



École

Nationale Supérieure de Génie Mathématique et Modélisation
(ENSGMM)

Modélisation et Simulation Numérique
(M.S.N)

Étude de la séparation de phase dans un mélange de deux substances binaires : cas de l'eau et l'huile

Journée de l'Étudiant Mathématicien Modélisateur (JEMM)
Édition 2

Présenté par : Charbel Z. J. MAMLANKOU

Sous la supervision de : Dr (MA) Jamal ADETOLA

21 Décembre 2024

Table des matières

1	Introduction	2
2	Matériels et Méthodes	2
2.1	Équation de Cahn-Hilliard	2
2.1.1	Modélisation de l'équation	2
2.1.2	Modèle mathématique	3
2.2	Discretisation spatiale (différences finies pour le Laplacien)	3
2.2.1	Discretisation temporelle (méthode d'Euler explicite)	4
2.2.2	Condition de stabilité CFL (Courant-Friedrichs-Lewy)	4
2.3	Simulation numérique	5
2.3.1	Cas pratique	5
2.3.2	Outils	5
3	Résultats et discussions	5
3.1	Résultats	5
3.2	Discussion	5
3.3	Limites et perspectives	6
4	Conclusion	6

1 Introduction

La séparation des phases dans un mélange de substances immiscibles, comme l'eau et l'huile, constitue un phénomène physique complexe, souvent modélisé par l'équation de Cahn-Hilliard. Ce modèle, issu de la théorie des fluides et de la thermodynamique, permet de décrire la dynamique de la séparation de ces phases en tenant compte des interactions intermoléculaires et des effets de diffusion. Dans ce travail, nous avons utilisé l'approche numérique de l'équation de Cahn-Hilliard pour simuler et analyser la séparation de l'eau et de l'huile dans un système bidimensionnel. L'objectif principal est d'étudier l'évolution de la concentration des deux phases au cours du temps et d'examiner l'impact des paramètres numériques sur la stabilité du système. À travers cette simulation, nous cherchons à mieux comprendre les mécanismes sous-jacents à la séparation de phases et à valider les résultats obtenus par rapport à la théorie

2 Matériels et Méthodes

2.1 Équation de Cahn-Hilliard

L'équation de Cahn-Hilliard (*d'après John W. Cahn et John E. Hilliard*) est une équation de physique mathématique qui décrit le procédé de séparation de phase, par lequel deux composants d'un fluide binaire se séparent spontanément et forment des domaines purs dans chaque composant. Si c est la concentration du fluide, avec $c = \pm 1$ indiquant les domaines, alors l'équation s'écrit :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = M \nabla^2 (c^3 - c - \gamma \nabla^2 c), \quad (1)$$

où M est un coefficient de diffusion homogène au carré d'une longueur divisé par un temps (i.e. de dimension L^2/T) et $\sqrt{\gamma}$ donne la longueur des régions de transition entre les domaines. Ici, $\partial/\partial t$ est la dérivée partielle temporelle et ∇^2 est le laplacien en n dimensions. De plus, la quantité $\mu = c^3 - c - \gamma \nabla^2 c$ est identifiée à un potentiel chimique.

2.1.1 Modélisation de l'équation

Supposons que c évolue suivant une dynamique conservatrice où le flux de matière J satisfait

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot J \quad (2)$$

où J suit une loi de diffusion généralisée tel que

$$J = -M \nabla \mu$$

(μ est le potentiel chimique). Soit F l'énergie libre totale du système. Par définition, $\mu = \frac{\delta F}{\delta c}$ avec

$$F[c] = \int_{\Omega} (f(c) + \frac{\gamma}{2} |\nabla c|^2) dx$$

La variation fonctionnelle $\frac{\delta F}{\delta c}$ représente la dérivée de $F[c]$ par rapport à $c(x)$; c'est-à-dire la sensibilité de F à une perturbation très petite $c \rightarrow c + \epsilon \eta$ où $\eta(x)$ est une fonction arbitraire nulle sur le bord de Ω . On a donc :

$$F[c + \epsilon \eta] = \int_{\Omega} (f(c + \epsilon \eta) + \frac{\gamma}{2} |\nabla(c + \epsilon \eta)|^2) dx$$

En utilisant le développement de Taylor à l'ordre 1, on a :

$$f(c + \epsilon \eta) = f(c) + \epsilon f'(c) \eta + o(x^2)$$

Alors on a :

$$F[c + \epsilon\eta] = \int_{\Omega} (f(c) + \epsilon f'(c)\eta + \frac{\gamma}{2} |\nabla(c)|^2 + \gamma \epsilon (\nabla c \cdot \nabla \eta) + \frac{\gamma}{2} |\nabla \eta|^2 + o(x^2)) dx$$

