

# Simulations numériques en microfluidique.

Applications en Chimie et Biologie

Paul Vigneaux

UMPA - ENS Lyon

[Paul.Vigneaux@math.cnrs.fr](mailto:Paul.Vigneaux@math.cnrs.fr)  
[www.umpa.ens-lyon.fr/~pvigneau/](http://www.umpa.ens-lyon.fr/~pvigneau/)

avec D. Bresch, A. Colin, G. Cristobal, C. Galusinski, E. Oudet

10 Novembre 2009

1ères journées du GdR CALCUL

Institut Henri Poincaré, Paris

# Plan

## Contexte et Objectifs

## Quelques Approches numériques pour le suivi d'interface

- Méthodes pour les interfaces mobiles

- Méthode Level Set et outils associés

## Simulation d'écoulements avec tension de surface

- Modèles et résolution numérique

- Une condition de stabilité généralisée

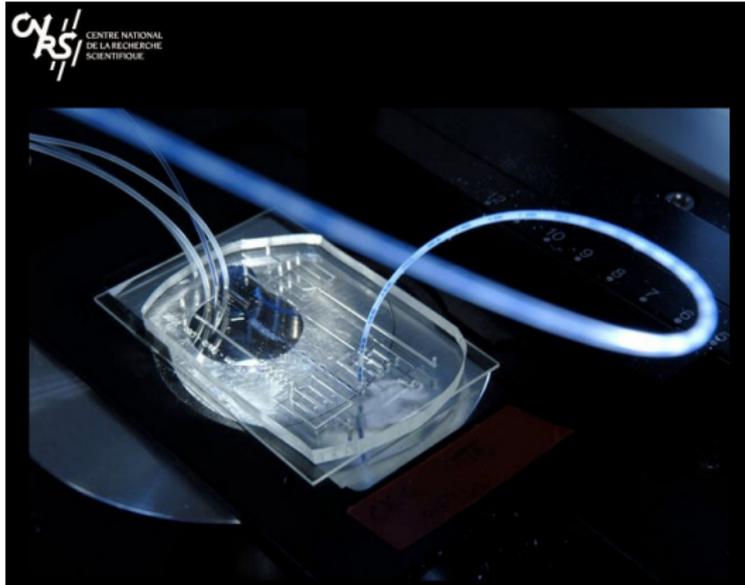
## Applications

- Microgouttes pour la chimie

- Dynamique de cellules

## Conclusions

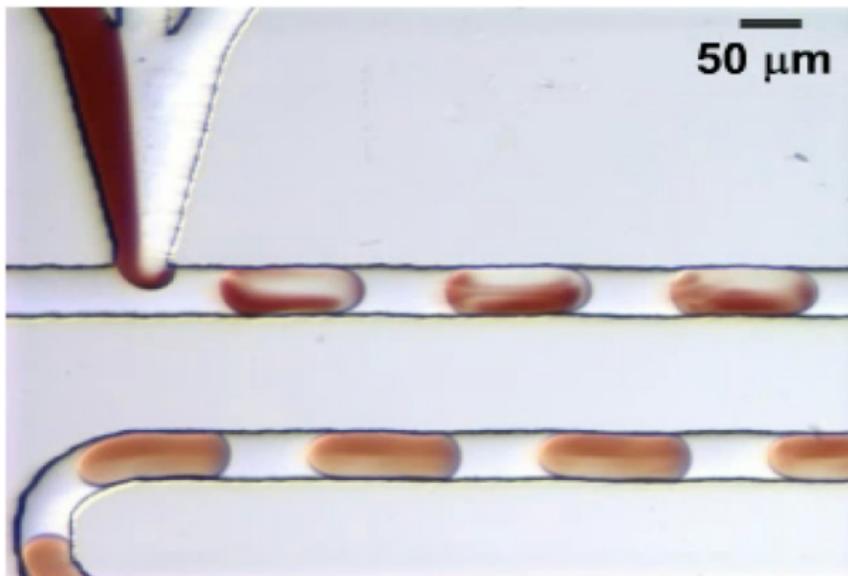
# Des microcanaux pour manipuler les fluides



- ▶ Collaboration IMB et LOF, Rhodia–CNRS à Bordeaux :
- ▶ A. Colin, G. Cristobal, C. Galusinski

