



**HAL**  
open science

## Caractérisation des écoulements et des transferts de matière dans les micromélangeurs

Nassim Ait Mouheb, Agnès Montillet, Camille Sollic, Jacques Comiti,  
Patrick Legentilhomme

► **To cite this version:**

Nassim Ait Mouheb, Agnès Montillet, Camille Sollic, Jacques Comiti, Patrick Legentilhomme. Caractérisation des écoulements et des transferts de matière dans les micromélangeurs. CFM 2009 - 19ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2009, Marseille, France. hal-03391323

**HAL Id: hal-03391323**

**<https://hal.science/hal-03391323>**

Submitted on 21 Oct 2021

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

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

# Caractérisation des écoulements et des transferts de matière dans les micromélangeurs

N. Ait Mouheb<sup>a</sup>, A. Montillet<sup>b</sup>, C. Sollic<sup>a</sup>, J. Comiti<sup>b</sup>, P. Legetilhomme<sup>b</sup>

*a. GEPEA UMR-CNRS 6144, Ecole des Mines de Nantes, 4 Rue Alfred Kastler, 44307 Nantes, France*

*b. GEPEA UMR CNRS 6144, C.R.T.T, 37 Bd de l'Université BP 406, 44602 Saint-Nazaire-Cedex, France*

## Résumé:

*L'amélioration du mélange nécessite une connaissance approfondie des mécanismes régissant l'écoulement et les échanges de matière entre les espèces. Une caractérisation numérique de l'écoulement et de la qualité du mélange a été effectuée dans des micromélangeurs à géométrie  $\top$  et  $\dagger$ . La courbe d'intensité du mélange dévoile que le caractère fortement tridimensionnel de la géométrie en croix  $\dagger$  améliore le processus de mélange dans les microcanaux en comparaison avec le micromélangeur en  $\top$ . La deuxième partie de notre étude est expérimentale. La PIV, nous a permis de mesurer les champs de vitesse et d'observer l'évolution de l'écoulement et le développement de tourbillons le long des microcanaux de mélange. Une technique complémentaire qui est une méthode électrochimique de type polarographique, a permis à partir de données pariétales de détecter localement la formation de tourbillons. Les résultats des deux méthodes expérimentales, nous permettent de confirmer l'évolution de l'écoulement observée numériquement.*

## Abstract:

*The understanding of physical phenomena such as flow behaviour and mass transfer performance is needed in order to develop appropriate micromixers for industrial or biomedical applications. In this work, CFD is used to characterize the flow and the liquid mixing quality in a micromixer with two geometries, respectively  $\top$  and  $\dagger$ , as a function of the Reynolds number. The mixing quality curves reveal that the  $\dagger$  shaped system can improve the mixing process in comparison with the micromixers having  $\top$  geometry. The second part of the study is experimental. PIV allows observing the evolution of the flow and the vortices development along the mixing microchannels. A second experimental technique which is an electrochemical method can locally characterize the formation of swirling structures of the flow. These two complementary experimental results are analysed and a comparison with the CFD results is performed.*

**Mots clefs :** Micromélangeur, simulation numérique, qualité du mélange, PIV, électrochimie.

## 1 Introduction

L'amélioration des performances des microprocédés nécessite une meilleure compréhension des mécanismes régissant l'écoulement et les échanges de matière ([6] et [8]). Dans le cas d'un micromélangeur à géométrie en té noté  $\top$ , à partir des différents travaux expérimentaux et numériques ([1], [4], [10] et [2]), on peut distinguer trois régimes d'écoulement laminaire : à faible nombre de Reynolds, en sortie, les lignes de courant sont réparties dans des tranches parallèles qui ne s'entremêlent pas. Avec l'augmentation du nombre de Reynolds, il y a formation de tourbillons au niveau de la zone d'impact. Dans ces deux régimes, la symétrie de l'écoulement à l'entrée est préservée. A partir d'un nombre de Reynolds supérieur à 100, les lignes de courant s'entrelacent, ce qui augmente la surface de contact entre les deux liquides. Dans le cadre de notre étude, on s'est intéressé également à la géométrie en croix noté  $\dagger$ . Cette configuration a été étudiée numériquement par Srisamran et Devahastin [11]. Avec l'augmentation du nombre de Reynolds, la simulation a permis d'observer l'apparition de zones de recirculation. Le diamètre de ces tourbillons croît avec le débit. L'apparition de zones de recirculation préférentielles, dans le cas de microcanaux croisés a été confirmée par les travaux numériques et expérimentaux de Huchet [5].

