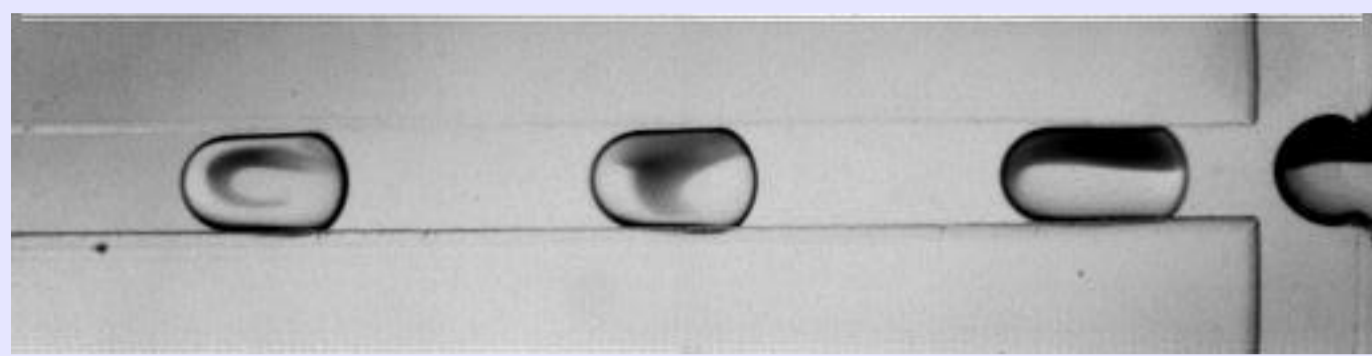


Motivation

Microfluidique : discipline en pleine expansion depuis 10 ans

- microcanaux : transport de nanolitres de fluides
- applications : décryptage du génome [1], utilisation de microgouttes comme des réacteurs chimiques [2]



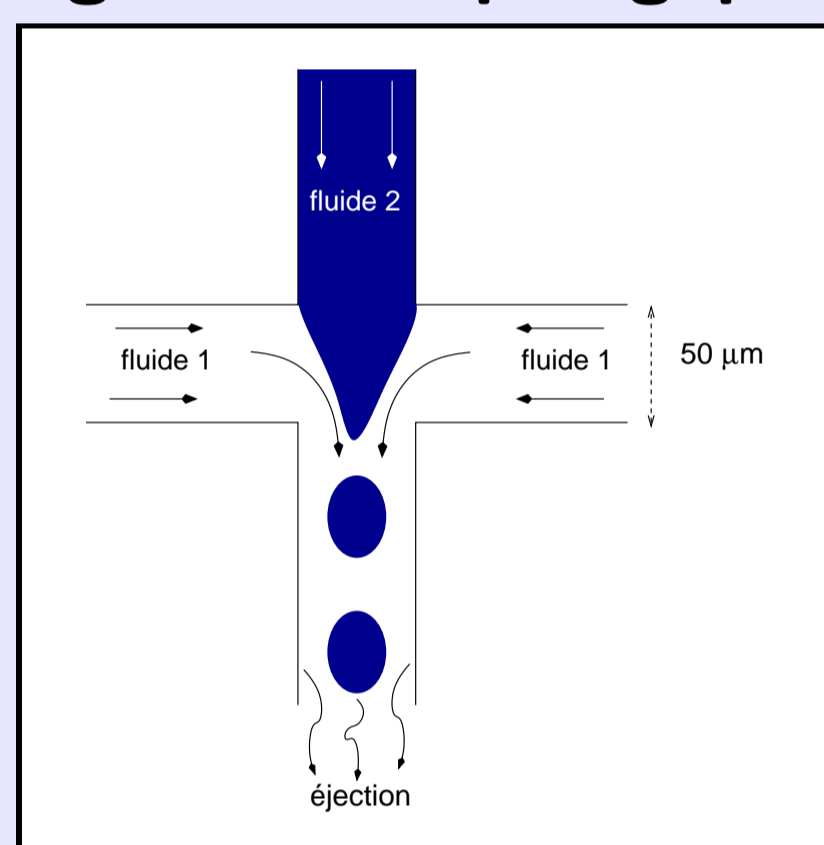
[3]

Besoins : mieux connaître la dynamique des fluides dans les gouttes lors de leur évolution dans les microcanaux, dans une perspective de contrôle et de mélange des écoulements