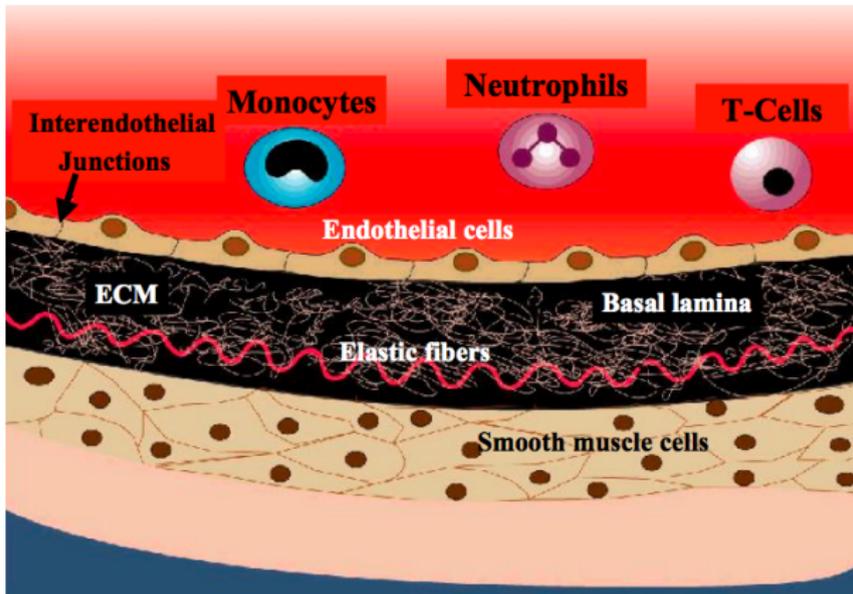
# De l'utilisation des gouttes en microfluidique

Song and Ismagilov, 2003 – Cinétique chimique rapide :  $10^{-3}$  s



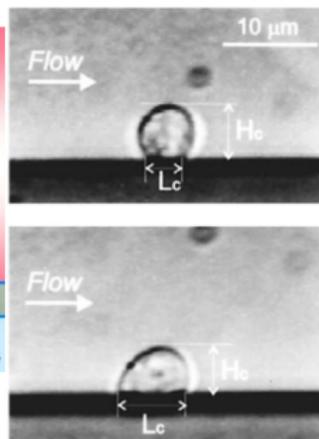
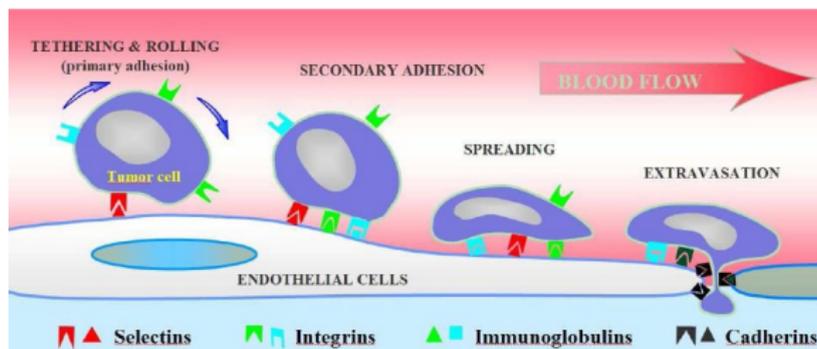
# Situations proches en biologie

Dynamique de cellules dans des canaux sanguins micrométriques ...



# Situations proches en biologie

... modéliser la motilité cellulaire (vision "hydrodynamique")



Expériences biophysiques : C. Verdier – LSP Grenoble .

Collaboration avec D. Bresch et E. Oudet (CNRS et U. de Savoie)

# Ce dont nous allons parler

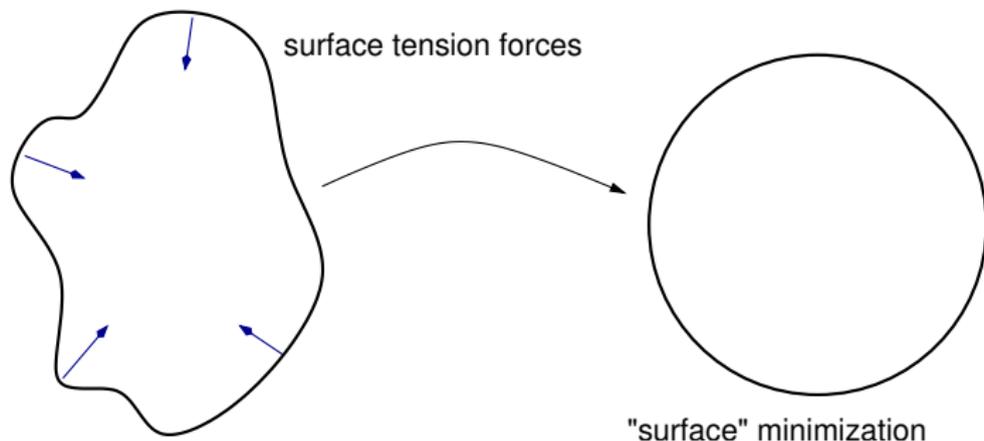
Simuler numériquement ces écoulements aux petites échelles :

