

PROPOSITION DE STAGE – MASTER 2 DET

Dynamique des fluides, Énergétique et transferts

Université Toulouse 3 Paul Sabatier - Toulouse INP - INSA Toulouse - ISAE SUPAERO – IMT Mines Albi

Titre : Simulation Numérique Directe (DNS) de la dynamique de gouttes visqueuses à interfaces visco-élastiques

Responsables : Benjamin Lalanne, Maître de Conférences, LGC-Toulouse INP ENSIACET
Sébastien Tanguy, Maître de Conférences, IMFT-Université Paul Sabatier

Lieu du stage : Laboratoire de Génie Chimique, Campus INP-ENSIACET, 4 Allée Émile Monso

Durée / période : 5 à 6 mois à partir de février 2024

Candidature à envoyer à : Benjamin.Lalanne@ensiacet.fr ; tanguy@imft.fr

Contexte et objectifs :

Ce stage s'inscrit dans le cadre d'un projet collaboratif entre 2 laboratoires (Laboratoire de Génie Chimique (LGC) & Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT)), le projet FRAGOVISIC, financé par l'Agence Nationale de la Recherche. Le contexte applicatif de ce projet concerne les procédés industriels d'émulsification (application possibles dans le cas d'émulsions agro-alimentaires comme le beurre ou le lait, avec les émulsions parentérales dans le secteur de la santé, en ingénierie des matériaux...). Ce projet vise à mieux comprendre la physique de la fragmentation des gouttes dans ces procédés, afin de réduire leur consommation énergétique et de rendre plus efficace l'obtention d'émulsions à très petite taille de gouttes (sous le micron, ce qui est le cas pour les applications afin que l'émulsion reste stable sur une durée suffisamment longue).

A ce jour, il n'existe pas de modèle générique prédictif de la fragmentation des gouttes visqueuses, qui seraient utiles pour optimiser la conception de ces procédés d'émulsification dans un contexte d'utilisation raisonnée des ressources et de l'énergie. De plus, la présence de molécules tensio-actives, utilisées en grande quantité pour fabriquer l'émulsion, confère aux interfaces des propriétés visco-élastiques qui viennent affecter la dynamique de déformation et de rupture des gouttes, mais cet effet n'a pas été suffisamment bien caractérisé pour être pris en compte dans les modèles. Ainsi, le projet FRAGOVISIC (4 ans) vise à mieux cerner les mécanismes mis en jeu lors de la fragmentation des gouttes et le rôle des interfaces complexes, par l'utilisation complémentaire de simulations numériques et d'expérimentations.

Ce stage intervient au début du projet. Nous souhaitons mettre en place des simulations numériques par CFD des phénomènes de déformation de rupture de gouttes sous écoulement, dans des conditions proches de celles rencontrées en microfluidique, en prenant en compte l'effet de tensio-actifs aux interfaces. L'objectif de ce stage est d'implémenter dans un code de CFD des modèles d'interfaces complexes couvertes de tensio-actifs (interfaces visco-élastiques), puis de pouvoir simuler la dynamique des gouttes dans des expériences menées en parallèle.

Démarche :

Le travail proposé est un travail de développements et simulations numériques.

Le code CFD de simulation DIVA sera utilisé, développé à l'IMFT (S. Tanguy) depuis une quinzaine d'années : il permet de simuler des écoulements diphasiques par la résolution directe des équations de Navier-Stokes (méthode des volumes finis) et de capturer les interfaces déformables par la méthode *Level-Set*. Ce code a donné lieu à de nombreux travaux : évaporation de gouttes, ascension de bulles, ébullition nucléée, cavitation acoustique, transferts de masse aux interfaces...

Des développements numériques récents ont été réalisés au LGC (B. Lalanne) afin de considérer la présence de tensio-actifs en surface des gouttes : ils abaissent la tension de surface, et génèrent des

effets Marangoni aux interfaces dont les conséquences sont prépondérantes sur la dynamique des gouttes [1]. Pour être appliqués aux émulsions, ces modèles doivent être enrichis afin de pouvoir représenter des interfaces plus complexes: celles-ci ne peuvent plus être décrites par une simple tension interfaciale, mais deviennent des matériaux visco-élastiques. On peut ainsi les caractériser par une élasticité et une viscosité de surface en réponse au cisaillement et à la dilatation. Mathématiquement, cela peut être pris en compte par des sauts de contraintes tangentielles et normales aux interfaces ; numériquement, la *Ghost Fluid Method* implémentée dans le code DIVA est à même de traiter ces discontinuités lors de la résolution des équations de Navier-Stokes [2].

