mu m$ ]
	Taille max	25.7 [ $\mu m$ ]
Configuration de Pression et Vitesse		P2+P1
Configuration de la concentration		Cubique
Modèle de couplage		[spf\fp1]
Coefficient de diffusion		$1^{-10} [m^2 \setminus s]$
Gradient de concentrations		2 [ $mol \setminus m^3$ ]
Gradient de pression		4500 [Pa]
Temps de calcul		18463 [s]

### 6.8.2 Le maillage



(a)



(b)

FIGURE 6.27 – (a) la sensibilité au maillage pour un serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles circulaires, (b) géométrie maillée

La courbe de sensibilité des résultats au maillage présente une stabilité des résultats au bout de 400000 éléments de maillage sur une valeur d'environ 40% de mélange effectué, 2% de plus que la configuration triangulaire et 8% de plus que le serpentin simple pour un seul cycle de mélange.

### 6.8.3 Les résultats

La figure 6.28 montre le résultat de la simulation d'un cycle de la configuration

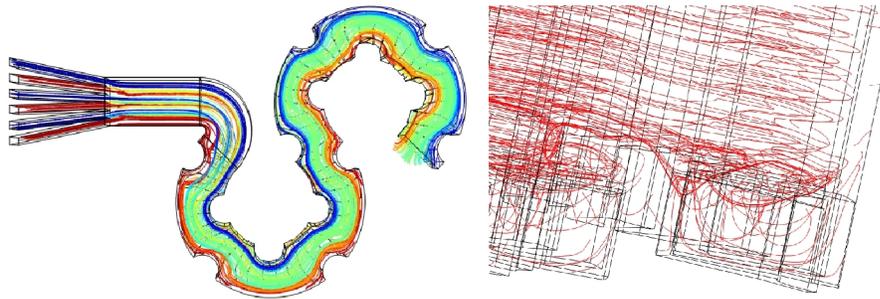


FIGURE 6.28 – Les lignes de courants avec leurs concentrations pour un serpentin avec chevrons obliques et obstacles circulaires

Le résultat des lignes de courant montrent clairement l'effet des chevrons dans la création de courants secondaires verticales, ainsi que le chevauchement créé par les obstacles circulaires.

Ensuite une simulation de 20 cycles en série a été faite, le résultat ( 6.29) montre que le mélangeur atteint une valeur de 98.58% à la fin des 20cycles et arrive à une homogénéité parfaite au bout de **10cycles**.

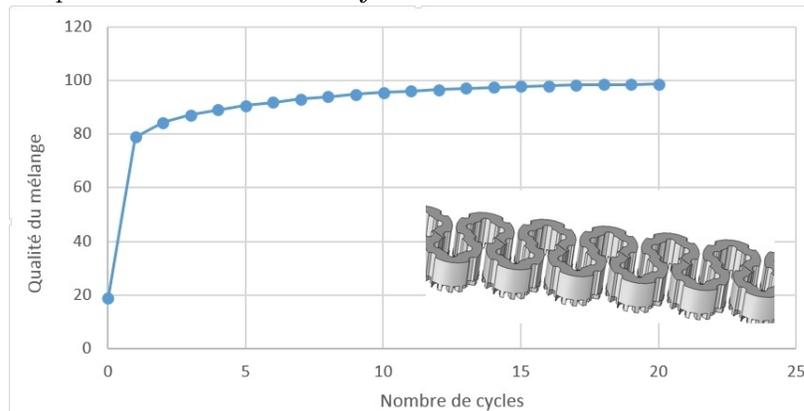
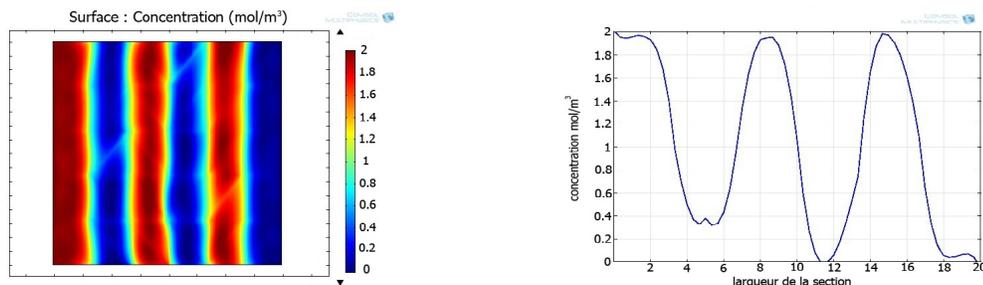
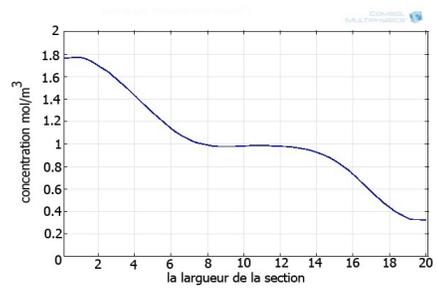
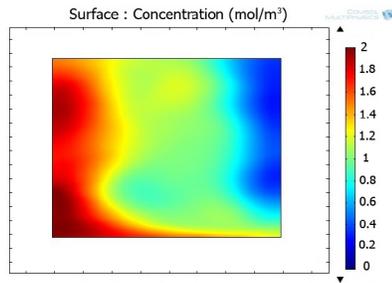