- ▶ plusieurs milieux
- ▶ des interfaces mobiles (gouttes, cellules)
- ▶ sur lesquelles agissent des forces surfaciques
- ▶ Objectifs : explorer les dynamiques associées

## La Tension de surface dans le rôle titre

- ▶ C'est une force à l'interface entre 2 fluides
- ▶ Liée à la courbure de l'interface
- ▶ donc, prédominante en Microfluidique

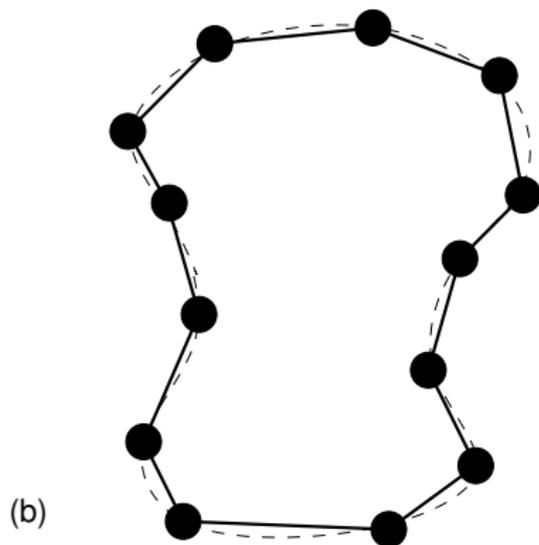
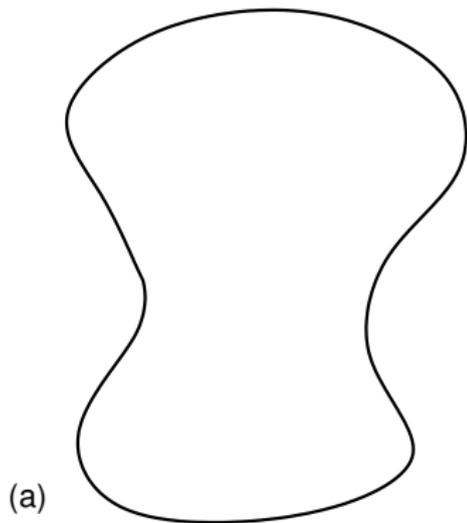
Effet de la tension de surface : Minimiser l'énergie de l'interface



# Comment simuler des interfaces mobiles ?

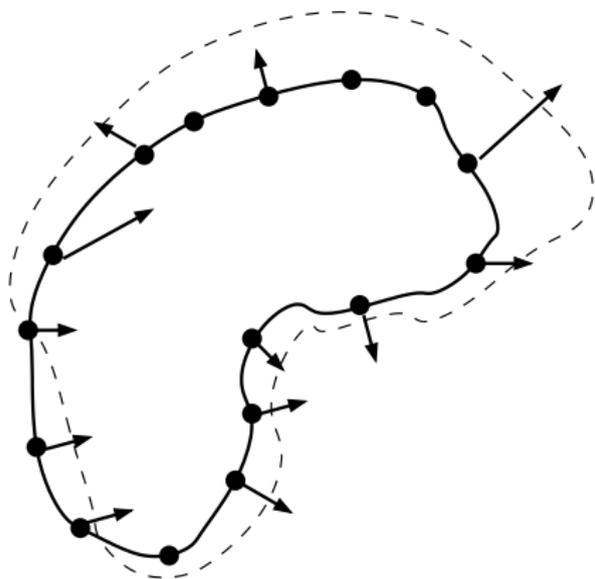
## Approche intuitive

Passage du continu au discret

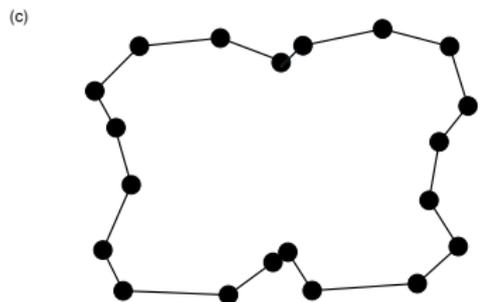
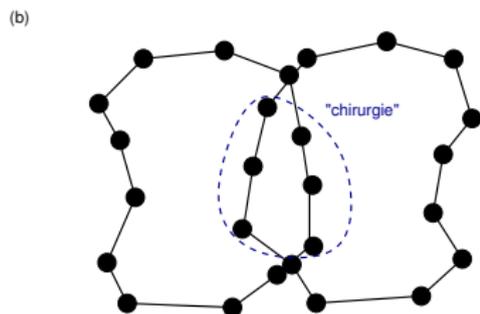
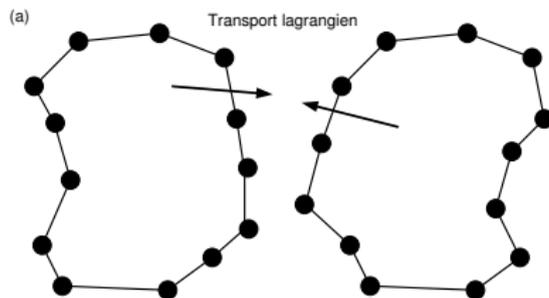