Dans la suite, $|\nabla \eta|^2$ est rangé dans $o(x^2)$.

$$F[c + \epsilon\eta] - F[c] = \epsilon \int_{\Omega} (\eta f'(c) + \gamma (\nabla c \cdot \nabla \eta)) dx + o(x^2)$$

En utilisant la formule de green avec $\eta|_{\partial\Omega} = 0$ on obtient :

$$F[c + \epsilon\eta] - F[c] = \epsilon \int_{\Omega} (f'(c) - \gamma(\Delta c)) \eta dx + o(x^2)$$

On peut donc prendre

$$F[c + \epsilon\eta] - F[c] = \epsilon \int_{\Omega} (f'(c) - \gamma(\Delta c)) \eta dx$$

Par hypothèse, la variation fonctionnelle est proportionnelle à η . On déduit donc que :

$$\frac{\delta F}{\delta c} = f'(c) - \gamma \Delta c \quad (3)$$

Soit

$$J = -M \nabla(f'(c) - \gamma \Delta c)$$

. On note $f(c) = \frac{1}{4}(c^2 - 1)^2$ et donc

$$f'(c) = c^3 - c$$

Ce qui conduit à

$$J = -M \nabla(c^3 - c - \gamma \nabla^2 c)$$

L'équation de **Cahn-Hilliard** s'écrit donc par substitution dans (2) :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = M \nabla^2(c^3 - c - \gamma \nabla^2 c) \quad (4)$$

2.1.2 Modèle mathématique

Dans la suite de ces travaux, le modèle considéré s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} = M \nabla^2(c^3 - c - \gamma \nabla^2 c) \text{ sur } \Omega \\ c(., 0) = c_0(\mathbf{x}) \text{ sur } \Omega \\ \nabla c \cdot \vec{n}|_{\partial\Omega} = (\nabla^3 c) \cdot \vec{n}|_{\partial\Omega} = 0 \end{cases}$$

Méthode numérique

La résolution de cette EDP repose sur deux concepts principaux :

2.2 Discrétisation spatiale (différences finies pour le Laplacien)

L'opérateur laplacien $\nabla^2 c$ est discrétisé à l'aide de la méthode des différences finies centrales sur une grille régulière :

$$\nabla^2 c \approx \frac{c_{i+1,j} + c_{i-1,j} + c_{i,j+1} + c_{i,j-1} - 4c_{i,j}}{h^2},$$

où h est la taille du pas spatial. Cela permet d'approcher la dérivée seconde en tenant compte des voisins immédiats d'un point de la grille.

2.2.1 Discrétisation temporelle (méthode d'Euler explicite)

La dérivée temporelle est discrétisée par une méthode de explicite :

$$c^{n+1} = c^n + \Delta t \cdot \nabla^2 \left((c^n)^3 - c^n - \gamma \nabla^2 c^n \right),$$

où :

- c^n est la concentration à l'instant t^n ,
- Δt est le pas de temps.

Cette méthode est simple mais nécessite des pas de temps très petits (Δt) pour garantir la stabilité.

2.2.2 Condition de stabilité CFL (Courant-Friedrichs-Lewy)

Pour les schémas explicites, une condition de stabilité stricte lie Δt et h . Plus précisément, la condition CFL impose que :

$$\Delta t \leq \frac{h^2}{2 \cdot \max(f''(c))},$$

où $f(c)$ représente le terme non linéaire, et $f''(c)$ est sa dérivée seconde. Ici, le terme dominant est diffusif (Laplace), donc la condition se simplifie pour un Laplacien pur comme :

$$\Delta t \leq \frac{h^2}{4}.$$

Preuve :

Le terme non linéaire $f(c)$ est défini par $f'(c) = c^3 - c$. On a donc $f''(c) = 3c^2 - 1$

Maximisation de $f''(c)$

Pour déterminer la valeur maximale de $f''(c)$, il est utile d'analyser cette expression en fonction de c . On remarque que $f''(c)$ dépend uniquement de c^2 , ce qui signifie que le terme dominant est $3c^2$.

On maximise donc $3c^2 - 1$ en choisissant les valeurs de c telles que $c \in [-1, 1]$. L'intervalle $[-1, 1]$ est souvent utilisé pour les systèmes normalisés ou lorsqu'on travaille avec des variables initialisées aléatoirement dans cet intervalle (comme ce sera le cas ici).