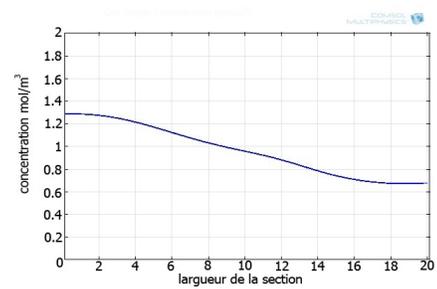
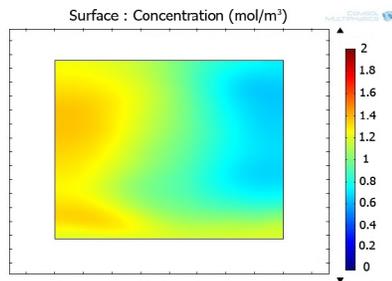
FIGURE 6.29 – la qualité du mélange en fonction du nombre de cycle pour une configuration de serpentin 6 entrée avec chevrons obliques et obstacles circulaires



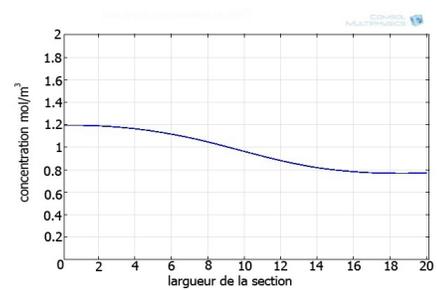
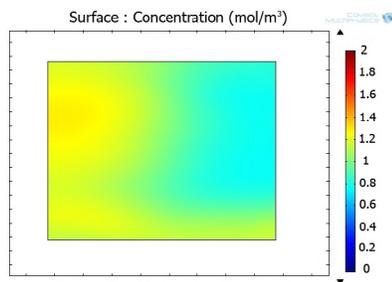
entrée du canal



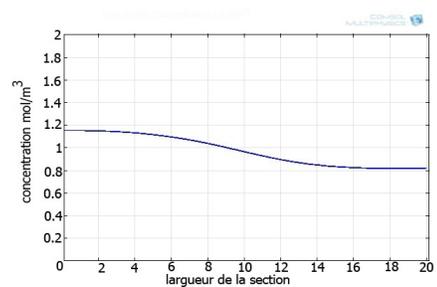
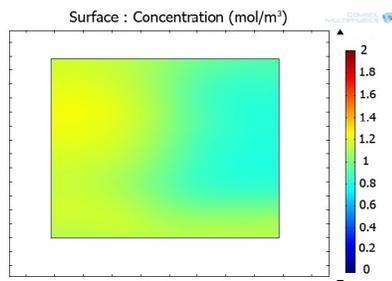
entrée du 1<sup>er</sup> cycle



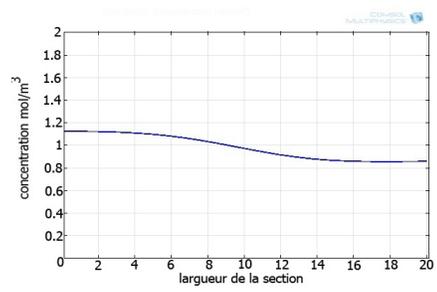
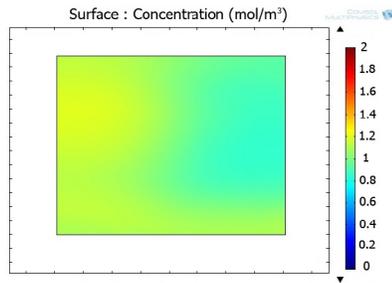
sortie du 1<sup>er</sup> cycle