## Approche intuitive (suite)

Mise en mouvement de particules



- ▶ Exemple : **Front Tracking** (Glimm et Tryggvason)
- ▶ Suivi lagrangien
- ▶ implementation ardue [▶ Next](#)



## Une autre classe d'approche

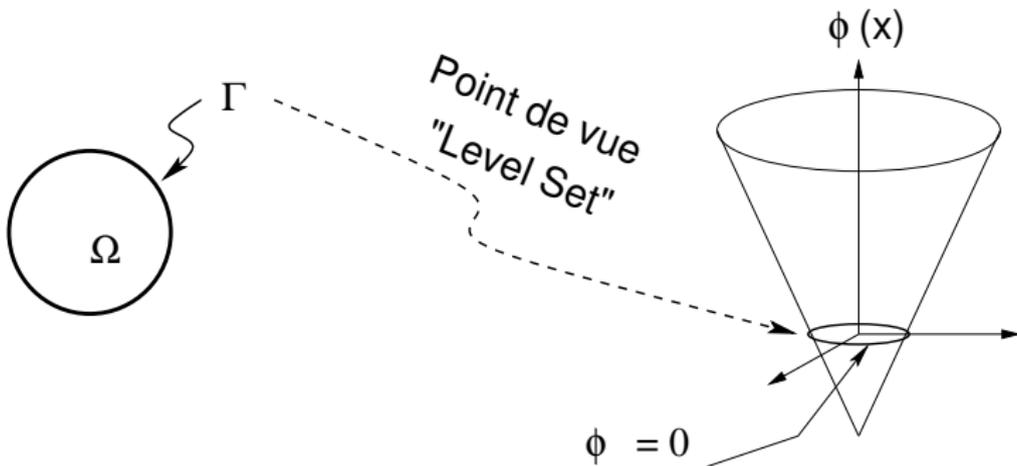
“Capture” de l'interface ...

... grâce à un champ  $\phi$  (global) qui la définit implicitement

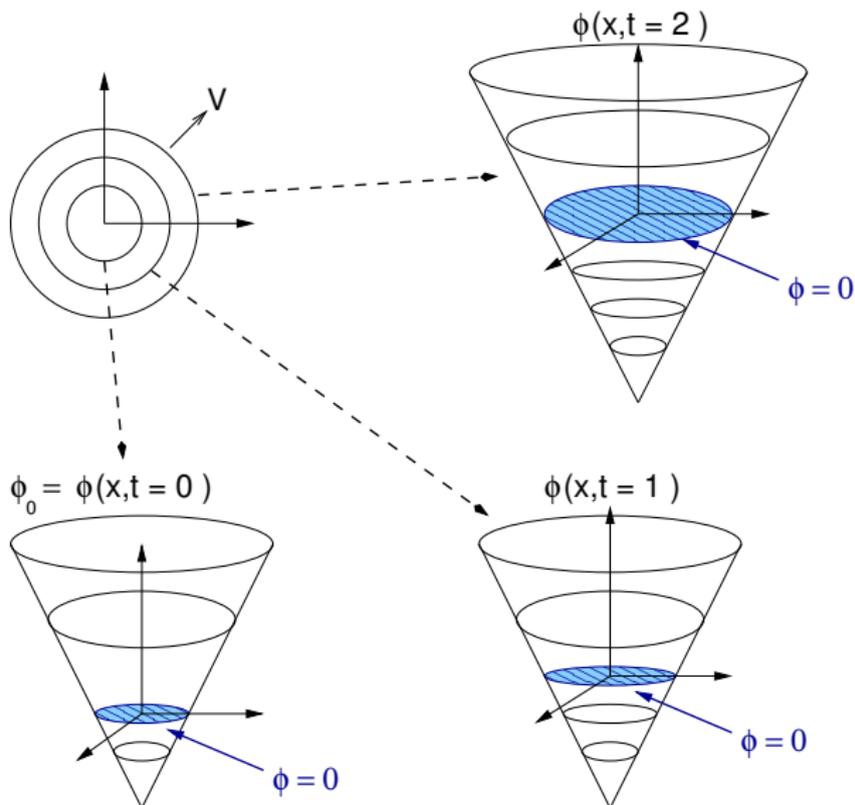
► Exemple : méthode Level Set



$\phi$  = fonction distance



# Evolution d'une interface avec la méthode Level Set



# Evolution d'une interface avec la méthode Level Set

Par résolution de l'équation Level Set

$$(\mathcal{T}) \begin{cases} \phi_t + V \cdot \nabla \phi = 0 \\ \phi(x, t = 0) \end{cases} \quad \text{donné tq} \quad \Gamma(t = 0) = \{x | \phi(x, t) = 0\}$$

où  $V$  est une vitesse connue.