L'objectif de ce travail est de caractériser numériquement et expérimentalement l'écoulement et le transfert de matière au sein des micromélangeurs passifs. Il s'agit d'identifier et d'optimiser les configurations et les conditions d'écoulement permettant d'augmenter les mélanges entre les fluides et cela dans différentes géométries simples de type  $\top$  ou  $\dagger$ .

## 2 Paramètres de la simulation numérique

La résolution du problème décrit par les équations de Navier-Stokes utilise une méthode de type volumes finis, mise en œuvre avec le code commercial CFD FLUENT 6.2. L'intégration des équations discrètes couplées en pression/vitesse est réalisée au moyen de l'algorithme implicite SIMPLEC.

La résolution des équations s'effectue en écoulement laminaire et stationnaire, le fluide est newtonien et incompressible, les forces gravitationnelles sont absentes.

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)] \quad (2)$$

Où  $\vec{v}$  est le vecteur vitesse,  $p$  la pression,  $\rho$  et  $\mu$  étant respectivement la masse volumique et la viscosité dynamique du fluide égales à  $998,2 \text{ kg.m}^{-3}$  et  $1,003 \text{ mPa.s}$ .

La simulation numérique a été effectuée sur les deux micromélangeurs de géométrie en  $\nabla$  et en  $\perp$ . Dans le cas de la configuration en  $\nabla$  (figure 1.a), il y a deux canaux d'entrée et un canal de mélange. Alors que dans le cas de la  $\perp$  (figure 1.b), il y a deux canaux d'entrée et deux de mélange. Les canaux ont une section carrée de  $400 \mu\text{m}$  de côté, qui est aussi la valeur du diamètre hydraulique,  $D_h$ . Les longueurs des canaux d'entrée et de mélange sont de  $16 \text{ mm}$  et de  $24 \text{ mm}$  respectivement. L'intersection entre les canaux du micromélangeur est définie comme la zone d'impact. Un système de coordonnées cartésiennes est choisi pour l'étude (figure 1). L'origine des axes  $(0, 0, 0)$  est positionnée au centre de la zone d'impact. La longueur des canaux d'entrée de  $40 D_h$  ( $16 \text{ mm}$ ) a été définie afin d'assurer un écoulement établi avant l'impact des fluides. Le domaine de calcul a été discrétisé en approximativement 1 million de mailles hexaédriques, la plupart des cellules ayant des côtés d'environ  $2 \mu\text{m}$  de longueur.

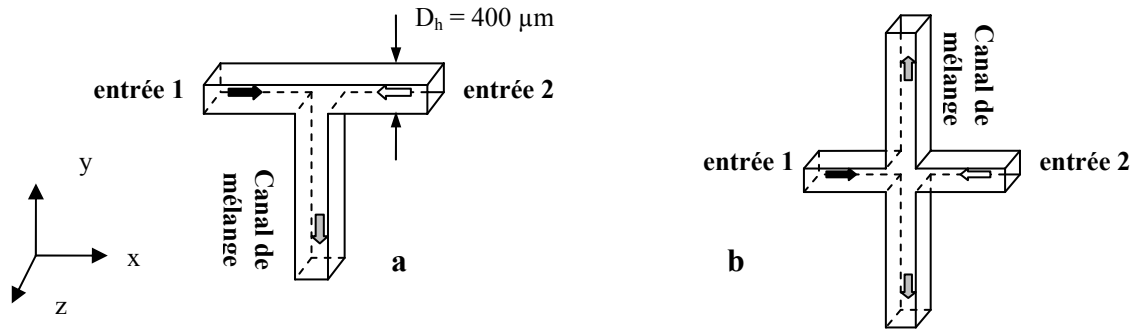


FIG 1 : Schéma des micromélangeurs en  $\nabla$  et en croix ( $\perp$ ).