Contexte physique

- Écoulements bifluïdes immiscibles instationnaires
- Faible nombre de Reynolds : $Re < 1$
- Fluides incompressibles, visqueux, homogènes, newtoniens
- Interface ponctuelle; **Tension de surface** constante
⇒ **Modèle de Stokes pour l'écoulement**

- émulsions monodisperses, création de gouttes
→ **changements topologiques**



⇒ **Méthode Level Set pour suivre les interfaces**

Formulation Level Set

- écoulement donné par Stokes monofluïde avec η variable

$$\text{div}(2\eta Du) - \nabla p = \sigma \kappa \delta(\varphi) n \quad (1)$$

$$\text{div}(u) = 0 \quad (2)$$

où $Du = (\nabla u + \nabla^T u)/2$, σ est le coefficient de tension de surface, n est la normale à l'interface, κ est la courbure de l'interface et $\delta(\varphi)$ est la fonction de Dirac [4] [5].

- la viscosité η est variable, liée à φ :

$$\eta = \eta(\varphi) = \begin{cases} \eta_1 & \text{dans le fluide 1} \\ \eta_2 & \text{dans le fluide 2} \end{cases} \quad (3)$$

- évolution de l'interface grâce à la fonction level set φ :

$$\varphi_t + u \cdot \nabla \varphi = 0 \quad (4)$$

φ est une **fonction distance signée** ⇒ **Redistanciation** [6]

Résolution numérique

- simulations 2D, géométrie en croix

- Conditions aux limites (CL)

◇ parois :

$$\begin{cases} u \cdot \tau = \alpha u_s(\eta) + \beta L_s(\eta) \frac{\partial(u \cdot \tau)}{\partial n_w} \\ u \cdot n_w = 0 \end{cases} \quad (5)$$

où n_w et τ sont respectivement la normale et la tangente à la paroi, u_s est la vitesse de glissement et L_s est la "longueur de glissement". Condition mixte (5) pour traiter les cas où l'interface touche la paroi ($\alpha \neq 0$ et $\beta = 0$: Dirichlet non homogène) ou non ($\alpha = 0$ and $\beta \neq 0$: Navier)

◇ CL classiques en entrée/sortie

- Discrétisation en temps :

$$\begin{aligned} \kappa^n &= \text{div} \frac{\nabla \varphi^n}{|\nabla \varphi^n|}, \\ -\text{div}(2\eta(\varphi^n)(Du)^{n+1}) + \nabla p^{n+1} &= -\sigma \kappa^n \nabla(H(\varphi^n)), \\ \text{div}(u^{n+1}) &= 0, \\ \frac{\varphi^{n+1} - \varphi^n}{\Delta t} + u^{n+1} \cdot \nabla \varphi^n &= 0. \end{aligned}$$

- Discrétisation en espace : méthode volume-fini sur maillage décalé (u, p)

- Solvers

- ◇ Stokes : Lagrangien Augmenté
- ◇ Transport : schéma WENO 5 [7]

Condition de stabilité numérique

Le terme de tension de surface dans (1) induit un couplage fortement non linéaire entre u et φ .

Une analyse de stabilité numérique [8], liée aux ondes capillaires pour (1), montre que le pas de temps de discrétisation Δt_σ lié à la tension de surface doit vérifier une contrainte du type :

$$\Delta t_\sigma \leq \frac{\eta}{\sigma} \Delta x \quad (6)$$

Le pas de temps de la simulation doit de plus prendre en compte la composante convective classique $\Delta t_c = \Delta x / \max(u)$ si bien qu'au final :

$$\Delta t = \min(\Delta t_c, \Delta t_\sigma) \quad (7)$$

Or, pour nos applications, les paramètres η , σ et les vitesses d'injection conduisent à

$$\Delta t_c = 100 \Delta t_\sigma \quad (8)$$

Une simulation avec tension de surface est donc 100 fois plus longue qu'une simulation sans ce terme.