En évaluant $f''(c)$ aux bornes $c = \pm 1$, $f''(1) = 3(1)^2 - 1 = 2$, $f''(-1) = 3(-1)^2 - 1 = 2$.

Ainsi, $\max(f''(c)) = 2$.

D'où la condition CFL précédemment évoquée.

- Cela signifie que si le pas spatial h diminue (raffinement de la grille), alors le pas de temps Δt doit être réduit quadratiquement pour maintenir la stabilité.
- En pratique, cette exigence conduit à des pas de temps très petits pour les maillages fins, ce qui rend la méthode coûteuse en calcul.

La stabilité d'un schéma numérique implique sa **convergence**, ce qui assure que, lorsque les pas de temps Δt et le pas spatial h tendent vers zéro, la solution numérique se rapproche de la solution exacte de l'équation aux dérivées partielles (EDP). Cela signifie qu'en choisissant des valeurs suffisamment petites pour Δt et h , tout en satisfaisant la condition de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL), les solutions approchées convergeront vers la solution analytique du problème.

2.3 Simulation numérique

2.3.1 Cas pratique

On considère un problème modélisant la séparation de deux phases immiscibles, l'eau et l'huile, dans un mélange. Nous utilisons l'équation de Cahn-Hilliard pour simuler l'évolution de la concentration de l'huile dans l'eau au fil du temps, où les valeurs proches de $+1$ représentent l'huile et celles proches de -1 représentent l'eau.

Données du problème :

- la longueur des régions de transition entre les domaines est $\sqrt{\gamma} = 10^{-2}$
- taille de la grille : $n = 128$ (grille 128×128)
- pas temporel $\Delta t = 10^{-6}$
- pas spatial $h = 1/128 = 0.0078125$
- Initialisation de c : Valeurs aléatoires comprises entre -1 et 1 .

Objectif :

Simuler la séparation de l'eau et de l'huile dans un mélange en utilisant l'équation de Cahn-Hilliard et visualiser l'évolution de cette séparation dans le temps à l'aide d'une animation.

2.3.2 Outils

Pour cette simulation, le langage de programmation python est utilisé, notamment ses packages **numpy** et **matplotlib**.

3 Résultats et discussions

3.1 Résultats

Dans cette section, nous présentons les résultats obtenus à partir de la simulation de la séparation des phases d'eau et d'huile, en utilisant le modèle de Cahn-Hilliard. Les figures suivantes présentent l'évolution de la concentration au fil du temps.

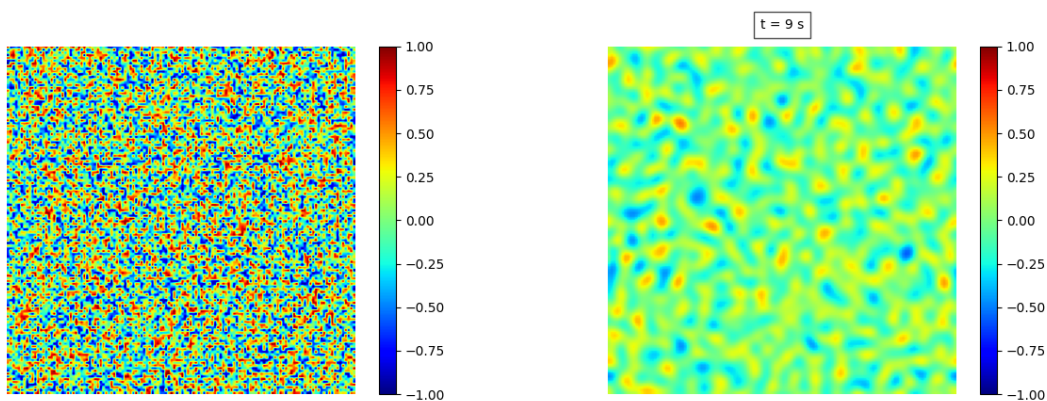
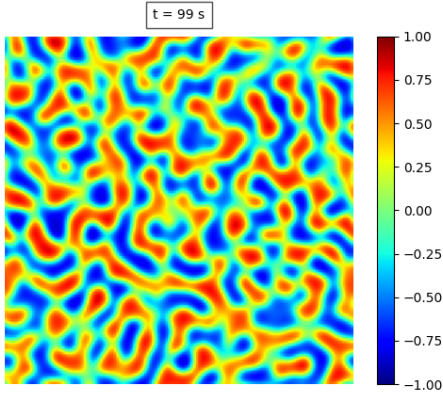
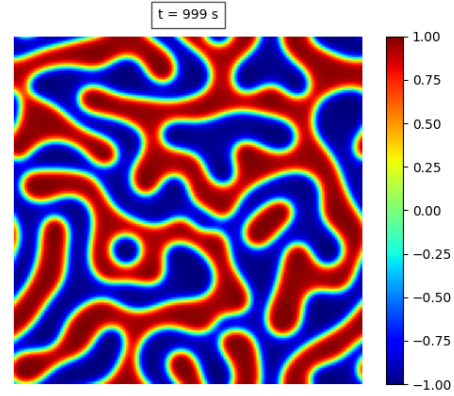