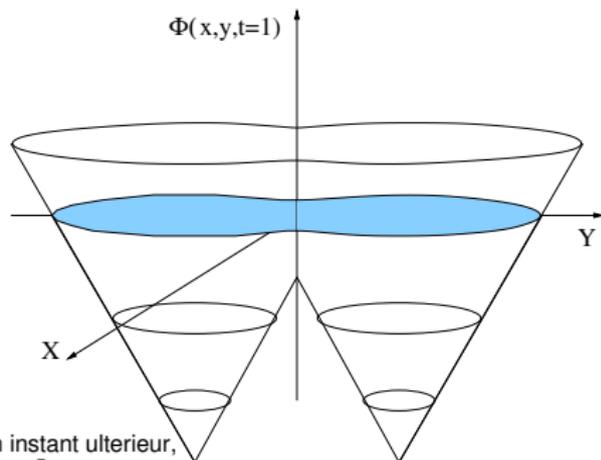
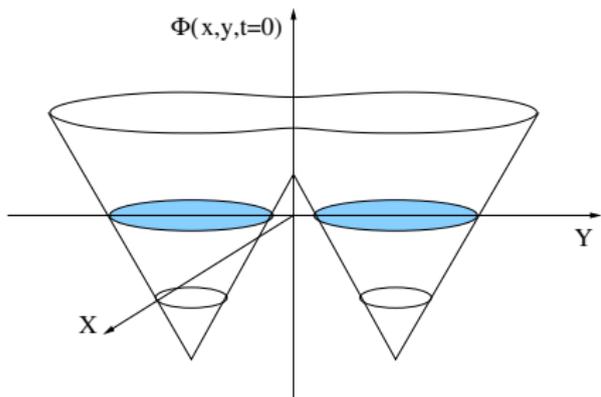
Discrétisation :

- ▶ espace : schémas WENO5 → bonne conservation de la masse
- ▶ temps : schémas RK 1 à 3

Atouts :

- ▶ implémentation simple
- ▶ gestion intrinsèque des changements topologiques

▶ Next



Deux fronts separes...

... qui, par changement topologique, forment a un instant ulterieur,  
une seule courbe materialisee par l'isovaleur '0' de  $\Phi$

Résolution globale de  $(\mathcal{T})$  sans particularisation des points de  $\Gamma$

## Quelques outils Level Set

- ▶ Géométrie de l'interface : normale et courbure

$$n = \frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \text{ et } \kappa = \nabla \cdot n$$

- ▶ Redistanciation
- ▶ “Traceur”
- ▶ etc.

# Modèle mathématique

1/

## Hypothèses

- ▶ fluides :
  - ▶ immiscibles
  - ▶ visqueux
  - ▶ newtoniens
  - ▶ homogènes
- ▶ écoulement incompressible et isotherme
- ▶ interface ponctuelle
- ▶ gravité négligeable
- ▶ coefficient de tension de surface constant

## Caractéristiques fréquentes en Microfluidique

- ▶ Faibles Reynolds, laminarité
- ▶ Interfaces de forme stationnaire.

## Navier-Stokes (NS) et formulation Level Set

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) - \nabla \cdot (2\eta D\mathbf{u}) + \nabla p = \sigma \kappa \delta(\phi) \mathbf{n} + F_{inter} \quad \forall (t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad \forall (t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad \forall (t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \Omega, \quad (3)$$

$$\rho(\phi) = \rho_1 + (\rho_2 - \rho_1)H(\phi) \quad (4)$$

$$\eta(\phi) = \eta_1 + (\eta_2 - \eta_1)H(\phi) \quad (5)$$

Chang et al. (1996), Sussman et al. (1994)

## Conditions aux limites

- ▶  $\partial\Omega_{inj}$  : Dirichlet
- ▶  $\partial\Omega_{out}$  : Dirichlet ou

$$\begin{cases} \frac{\partial(\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}_\Omega)}{\partial\mathbf{n}_\Omega} = 0 \\ \mathbf{u}\cdot\boldsymbol{\tau}_\Omega = 0 \end{cases} \quad (6)$$

- ▶  $\partial\Omega_{wall}$  : glissement et ligne triple

$$\begin{cases} \mathbf{u}\cdot\boldsymbol{\tau}_\Omega = \alpha u_s(\eta) + \beta L_s(\eta) \frac{\partial(\mathbf{u}\cdot\boldsymbol{\tau}_\Omega)}{\partial\mathbf{n}_\Omega} \\ \mathbf{u}\cdot\mathbf{n}_\Omega = 0 \end{cases} \quad (7)$$