Lors de l'étude numérique, l'évolution de la concentration d'une espèce sans réaction est décrite par l'équation de convection-diffusion pour  $i$  espèces. Cette équation de conservation s'écrit :

$$\nabla \cdot (\rho \vec{v} y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i \quad (3)$$

$y_i$  est la fraction massique de l'espèce  $i$  et  $\vec{J}_i$  est le taux de flux de diffusion de chaque espèce avec

$$\vec{J}_i = -\rho D_{i,m} \nabla y_i \quad (4)$$

Afin d'évaluer l'intensité du mélange en fonction du régime d'écoulement, nous avons utilisé deux liquides (a) et (b). Le liquide (a) a été spécifié à l'entrée 1, alors que le liquide (b) a été spécifié au niveau de l'entrée 2. Afin de comparer les différents cas et d'évaluer l'intensité du mélange dans les micromélangeurs, la fraction molaire,  $x_i$ , de l'espèce considérée dans la solution traçante a été enregistrée sur une section carrée à une distance de  $5 D_h$  après l'impact. À partir de des données, nous calculons la qualité du mélange par la

$$\text{relation [2]} : \alpha = 1 - \sqrt{\frac{\sigma^2_M}{\sigma^2_{\max}}} \quad (5)$$

Où  $\sigma^2_{\max}$  représente la variance maximum du mélange qui est égale à  $0,5$  pour des conditions sans mélange

$$\text{et } \sigma^2_M \text{ est la variance de la concentration définie par : } \sigma^2_M = \frac{1}{n} \sum (x_i - \bar{x}_M)^2 \quad (6)$$

Ainsi, lorsque  $\alpha = 0 \%$ , il n'y a pas de mélange, alors que pour  $\alpha = 100 \%$  le mélange est parfait.

Afin de faciliter la comparaison entre les deux systèmes en fonction du nombre de Reynolds, on fait varier l'amplitude de la vitesse d'entrée identiquement. Le nombre de Reynolds est défini par rapport à la vitesse d'entrée :  $Re = \frac{\rho U D_h}{\mu}$  (7)

### 3 Technique électrochimique

La méthode électrochimique repose sur une relation d'oxydo-réduction rapide contrôlée par les phénomènes de convection et de diffusion. La réaction électrochimique employée est la réduction cathodique de l'ion ferricyanure en ion ferrocyanure :  $Fe(CN)_6^{-3} + e^- \rightarrow Fe(CN)_6^{-4}$  (8)

Cette réduction met en jeu un électron à l'interface électrode/solution au niveau de la couche limite massique  $\delta_d$ , ce qui se traduit par un courant électrique. Dans les conditions d'expérience, le courant électrique mesuré est limité par l'apport d'ions au voisinage de l'électrode, celui-ci est appelé courant limite de diffusion,  $I_{lim}$ . Le coefficient de transfert de matière,  $k$ , peut être calculé par :  $k = I_{lim} / v_e F A c_0$  (9) avec  $v_e$  le nombre d'électrons impliqués dans la réaction,  $F$  la constante de Faraday et  $c_0$  la concentration en ions ferricyanures.

La résolution de l'équation stationnaire donnée par la solution de Lévêque [7] dans le cas d'une électrode rectangulaire relie le gradient pariétal de vitesse moyen ( $S_y = \frac{\partial v}{\partial n}$ ) au coefficient de transfert de masse ( $k$ )

$$\text{par [3]: } I_{lim} = 0,8075 v_e F c_0 A (S_y D^2 / l_e)^{1/3} \quad (10)$$

avec  $l_e$  la largeur de la microélectrode et  $D$  le coefficient de diffusion des ions ferricyanures dans la solution. Lors des mesures électrochimiques, la solution est maintenue à une température constante de 22°C. Cette solution contient 0,01M de ferricyanure de potassium, 0,025M de ferrocyanure de potassium et 0,6M de sulfate de potassium dans de l'eau déminéralisée. Le coefficient de diffusion des ions ferricyanures est mesuré avec un disque tournant, la valeur obtenue est de  $5,81 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \cdot \text{s}$  à 22 °C. Une tension de polarisation de -0,7 V est appliquée afin de travailler dans des conditions de limitation diffusionnelle du courant. Les mesures du courant sur les microsondes sont converties en volt, amplifiées et enregistrées simultanément. Les mesures sont faites à une fréquence de 6 khz durant 90 secondes.