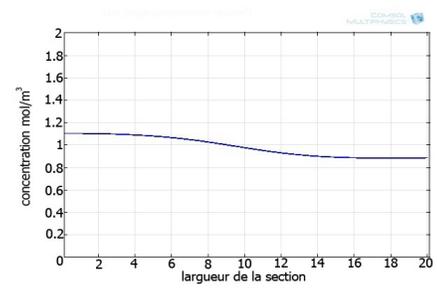
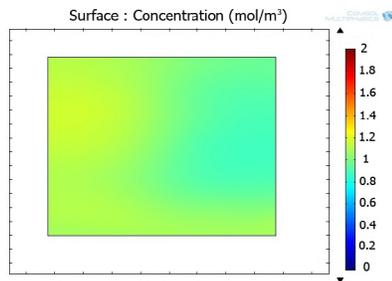
sortie du 2<sup>ème</sup> cycle



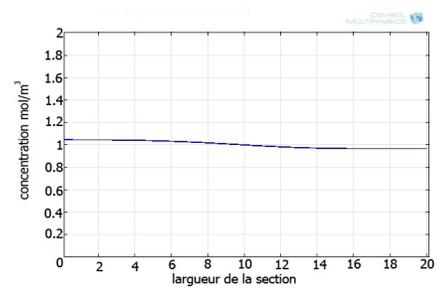
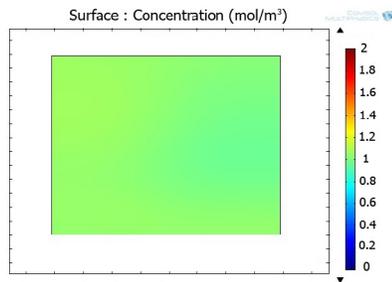
sortie du 3<sup>ème</sup> cycle



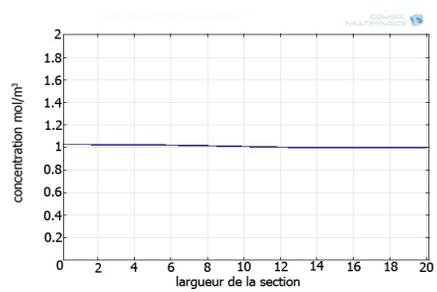
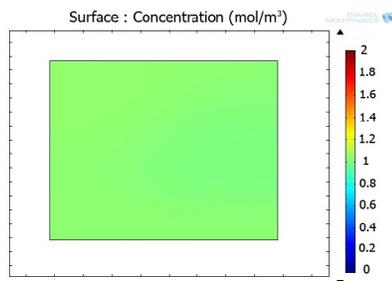
sortie du 4<sup>ème</sup> cycle



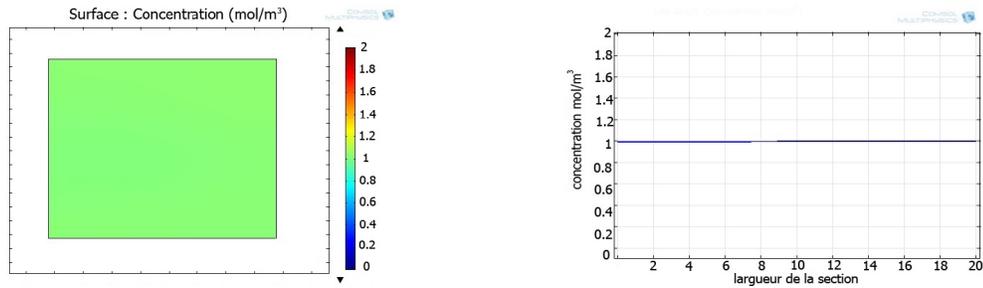
sortie du 5<sup>ème</sup> cycle



sortie du 10<sup>ème</sup> cycle



sortie du 15<sup>ème</sup> cycle



sortie du 20<sup>ème</sup> cycle

FIGURE 6.30 – Analyse de la distribution de la concentration à travers les cycles d’un serpentin 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles circulaires