FIGURE 1 – $t = 0s$

FIGURE 2 – $t = 9s$

3.2 Discussion

Les résultats de la simulation montrent clairement l'évolution de la séparation des phases d'eau et d'huile dans le mélange au fil du temps. À partir de l'état initial, où la concentration de l'huile est répartie de manière aléatoire dans l'eau, nous observons une dynamique de séparation

FIGURE 3 – $t = 99s$ FIGURE 4 – $t = 999s$

progressive, avec la formation de deux domaines distincts correspondant à l'eau et à l'huile. Ce phénomène de séparation des phases est conforme aux attentes théoriques du modèle de Cahn-Hilliard, qui décrit l'évolution de systèmes binaires immiscibles.

De plus, au fur et à mesure que la simulation avance, la concentration c converge vers deux valeurs extrêmes, $c \approx -1$ pour l'eau et $c \approx +1$ pour l'huile. Ce comportement traduit la minimisation de l'énergie libre du système, qui favorise la séparation des deux phases afin de minimiser l'interface entre elles. Ainsi, les résultats confirment que le modèle de Cahn-Hilliard capture correctement la dynamique de séparation des phases, avec une évolution vers une configuration stable où les deux phases sont nettement distinctes.

Comparaison avec des solutions analytiques ou expérimentales

Bien que la simulation ne fournisse pas directement une solution analytique dans ce cas, les résultats sont cohérents avec les attentes théoriques d'un système de séparation de phases dans un mélange. Les tendances observées dans la simulation, telles que la séparation progressive des phases et la minimisation de l'interface, sont en accord avec les phénomènes physiques attendus. Pour valider ces résultats dans un contexte expérimental, il serait pertinent de les comparer à des données réelles sur la séparation de l'eau et de l'huile, ce qui permettrait de confirmer l'exactitude du modèle et d'affiner les paramètres de simulation.

3.3 Limites et perspectives

Une limitation notable de cette simulation réside dans l'approximation numérique, notamment en ce qui concerne la gestion de la taille de la grille et la précision des calculs. Bien que les résultats soient convaincants, une augmentation de la résolution spatiale pourrait améliorer la précision de la simulation. Par ailleurs, l'exploration de schémas numériques plus avancés, tels que ceux utilisant des méthodes de discrétisation adaptative, pourrait contribuer à une meilleure modélisation de la séparation des phases. Enfin, des études futures pourraient intégrer des facteurs externes, comme des gradients de température ou de pression, pour étudier l'impact de ces variables sur la dynamique de séparation.

4 Conclusion

En conclusion, les simulations réalisées ont permis de modéliser avec succès la séparation des phases d'eau et d'huile en utilisant l'équation de Cahn-Hilliard. Les résultats obtenus montrent une séparation progressive des deux phases, avec la formation de domaines distincts correspondant à l'eau et à l'huile, en accord avec les prédictions théoriques. Bien que cette approche numérique présente des limites liées à la résolution spatiale et à l'approximation des interfaces,

elle offre un cadre efficace pour l'étude de la séparation de phases. Pour des travaux futurs, il serait intéressant d'explorer l'impact de forces externes sur le processus de séparation et d'implémenter des modèles plus complexes pour une meilleure précision des simulations.

Références

- [1] Cahn–Hilliard equation. https://en.wikipedia.org/wiki/Cahn-Hilliard_equation. Wikipédia.
- [2] Phase (matter). [https://en.wikipedia.org/wiki/Phase\(matter\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Phase(matter)), Wikipédia.
- [3] Nicolas Champagnat. *Différences finies et analyse numérique matricielle*, édité par HAL Open Science, 2010, p17-p21.