La cellule de mesure électrochimique a été fabriquée à l'Institute of Chemical Technology de Prague [9]. Le système est de géométrie en croix avec des canaux de section carrée de côté 400  $\mu\text{m}$ . 44 microsondes sont implantées à la surface des parois (figure 2). Les sondes ont une surface théorique de 50  $\mu\text{m}$  x 400  $\mu\text{m}$  et elles sont disposées transversalement au sens des canaux. Le tableau 1 indique les différentes positions des sondes dans les microcanaux.

Microsondes	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8
Position dans le canal (mm)	y = -0,4	y = -0,6	y = -1	y = -1,8	y = -4,2	y = -12,2	y = -25,2	y = -33,5
Position en fonction de $D_h$ (mm)	y = $-D_h$	y = $-1,5D_h$	y = $-2,5D_h$	y = $-4,5D_h$	y = $-10,5D_h$	y = $-30,5D_h$	y = $-63D_h$	y = $-83,75D_h$

TAB 1 : Positions des microsondes

### 4 Dispositif de vélocimétrie par image des particules (PIV)

Dans le but de caractériser expérimentalement l'évolution de l'écoulement, des mesures PIV des champs de vitesse ont été effectuées dans les micromélangeurs en  $\top$  et en  $\perp$ . Le banc d'essai (figure 3) comprend un laser ND : Yag, une caméra CCD, la pompe de circulation de l'eau et la cellule de travail. Tous ces éléments ont été disposés sur un support très rigide. Le laser, la caméra et le réseau sont fixés sur un système de déplacement individuel micrométrique. Des particules traceuses en polyamide, de diamètre 5  $\mu\text{m}$ , ont été ajoutées au liquide. Ces particules sont illuminées par le laser à une longueur d'onde de 532 nm. Une paire d'images est capturée successivement par la caméra CCD et analysée en utilisant une corrélation adaptative (FlowManager, Dantec), ce qui permet d'obtenir des champs de vitesse instantanée. Le dispositif PIV permet un champ de mesure maximale de 400  $\mu\text{m}$  x 400  $\mu\text{m}$  x 30  $\mu\text{m}$ , avec dans ce cas une résolution de 12  $\mu\text{m}$  x 12  $\mu\text{m}$  x 30  $\mu\text{m}$ . Le système de déplacement micrométrique permet de régler verticalement le plan de mesure dans les microcanaux.

Avec les deux méthodes expérimentales décrites précédemment, les solutions sont introduites dans les micromélangeurs à l'aide de deux pompes à engrenages HNP Mikrosystem (mzr-4608) en appliquant des débits d'entrée identiques. Les débits de sortie sont mesurés et enregistrés à l'aide de deux balances de précision (Ohaus explorer pro balances, précision de 1 mg), afin de s'assurer que les microcanaux de sorties sont équilibrés en débit.