## 6.9 Comparaison des différentes configurations

La figure( 6.32) résume les résultats des différentes simulations effectuées, on peut considérer que la configuration du serpentin à 6 entrées avec chevrons obliques et obstacles circulaires a donné les meilleurs résultats lors de la simulation.

un autre paramètre qu’il faut prendre en compte est la perte de charge dans le mélangeur, le théorème de Bernoulli généralisé a été utilisé, la figure 6.31 montre les résultats obtenus en  $kPa$ , on note que les mélangeurs avec des chevrons nécessitent une charge supplémentaire d’environ  $0.2kPa$  mais donnent des mélanges plus homogènes, la valeur des pertes de charges peut être négligeable par rapport au gradient de pression imposé, et vu les améliorations qu’apporte les chevrons.

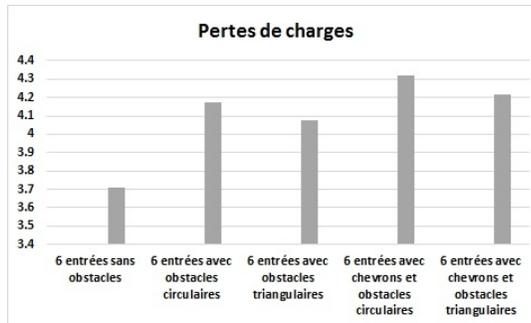


FIGURE 6.31 – Les pertes de charge dans les différentes configurations

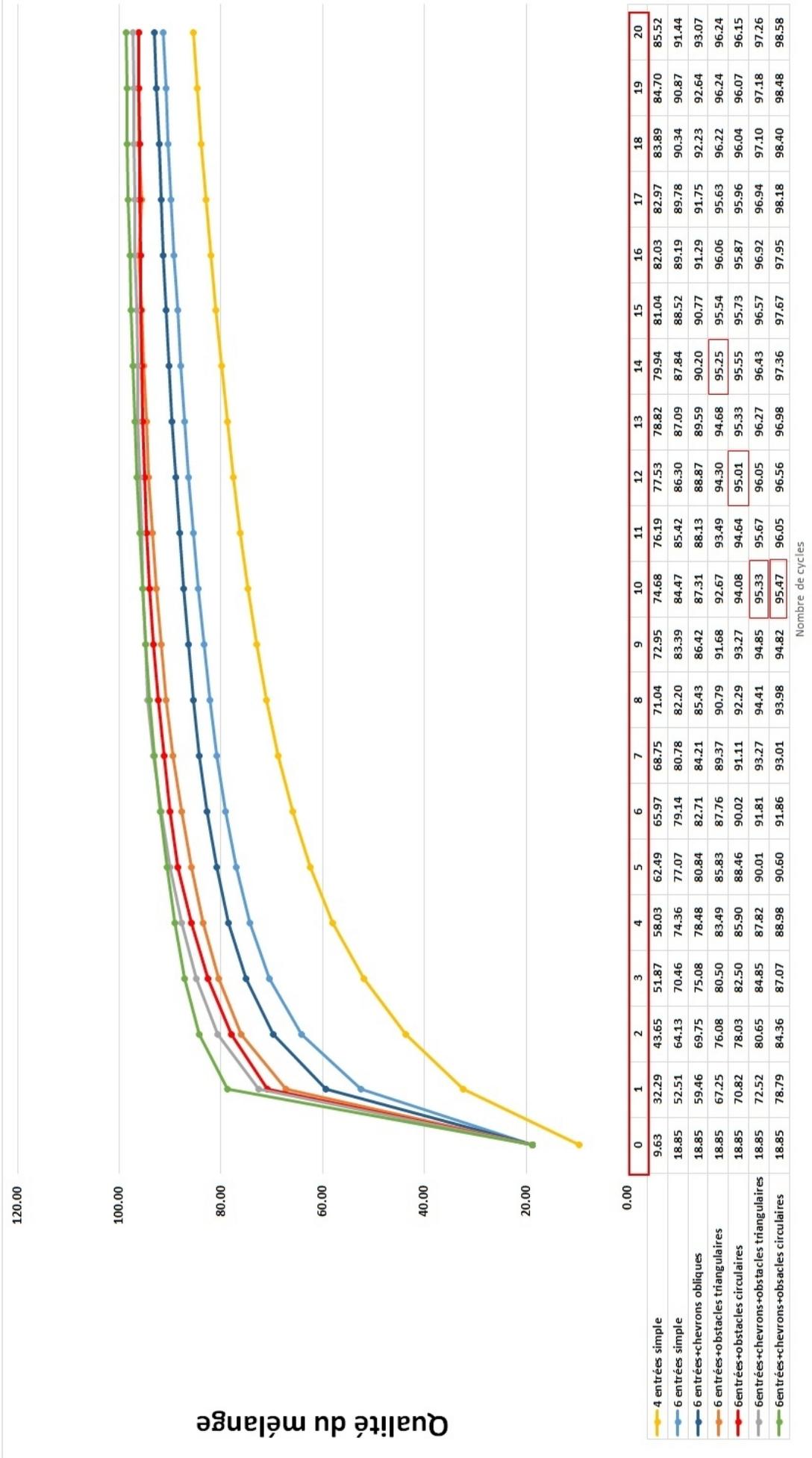


FIGURE 6.32 – comparaison entre les différentes configurations étudiées

# Conclusion et perspectives

Ce travail nous a montré que la microfluidique est un vaste chantier à explorer. Le phénomène de mélange à l'échelle microscopique l'est encore plus. La simulation en 3D du phénomène de mélange de fluides miscibles était l'objectif principal de ce mémoire, ceci dans le but non seulement d'étudier le phénomène et ses difficultés, mais aussi de proposer notre solution en tant qu'ingénieur.

Notre travail nous a donc permis de comprendre le phénomène de mélange en microfluidique à travers la visualisation des résultats de différentes simulations effectuées, montrant clairement le faible taux de mélange produit.

Une des questions principales du mémoire était de connaître les facteurs qui favorisent notre processus ; Est ce les dimensions du mélangeurs ? ou bien sa géométrie ? est ce les vitesses d'écoulement ? ou encore les caractéristiques intrinsèques des fluides à mélanger ?.

Tout au long de plusieurs simulations effectuées sur une géométrie de base en forme de  $\tau$ , nous avons apporté des réponses aux hypothèses que nous nous étions posés. il y'a différents éléments qui améliorent le mélange. on a vu l'influence de la variation du nombre de Reynolds, de la longueur du canal, du facteur hauteur/largeur, ainsi que celle du rapport des viscosités sur la qualité du mélange obtenue.