Relaxation de la contrainte

On propose une méthode de splitting pour avoir une condition de stabilité moins restrictive sur Δt_σ . Le problème global (1)-(4) :

$$\begin{cases} \text{Problème de Stokes} \\ \text{div}(2\eta Du) - \nabla p = \sigma \kappa_0 \delta(\varphi) n \text{ et } \text{div}(u) = 0 \text{ sur } \Omega \\ + u = u_{inj} \text{ sur } \partial\Omega_{inj} \\ \text{couplé au transport} \\ \varphi_t + u \nabla \varphi = 0 \text{ sur } \Omega \end{cases} \quad (9)$$

est séparé en deux problèmes basés sur la décomposition $u = u_1 + u_2$ où u_1 est la vitesse de l'écoulement induit par l'injection et u_2 est la vitesse induite par la tension de surface. Le premier problème n'a pas de tension de surface mais dispose d'une injection non nulle.

$$\begin{cases} \text{Problème de Stokes} \\ \text{div}(2\eta Du_1) - \nabla p_1 = 0 \text{ et } \text{div}(u_1) = 0 \text{ sur } \Omega \\ + u_1 = u_{inj} \text{ sur } \partial\Omega_{inj} \\ \text{couplé au transport} \\ \varphi_t + u_1 \nabla \varphi = 0 \text{ sur } \Omega \end{cases} \quad (10)$$

Le second problème prend en compte la tension de surface mais il n'y a pas d'injection.

$$\begin{cases} \text{Problème de Stokes} \\ \text{div}(2\eta Du_2) - \nabla p_2 = \sigma \kappa_0 \delta(\varphi) n \text{ et } \text{div}(u_2) = 0 \text{ sur } \Omega \\ + u_2 = 0 \text{ sur } \partial\Omega_{inj} \\ \text{couplé au transport} \\ \varphi_t + u_2 \nabla \varphi = 0 \text{ sur } \Omega \end{cases} \quad (11)$$

Algorithme :

Donnée : φ_0

Boucle en temps

Do $n = 0, N_{max}$

Splitting step n°1

calculer u_n solution du problème de Stokes (10)

calculer $\varphi_{n+1/2} = \varphi_n - \Delta t^n L(u_n, \varphi_n)$ avec $\Delta t^n = \frac{\Delta x}{\max(u_n)}$

Splitting step n°2 : itératif

$\varphi_{n+1/2}^0 = \varphi_{n+1/2}$

Do $k = 0, K_{max} - 1$ avec K_{max} t.q. $\sum_{k=1, K_{max}} \Delta t^k = \Delta t^n$

calculer $u_{n+1/2}^{k+1}$ solution du problème de Stokes (11)

calculer $\varphi_{n+1/2}^{k+1} = \varphi_{n+1/2}^k - \Delta t^{k+1} L(u_{n+1/2}^{k+1}, \varphi_{n+1/2}^k)$