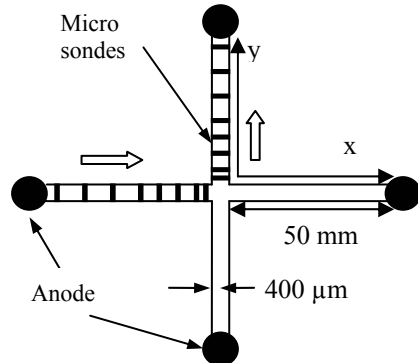


FIG 2 : Schéma de la cellule électrochimique

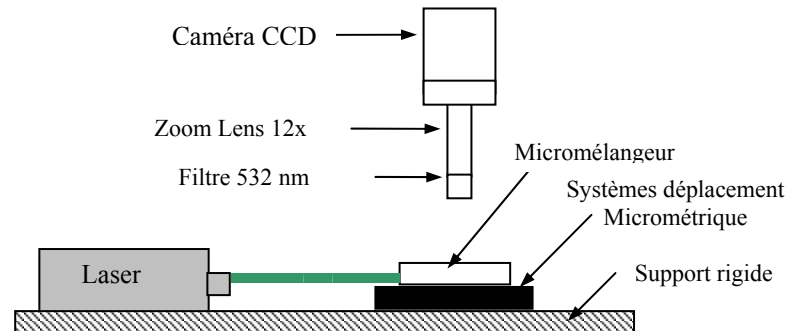


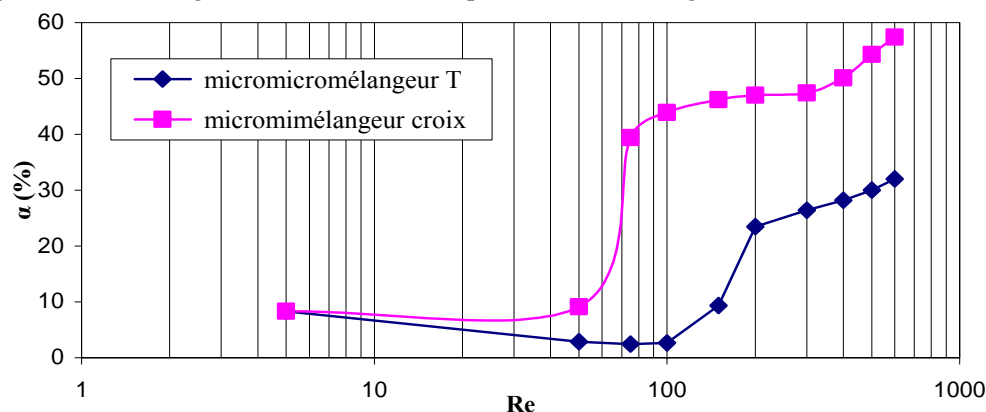
FIG 3: Schéma du dispositif PIV

## 5 Résultats et discussion

### 5.1 Comparaison numérique entre les micromélangeurs en $\top$ et en $\perp$

La simulation numérique a été effectuée sur les deux micromélangeurs présentés sur la figure 1, afin de caractériser l'évolution de l'écoulement le long des canaux d'un micromélangeur, spécifiquement dans la zone d'impact et le long du microcanal de mélange. La simulation de l'écoulement dans les micromélangeurs en  $\top$  et en  $\perp$  sont détaillés dans Ait Mouheb et al [1].

A partir de notre étude du mélange dans des micromélangeurs en  $\top$  et en  $\perp$ . Nous remarquons que l'évolution de la qualité du mélange est différente entre les deux configurations. Dans le cas d'un micromélangeur en  $\top$ , la qualité du mélange ne dépasse pas 33 % pour un nombre de Reynolds égal à 500 (figure 4). A partir d'un nombre de Reynolds supérieur à 100, la géométrie en  $\perp$  permet dans les deux canaux de sortie d'atteindre une qualité de mélange supérieure à 40 % (figure 4). Celle-ci augmente avec le débit d'entrée, jusqu'à 57 % pour un  $Re = 500$ . L'efficacité du mélange dans le cas du micromélangeur en  $\perp$ , s'explique par le caractère tridimensionnel précoce de l'écoulement et par l'apparition de plusieurs tourbillons qui s'étirent de plus en plus jusqu'à une distance de  $25 D_h$  avec l'augmentation du nombre de Reynolds. Dans le cas de la géométrie en  $\top$ , l'écoulement dans le cas du régime d'engouffrement ([1] et [2]) se stabilise à partir d'une distance de  $7 D_h$  par l'effet des parois et du degré de liberté limité de la géométrie en T en comparaison avec la géométrie en croix, ce qui inhibe le mélange entre les fluides.