Comme nous l'avons dit longuement dans ce mémoire, la turbulence est bien le facteur le plus favorisant du mélange, mais le degré de turbulence est négligeable à l'échelle microscopique due aux faibles dimensions des dispositifs qui entraînent un caractère laminaire des écoulements, par conséquent le mélange est quasiment diffusif, l'inconvénient est que la diffusion est un processus lent et les deux fluides traversent rapidement le canal du mélangeur. L'idée donc était d'augmenter les surfaces de contact entre les fluides afin de diminuer le trajet de la diffusion, ou bien aussi de favoriser plus le processus de convection en développant des géométries qui entraînent plus de chevauchement entre les lignes de courant des deux fluides.

La littérature est riche, et des modèles de géométries ingénieuses ont été proposés pour surmonter le problème.

Dans ce mémoire, une proposition de géométrie a été faite combinant des améliorations de plusieurs modèles proposés dans la littérature. tout en gardant la simplicité afin de faciliter la conception par les méthodes lithographiques connues en microfluidique.

Des prévisions de la performance du modèle proposé ont été réalisées, et l'homogénéité parfaite du mélange a été atteinte, l'effet des différentes améliorations ajoutées a été illustré en passant par l'avantage de la géométrie serpentine par rapport à celle d'un canal simple, jusqu'à la contribution des chevrons obliques en bas du canal dans la génération des tourbillons et des courants secondaires verticalement, passant par l'effet de différents obstacles implantés le long du parcours des fluides déviant les lignes de courant et augmentant ainsi le chevauchement.

Ce travail était intéressant au niveau des connaissances et des expériences qu'il nous a apporté. Les objectifs fixés dans notre projets ont été globalement atteints. Néanmoins quelques difficultés ont été rencontrées, on cite l'absence de matériel nécessaire pour la réalisation des simulations en 3D avec le maximum de précision possible et surtout la difficulté dans la validation des résultats issues de la simulation vu le manque de détails qu'on a trouvé dans les publications avec lesquels on a travaillé.