Ce stage consistera à :

- se familiariser avec les modèles visco-élastiques pour décrire une interface [3] et avec la manière d'intégrer les forces de surface associées dans les équations résolues par le code ;
- implémenter dans DIVA un modèle de viscosité interfaciale puis d'élasticité ; des premiers développements ont été réalisés (thèse A. Piedfert (2018), thèse A. Dalmon (2018)), mais nécessitent d'être complétés et couplés, en identifiant les contraintes (maillage, pas de temps) ;
- valider les développements réalisés sur des cas-tests : on simulera des configurations de goutte oscillante, de goutte en ascension à interface visqueuse et/ou élastique... dans le but de confronter les résultats à des résultats théoriques de la littérature ;
- simuler des configurations proches d'expériences en microfluidique, dans lesquelles on cherche à déformer des gouttes et à étudier leur rupture sous écoulement laminaire. Les expériences seront menées en parallèle, permettront de faire varier le type de tensio-actif utilisé, ce qui sera traduit dans les simulations par des propriétés interfaciales données. La confrontation entre expériences et simulations servira à identifier les propriétés rhéologiques pertinentes pour l'interface qui permette de rendre compte de la dynamique des gouttes. *Ces simulations seront réalisées durant le stage, et pourront se poursuivre lors d'une possible thèse.*

Références :

[1] Piedfert, A., Lalanne, B., Masbernat, O., & Risso, F. (2018). Numerical simulations of a rising drop with shape oscillations in the presence of surfactants. *Physical Review Fluids*, 3(10), 103605.

[2] Dalmon, A., Kentheswaran, K., Mialhe, G., Lalanne, B., & Tanguy, S. (2020). Fluids-membrane interaction with a full Eulerian approach based on the level set method. *Journal of Computational Physics*, 406, 109171.

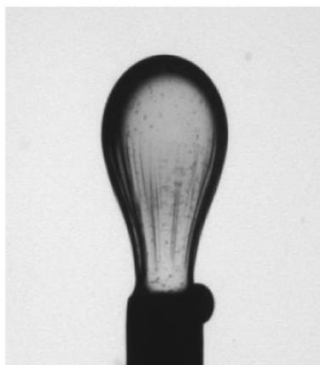
[3] Jaensson, N. O., Anderson, P. D., & Vermant, J. (2021). Computational interfacial rheology. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 290, 104507.

Compétences nécessaires : Dynamique des fluides, écoulements diphasiques, goût prononcé pour la simulation numérique (CFD).

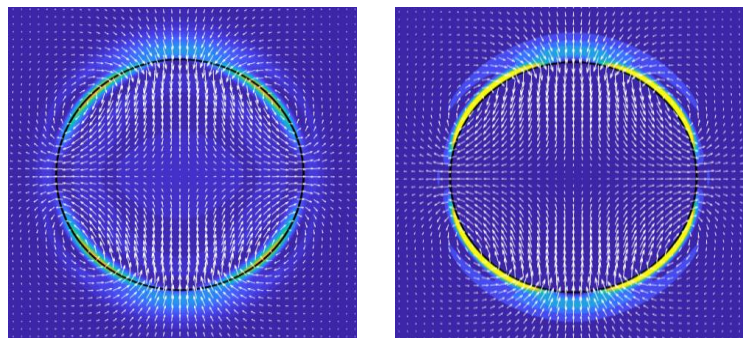
Formation : Mécanique des fluides ou Energétique / Génie des Procédés avec des bonnes bases en mécanique des fluides et écoulements multiphasiques.

Gratification : ~600€ / mois

Ces travaux pourront être poursuivis dans le cadre d'une thèse financée par le projet ANR FRAGOVISIC.



Goutte pendante de brut de pétrole dans de l'eau, à interface élastique (Abi Chebel et al., Langmuir 2019)



Simulation de l'oscillation d'une goutte à interface visqueuse (droite) et propre (gauche) avec DIVA