FIG 4: Qualité du mélange en fonction du nombre de Reynolds pour les micromélangeurs  $\top$  et  $\perp$  à  $y = -5,5D_h$ 

### 5.2 Gradients de vitesse pariétal expérimental et numérique

Une comparaison entre les gradients de vitesses pariétaux obtenus expérimentalement et par simulation numérique a été effectuée pour différents régimes d'écoulement. L'étude a permis de détecter les zones d'écoulement tourbillonnaire selon les positions des microsondes dans le micromélangeur  $\perp$ . Le graphe de la

figure 5 montre, pour une large gamme de nombres de Reynolds, la variation du gradient de vitesse moyen dans la zone d'impact. Concernant les quatre sondes, respectivement S1, S2, S3 et S4, les résultats de la simulation et de la méthode électrochimique ont été comparés. Les valeurs obtenues augmentent en fonction du nombre de Reynolds. Sur la figure 5, on remarque que pour un nombre de  $Re < 100$ , l'effet de la réunion des fluides est négligeable sur le gradient de vitesse. À partir d'un nombre de  $Re > 100$ , l'effet de l'impact produit une augmentation du gradient pariétal de vitesse le long du canal de mélange. La figure 6 représente les profils du gradient pariétal de vitesse le long du canal de mélange. À partir de la sonde S6, les valeurs se stabilisent et deviennent constante et nous notons que pour  $Re < 700$ :  $S_{y1} > S_{y2} > S_{y3} > S_{y4} > S_{y5} > S_{y6} \approx S_{y7} \approx S_{y8}$ . Les valeurs mesurées sur les sondes S1 et S2 sont proches, cela peut s'expliquer par la proximité de ces deux sondes. Les valeurs élevées sur les sondes, dans la zone d'impact des fluides ( $S_{y1} > S_{y2} > S_{y3} > S_{y4}$ ), concordent avec l'apparition d'un écoulement tridimensionnel observé numériquement [1]. Les tourbillons s'atténuent après la sonde S3 et le gradient de vitesse devient constant à partir de la sonde S6.

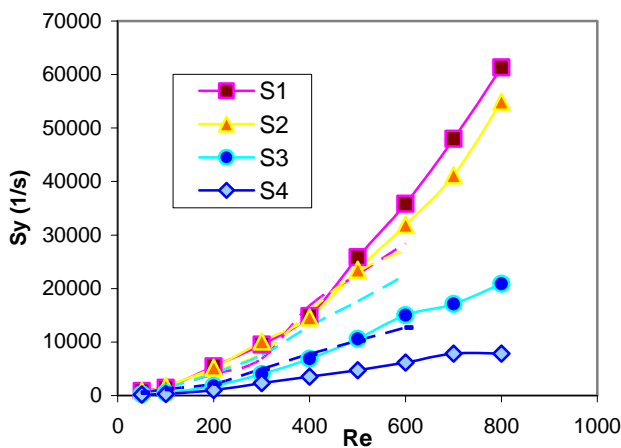


FIG 5: Evolution du gradient de vitesse en fonction du nombre de Reynolds dans un micromélangeur en  $\perp$  (--- simulations, — expérimentations)

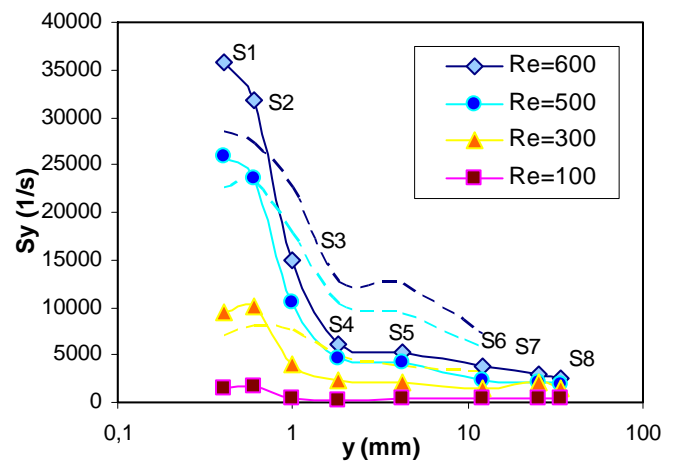


FIG 6: Profils du gradient de vitesse le long d'un canal de sortie dans un micromélangeur en  $\perp$  (--- simulations, — expérimentations)