Ce qui reste à faire pour les travaux futurs est d'abord de tester le comportement du mélangeur au sein d'un circuit composé de plusieurs autres éléments qui pourront affecter son fonctionnement, on bien de se pencher plus précisément sur certains problèmes plus pointus qu'on a envisagé tels que les variations de certain paramètres intrinsèques au fluides et l'étude de leurs impact sur le mélange.

Notre travail était purement numérique, certaines simulations ont été validées en comparaison avec des résultats publiés obtenues expérimentalement, mais notre proposition reste qu'une étude théorique qui attend une validation expérimentale, il convient a souligner dans les perspectives de ce travail d'augmenter les capacités de calcul afin d'atteindre une meilleure précision des simulations et pourquoi pas l'acquisition d'un matériel expérimental de réalisation de puces microfluidiques qui nous permettra de concrétiser nos prévisions, et nous ouvrira large les portes d'un domaine très vaste et très répandu dans la majorité de son progrès est issue des universités.

# Bibliographie

- [1] Min Cheol Park Sung Hoon Lee Sun Min Kim Kahp Yang Suh Pilnam Kim, Keon Woo Kwon. Soft lithography for microfluidics : a review. *BIOCHIP JOURNAL*, 2008.
- [2] rachid KHELFAOUI. *Micromélangeurs : étude expérimentale et numérique de solutions techniques adaptées aux microsystemes*. PhD thesis, INSA TOULOUSE, 2007.
- [3] GUILHEM VELVE CASQUILLAS. *Contrôle de température et étude des transferts thermiques dans des dispositifs microfluidiques*. PhD thesis, Paris Sud11, 2008.
- [4] Nam-Trung Nguyen and Zhigang Wu. Micromixers—a review. Technical report, School of Mechanical and Production Engineering Nanyang Technological University Singapore, 2004.
- [5] *Fundamentals and applications of microfluidics Second Edition*. ARTECH HOUSE, INC, 2006.
- [6] Stephen R. Quake Todd M. Squires. Microfluidics : Fluid physics at the nanoliter scale. *REVIEWS OF MODERN PHYSICS*, 2005.
- [7] Hans-JoachimWarnecke Dieter Bothe, Carsten Stemich. Fluid mixing in a t-shaped micro-mixer. *Chemical Engineering Science*, 2005.
- [8] Armand Ajdari Igor Mezic Howard A. Stone George M. Whitesides Abraham D. Stroock, Stephan K. W. Dertinger. Chaotic mixer for microchannels. *sciencemag*, 2002.
- [9] Max CHABERT. *Microfluidique de gouttes pour les analyses biologiques*. PhD thesis, université Paris VI, 2007.
- [10] Florence Raynal Philippe Carrière. Introduction à la microfluidique, 2012.
- [11] Lucie CAMPAGNOLO. Vélométrie par réinjection optique appliquée à la mesure d'écoulements microfluidiques. *Université de Toulouse*, 2011.
- [12] Henri PAILLÈRE Frédéric DABBENE. Initiation à la simulation numérique en mécanique des fluides : Eléments d'analyse numérique. *Cours ENSTACours ENSTA*, 2003.
- [13] www.bhrgroup.com, 2011.
- [14] Y. X. Koh H. M. Xia, Z. P. Wang. A microfluidic mixer for mixing liquids with largely different viscosities. *SIMTech technical reports*, 2010.
- [15] Bruce A. Finlayson. Mixing of liquids in microfluidic devices. *University of washington*, 2008.

# Annexe A

La fonction Matlab M\_quality\_eval

*%définition de la fonction et des différents paramètres%*

```
M_quality = M_quality_eval(model_file, min_y, max_y, step, c_init)
```

*%importation des résultats du fichier consol%*

```
model = mphload(model_file);  
con = [];
```

*% définition des plans de coupe%*

```
model.result().dataset().create('cp', 'CutPlane');  
model.result().dataset('cp').set('planetype', 'quick');  
model.result().dataset('cp').set('quickplane', 'xz');  
model.result().dataset('cp').set('quick xz', 50);
```

*%calcul de la variance de la concentration à l'entrée%*

```
var0 = mphinterp(model, 'c', 'Dataset', 'cp');  
var0 = mean((var0 - c_init/2).^2);
```