# Généralisation

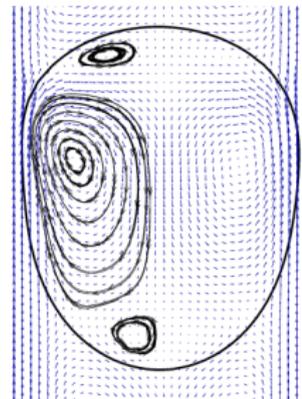
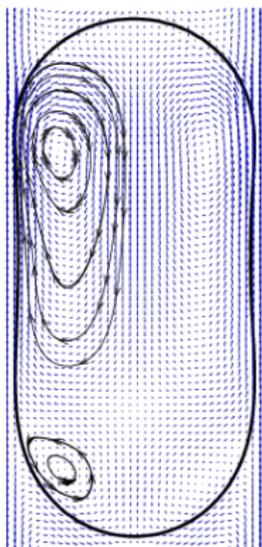
$$\Delta t_\sigma = \Delta t_\sigma(\rho, \eta) = \frac{1}{2} \left( c_2 \frac{\eta}{\sigma} \Delta x + \sqrt{\left( c_2 \frac{\eta}{\sigma} \Delta x \right)^2 + 4 c_1 \frac{\rho}{\sigma} \Delta x^3} \right) \quad (8)$$

- ▶  $\Delta t_\sigma(\rho, 0) = \Delta t_{BKZ}$  à haut Reynolds
- ▶  $\Delta t_\sigma(0, \eta) = \frac{\eta}{\sigma} \Delta x := \Delta t_{STK}$  à Reynolds modéré
- ▶ donc pour tout régime :

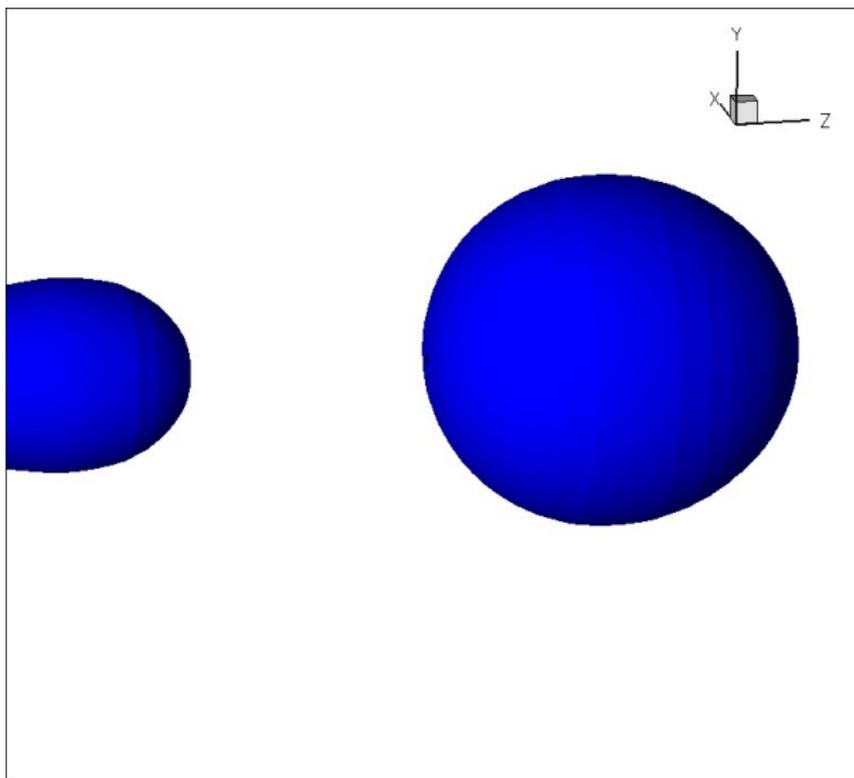
$$\Delta t_\sigma = \alpha \max(\Delta t_{STK}, \Delta t_{BKZ})$$
$$1 \leq \alpha \leq 1.62$$

- ▶ C. Galusinski et P. V. - JCP 2008

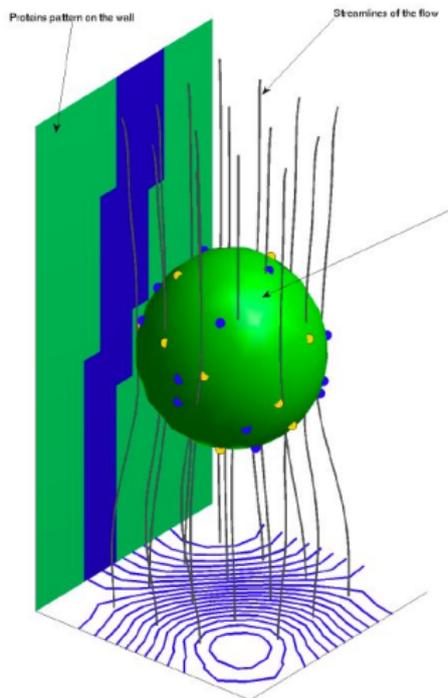
# Microgouttes - Divers régimes de mélange