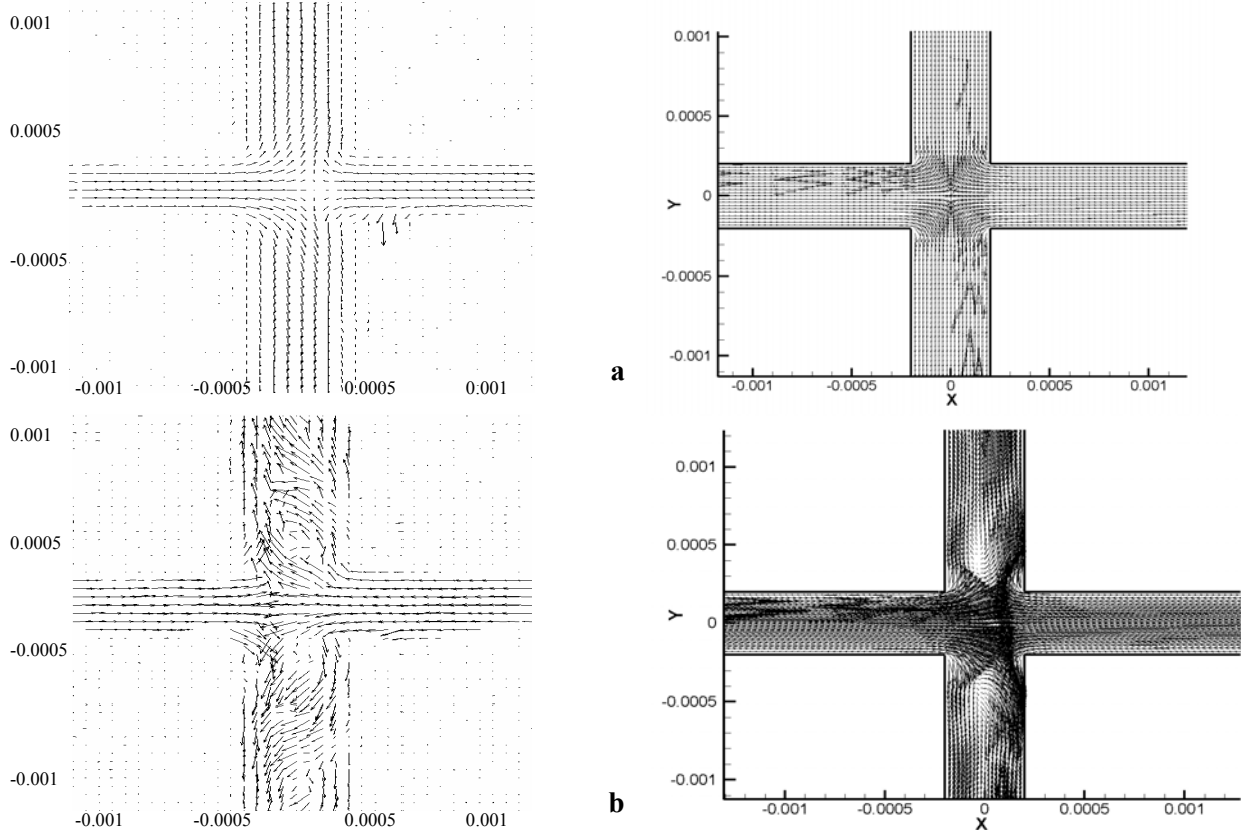


FIG 7: Champs de vitesse mesurés et calculés : a)  $Re=50$ , b)  $Re=200$

### 5.3 Etude par PIV de l'écoulement dans les micromélangeurs

Une étude par PIV de l'évolution de l'écoulement, au sein du micromélangeur  $\perp$ , a été effectuée. Les champs de vitesse ont été mesurés pour une large gamme de nombre de Reynolds et à différentes profondeurs du canal. Ces résultats expérimentaux ont été comparés avec nos études électrochimique et numérique. La partie gauche et droite de la figure 7 représentent respectivement les champs de vitesses calculés et obtenus par PIV pour  $Re=50$  et  $Re=200$ , le plan correspond au milieu du micromélangeur, à  $z = 0$ , dans la zone d'impact des fluides au sein d'un micromélangeur  $\perp$ . L'allure des champs de vitesses obtenues numériquement ainsi que la formation d'une zone d'arrêt après impact est en accord avec les mesures par PIV. Les champs de vitesses, pour un nombre de Reynolds inférieur à 75, se croisent et continuent parallèlement le long des canaux de mélange (figure 7, a). A partir d'un Reynolds supérieur à 100, la direction des vecteurs de vitesse laisse imaginer un entrelacement des lignes de courant correspondant à un écoulement tridimensionnel dans les canaux de mélange (figure 7, b). La nature de cet écoulement est propice à l'augmentation de la qualité du mélange observée numériquement dans la figure 4.

## 6 Conclusion

La topologie de l'écoulement et du transfert de matière dans les micromélangeurs  $\perp$  et  $\perp$  a été étudiée par simulation numérique et avec deux méthodes expérimentales pour la géométrie en  $\perp$ . Numériquement, les effets du débit d'entrée et de la géométrie sur l'amélioration de la qualité du mélange ont été évalués. Le micromélangeur en  $\perp$  développe une topologie d'écoulement différente de celle observée dans le  $\perp$ . Après impact des fluides, il y a apparition de plusieurs tourbillons qui s'étirent le long du canal de sortie, ce qui accélère le mélange entre les liquides par rapport au micromélangeur en  $\perp$ . Des mesures du gradient pariétal de vitesse moyen dans un micromélangeur en  $\perp$  ont également été effectuées par méthode électrochimique. Les résultats expérimentaux et