End Do

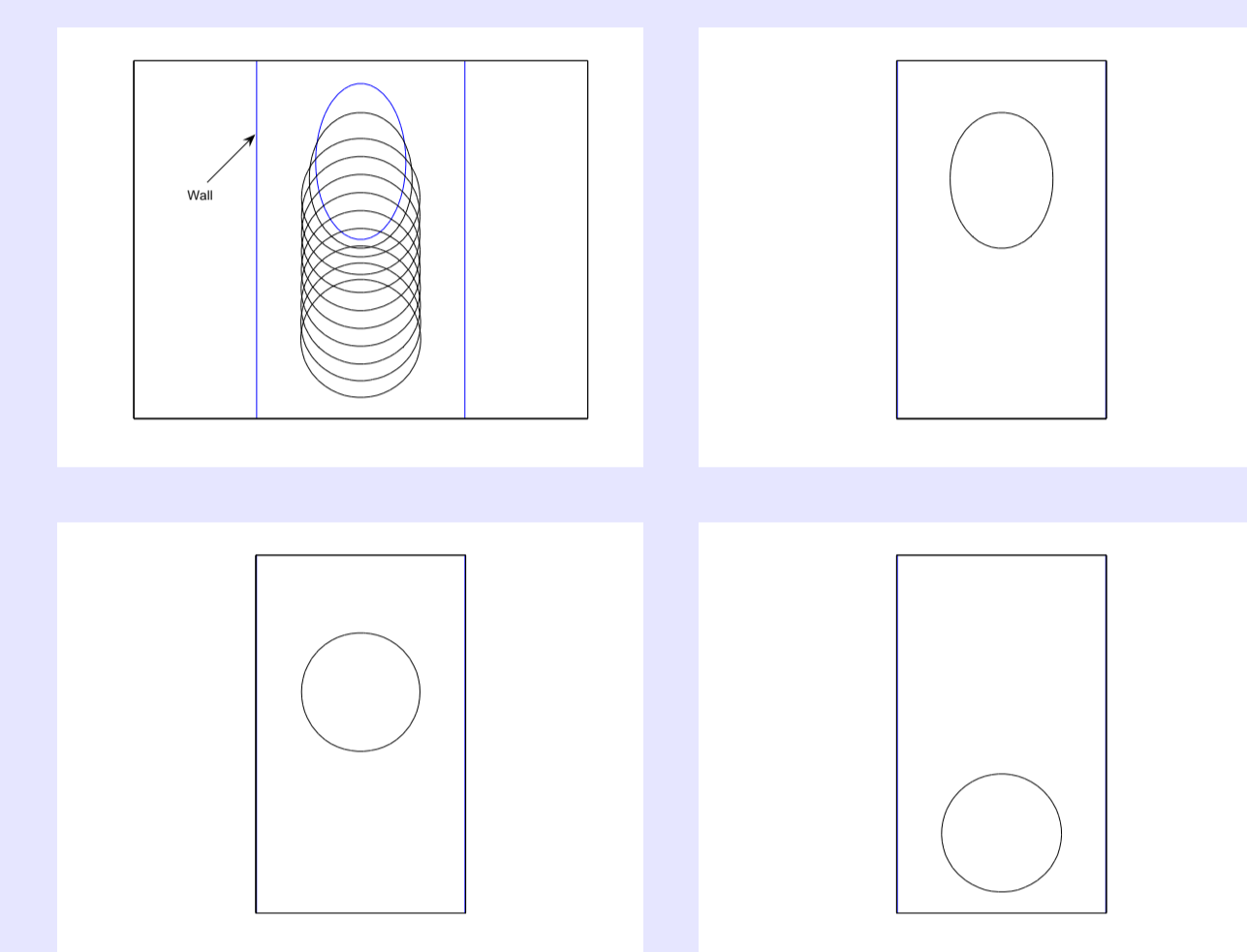
Actualisation

$\varphi_{n+1} = \varphi_{n+1/2}^{K_{max}}$

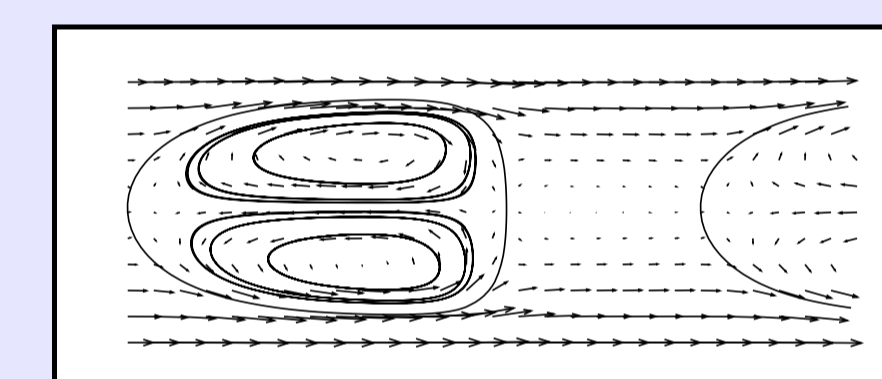
End Do

D'après (6), on doit prendre $\Delta t^k \sim \frac{\eta}{\sigma} \Delta x \sim \frac{\Delta t^n}{100}$ mais en pratique, on peut relaxer en $\Delta t^k \sim \frac{\Delta t^n}{10}$ [8].