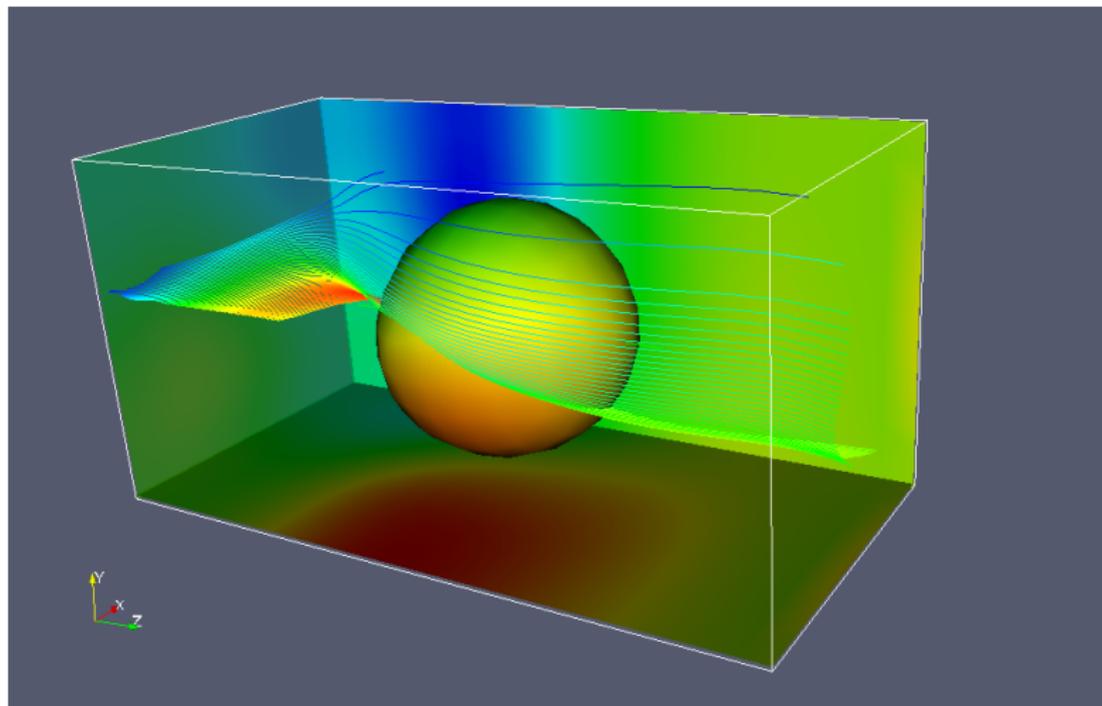
# Création de gouttes



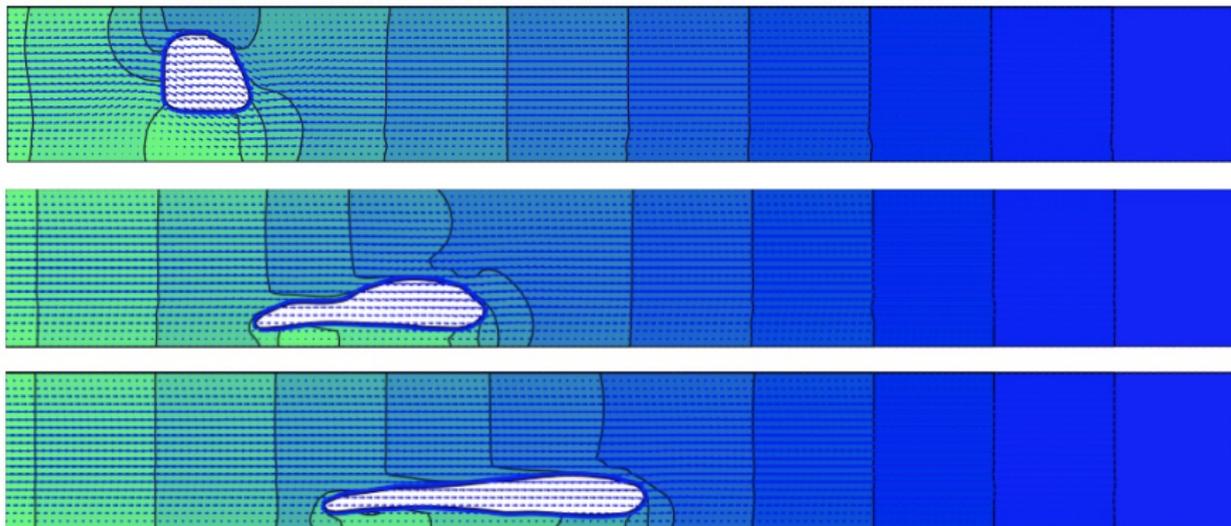
# Dynamique de cellules



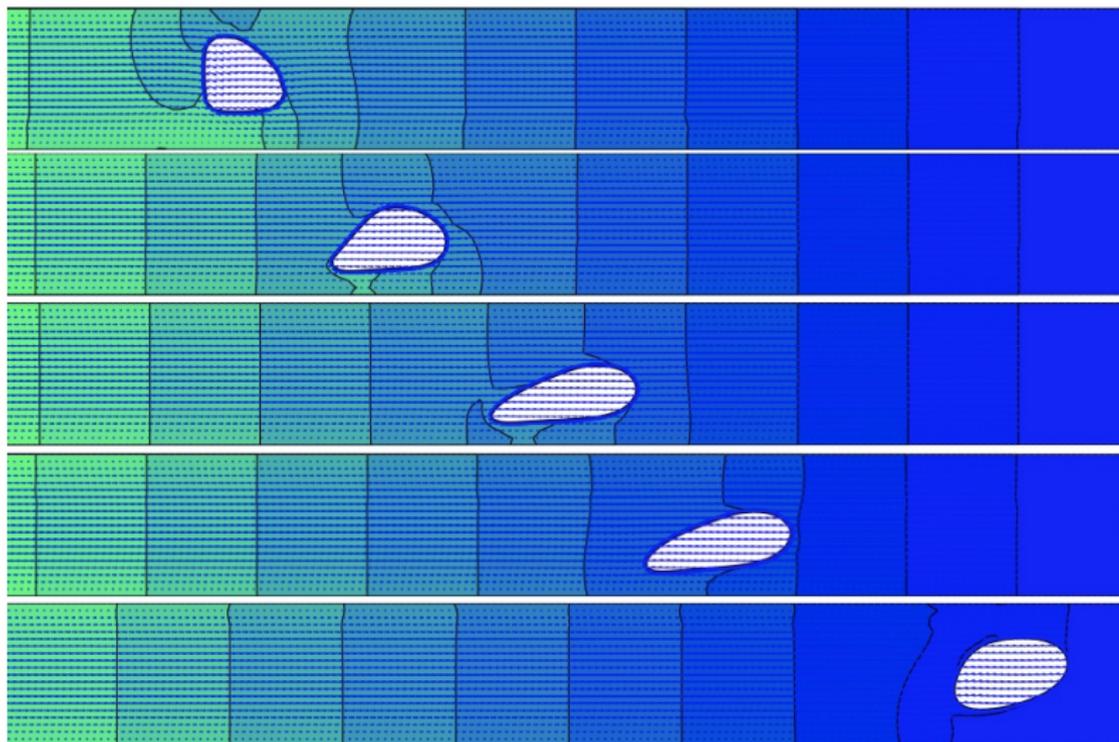
# Dynamique de cellules



# Dynamique de cellules – Attraction et Etalement



# Dynamique de cellules – Attraction et Decollement



# Conclusions

# Conclusions

- ▶ Développement d'approches mathématiques spécifiques pour les écoulements aux petites échelles
  - ▶ **Dérivation d'une condition de stabilité généralisée pour des écoulements bifluïdes avec tension de surface**
- ▶ Analyses validées par comparaison aux expériences physiques
- ▶ Application à l'étude de la
  - ▶ **dynamique de microgouttes**
    - ▶ mise à jour de différents régimes de mélange
    - ▶ création de gouttes
  - ▶ **dynamique de cellules** (comparez plus avant avec les exp.)
- ▶ **Ouvertures.** Modèles : de forces, non-newtoniens.

# References

- ▶ J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100(2) :335–354, 1992.
- ▶ 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.
- ▶ M. Sussman, P. Smereka and S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comput. Phys.*, Vol. **114**, 146–159, 1994.
- ▶ S. Osher and R. Fedkiw. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Interfaces*, 1<sup>st</sup>. Edition, Applied Mathematical Sciences, Vol. **153**, Springer, 2003.
- ▶ C. Galusinski and P. Vigneaux. On stability condition for bifluid flows with surface tension : application to microfluidics. *J. Comput. Phys.*, 227(12), 6140-6164, 2008.  
[Lien DOI :10.1016/j.jcp.2008.02.023](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2008.02.023)

Merci pour votre attention.