numériques sont concordants. Les valeurs élevées du gradient de vitesse, dans la zone d'impact, sont en bon accord avec la formation de tourbillons prévue par la simulation numérique. Les mesures par PIV effectuées sur des micromélangeurs en  $\perp$  permettent d'observer l'apparition des tourbillons et leurs amplitudes. Ce travail se poursuit actuellement avec une quantification expérimentale de la qualité du mélange par analyse d'image.

## Références

- [1] Ait Mouheb N., Solliec C., Montillet A., Comiti J., Legentilhomme P., Havlica J., Numerical Study of the flow and mass transfer in micromixers, Amer Soc Mechanical Engineers, 241-248, 2008.
- [2] Engler M., Kockmann N., Kiefer T., Woias P., Numerical and experimental investigations on liquid mixing in static micromixers, Chem.Eng. J., 101, 315-322, 2004.
- [3] Hanratty T. J., Campbell J.A.; Measurement of wall shear stress. In Fluid mechanics measurements, edited by J.R Goldstein, Washington, Hemisphere; 559, 1983.
- [4] Hoffmann M., Schlüter M., Rübiger N., Experimental investigation of liquid-liquid mixing in T-shaped micro-mixers using  $\mu$ -LIF and  $\mu$ -PIV, Chem Eng Sci., 61, 2968-2976, 2006.
- [5] Huchet F., Havlica J., Legentilhomme P., Montillet A., Comiti J., Tihon J., Use of electrochemical microsensors for hydrodynamics study in crossing microchannels, Microfluid Nanofluid J, 5, 55-64, 2008.
- [6] Kockmann N., Transport phenomena in micro process engineering, Heat and mass transfer, Springer, 2008.
- [7] Lévêque M A., Les lois de la transmission de la chaleur par convection, Ann. Mines, Paris, 13, 201-239, 1928.
- [8] Mansur E A., Mingxing Y., Yundong W., Youyuan D., A State-of-the-Art Review of Mixing in Microfluidic Mixers, Chinese Journal of Chemical Engineering, 16, 503-516, 2008
- [9] Schrott W., Svoboda M., Slouka Z., Šnita D., Metal electrodes in plastic microfluidic systems, Microelectronic Engineering J, 2009.
- [10] Soleymani A., Kolehmainen E., Turunen I., Numerical and experimental investigations of liquid mixing in T-type micromixers, Chemical engineering journal, 13, 219-228, 2008.
- [11] Srisamran C., Devahastin S., Numerical simulation of flow and mixing behaviour of impinging streams of shear-thinning fluids, Chem Eng J., 61, 4884-4892, 2006.