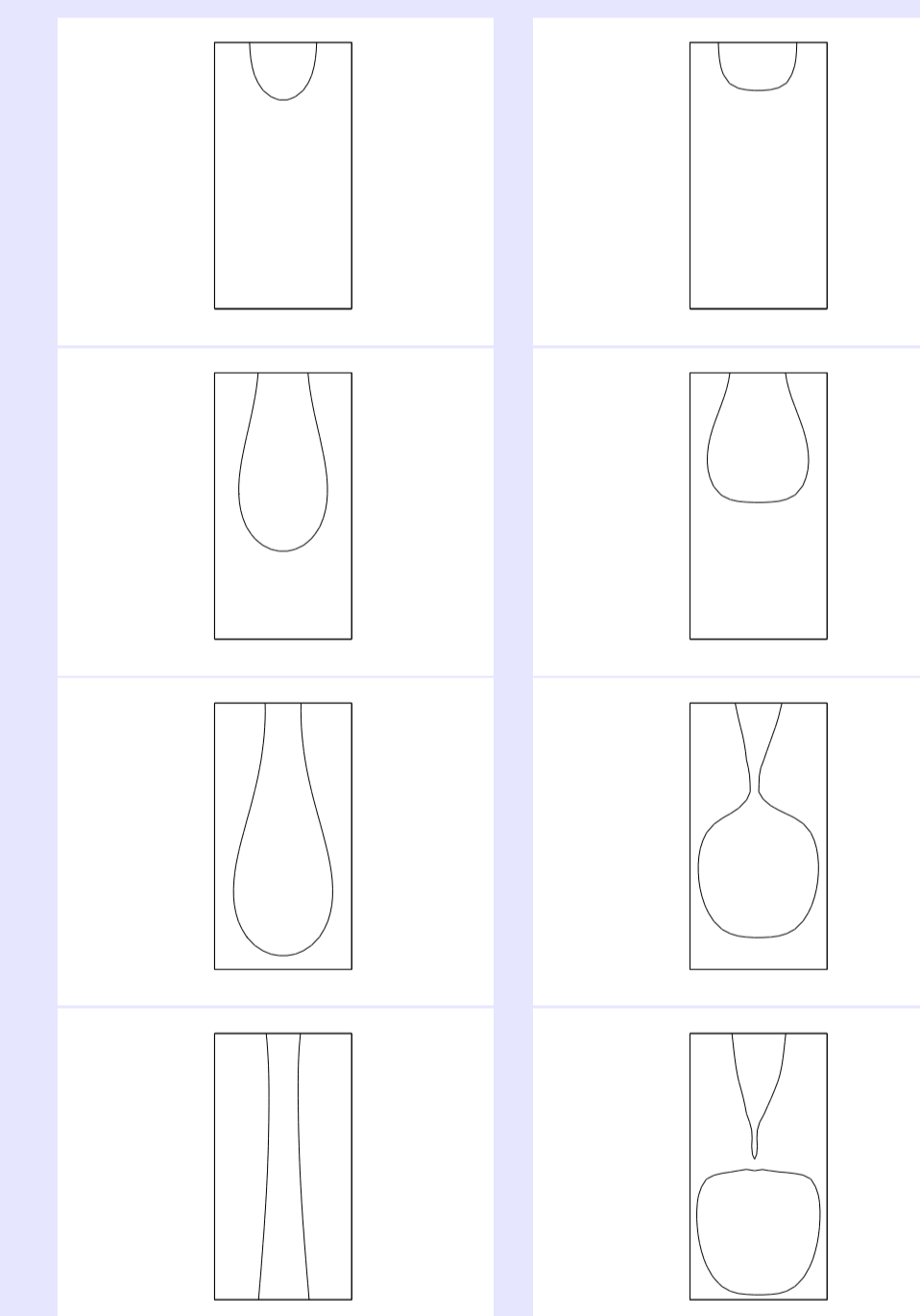
Résultats numériques



Simulation de l'évolution d'une ellipse non confinée. En haut à gauche, l'interface initiale (en bleu) et les suivantes (en noir). Les trois autres images montrent l'interface à $t = 1.3, 1.7$ et 17 ms et la convergence vers la forme asymptotique circulaire.



Champ de vitesse dans le référentiel de la goutte et lignes de courants



Jet microfluidique avec un modèle de tension de surface 2D (à gauche) et un modèle 3D (à droite, avec hypothèse d'axi-symétrie)

Références

- [1] A. J. DEMELLO. *DNA amplification moves on*, Nature, Vol. 422, 6 March, 2003
- [2] M. JOANICOT AND A. ADJARI. *Droplet Control for Microfluidics*, Science, Vol. 309, 5 August, 2005
- [3] A. COLIN AND G. CRISTOBAL. *Photos prises au LOF-Rhodia-CNRS*, communication personnelle
- [4] S. OSHER AND J. SETHIAN. *Fronts propagating with curvature-dependent speed : algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations*, J. Comput. Phys., Vol. 79, 12-49, 1988
- [5] M. SUSSMAN, P. SMERKA AND S. OSHER. *A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow*, J. Comput. Phys., Vol. 114, 146-159, 1994
- [6] S. OSHER AND R. FEDKIW. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Interfaces*, Applied Mathematical Sciences - Vol. 153, Springer, 2003
- [7] G-S. JIANG AND D. PENG. *Weighted ENO schemes for Hamilton-Jacobi equations*, SIAM J. Sci. Comput., Vol. 21, No. 6, 2126-2143, 2000
- [8] C. GALUSINSKI AND P. VIGNEAUX. *A splitting method for computing surface-tension driven flows, in preparation*, (2006).