*% génération des plan parralèles et calcul de la variance en chaque plan%*

```
for i = min_z :step :max_z  
model.result().dataset('cp').set('quickz', i);  
var_c = mphinterp(model, 'c', 'Dataset', 'cp');  
var_c = mean((var_c - c_init/2).^2);  
var_c = 1 - sqrt(var_c/var0);  
con = [con; var_c];  
end  
plot(min_z :step :max_z, con);  
M_quality = con;
```

## Annexe B

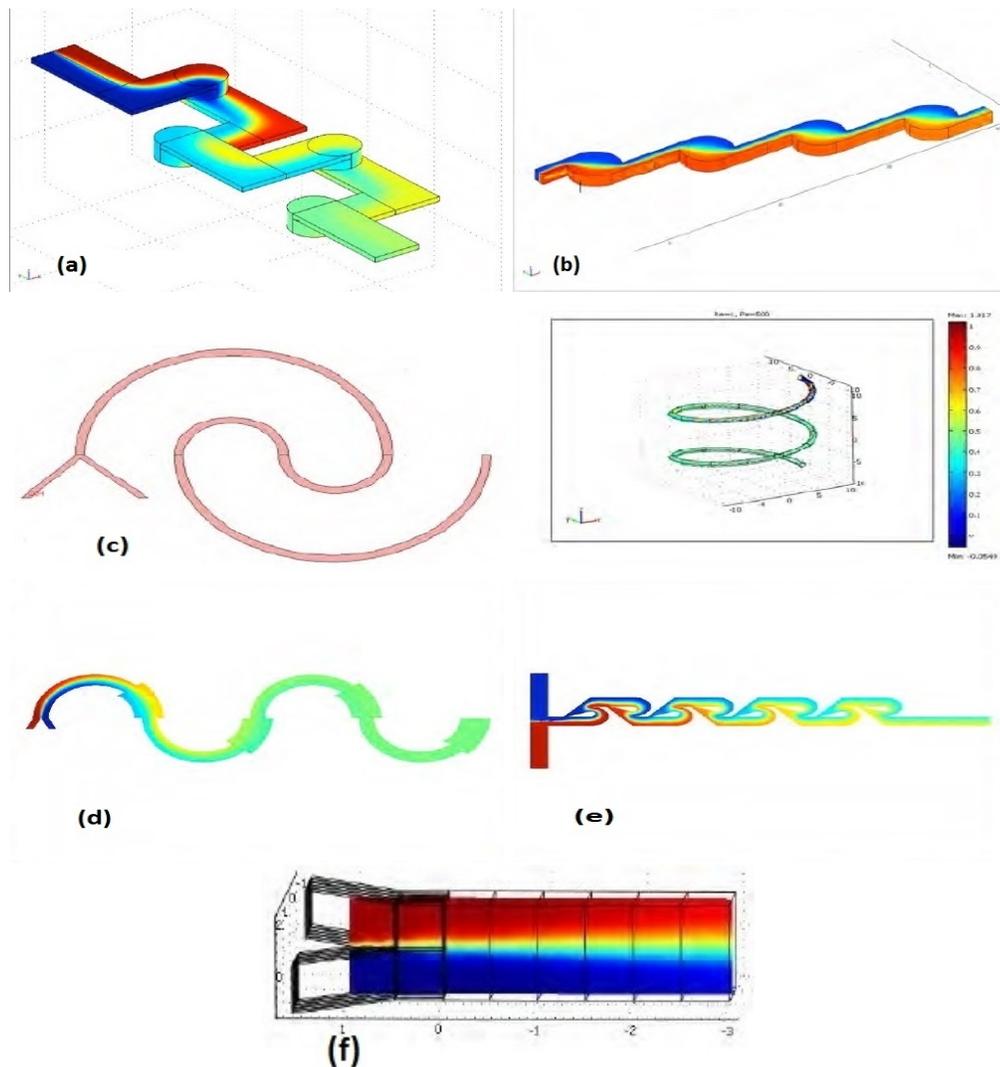


FIGURE 6.33 – Différents types de micromélangeur passif proposés dans la littérature : (a)micromélangeur en serpentins,*Christopher Neils*(b)Self circulating micromélangeur, *Cindy yuen*(c)micromélangeur spiral,*Ha Dinh* (d)micromélangeur avec expansion rectangulaire,*Ho Hack Song*(e)Coanda effect,*Curtis Jenssen*(f)structure en Y,*Vann Brasher*[15]