HAL
open science

Écoulement de gouttes dans des microcanaux : simulations numériques et expériences

Annie Colin, Galder Cristobal, Cedric Galusinski, Khodor Khadra, Paul Vigneaux

To cite this version:

Annie Colin, Galder Cristobal, Cedric Galusinski, Khodor Khadra, Paul Vigneaux. Écoulement de gouttes dans des microcanaux : simulations numériques et expériences. CFM 2007 - 18ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2007, Grenoble, France. pp.CFM2007-1446. hal-00198752

HAL Id: hal-00198752

https://hal.science/hal-00198752v1

Submitted on 17 Dec 2007

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.

Écoulement de gouttes dans des microcanaux : simulations numériques et expériences

Annie COLIN, Galder CRISTOBAL

Rhodia Laboratoire du Futur
Unité Mixte Rhodia-CNRS, Université Bordeaux 1
178 Avenue du Docteur Schweitzer, 33608 Pessac

Cédric GALUSINSKI, Khodor KHADRA & Paul VIGNEAUX

Université Bordeaux 1
Institut de Mathématiques de Bordeaux - UMR 5251 CNRS, INRIA Futurs Projet MC2
351 Cours de la Libération, 33405 Talence
vigneaux@math.u-bordeaux1.fr

Résumé :

La microfluidique est de plus en plus utilisée pour construire un vaste panel d'outils dont les applications concernent, par exemple, l'utilisation de microgouttes comme des réacteurs chimiques. Dans ce papier, on présente une nouvelle méthode de simulation numérique pour des écoulements de deux fluides immiscibles et incompressibles en microfluidique. Cette approche Level Set permet des simulations rapides et précises de l'évolution de gouttes dans des microcanaux. On étudie ici, plus spécifiquement, les dynamiques de mélange au sein des microgouttes : les simulations numériques sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. On retrouve les phénomènes de zones mortes à l'avant et à l'arrière des gouttes. De plus, on met en évidence divers régimes de mélange dans les gouttes, en fonction des différents paramètres, que sont entre autres, le volume des gouttes, les vitesses d'injection, les contrastes de viscosités ou encore le confinement.

Abstract :

Over the last decade, microfluidics has revolutionized our ability to manipulate and control flows in channels the width of a single human hair. Due to preponderant effect of surface tension, flows of two immiscible fluids in microdevices allow to create monodisperse emulsions where droplets are used as microreactors to study very fast chemical kinetics. In this paper, we present a new numerical method for immiscible incompressible bifluid flows in microfluidics. This Level Set approach allows fast and accurate simulations of droplets hydrodynamics in microchannels. We particularly focus on mixing dynamics inside microdroplets : numerical simulations are in good agreement with physical experiments. Zones, where fluid is trapped in front and at the back of the droplet, already observed experimentally, are brought to the fore numerically. In addition, we explore various mixing dynamics inside microdroplets by studying the influence of parameters such as droplet volume, injection velocity, viscosity ratio and confinement.

Mots-clefs :

microfluidique ; level set ; microgouttes

1 Introduction

Durant la dernière décennie, le champ de la microfluidique s'est drastiquement diversifié : il permet le transport de très faibles volumes de fluide (nanolitres) à travers des canaux du diamètre d'un cheveu. Cette miniaturisation est de plus en plus utilisée pour construire un vaste panel d'outils dont les applications concernent, par exemple, l'utilisation de microgouttes comme des réacteurs chimiques au sein desquels on peut étudier des cinétiques très rapides de l'ordre

de la milliseconde Song et Ismagilov (2003). Pour utiliser au mieux ces gouttes dans le domaine de la chimie, il est nécessaire de comprendre les conditions expérimentales qui régissent leur formation (Anna *et al.* (2003); Guillot et Colin (2005)) et leur écoulement dans les microcanaux.

Dans cette communication, nous essayons de répondre au second point en présentant un modèle numérique basé sur une nouvelle méthode Level Set pour suivre les interfaces d'un écoulement de deux fluides immiscibles en microcanaux. Les simulations numériques obtenues sont en bon accord avec les expériences réalisées et permettent, grâce à l'introduction d'une décomposition de l'écoulement, de diminuer significativement les temps de simulations, comparativement aux résultats proposés précédemment dans la littérature.

Après avoir décrit le modèle mathématique et notre nouvelle méthode de résolution numérique, nous présentons la comparaison des simulations avec les expériences physiques de dynamique de gouttes en microcanaux. De plus, nous mettons en évidence différents régimes de mélange au sein des gouttes en fonction de divers paramètres que sont, entre autres, le volume des gouttes, les vitesses d'injection, les contrastes de viscosités ou encore le confinement. Il s'agit, à notre connaissance, des premiers résultats numériques explorant l'ensemble de ces paramètres, présentés dans la littérature.

2 Modèle et résolution numérique

On s'intéresse à des écoulements de deux fluides immiscibles visqueux et newtoniens. Pour les simuler numériquement, il faut mettre en oeuvre une méthode capable de calculer l'évolution de l'interface entre ces deux fluides. Les calculs présentés dans ce papier ont été obtenus à l'aide d'une adaptation de la méthode Level Set décrite par Sussman *et al.* (1994), article auquel le lecteur peut se référer pour une description détaillée. En effet, nous ne donnons, ici, que les éléments nouveaux mis au point dans Galusinski et Vigneaux (2007) et qui diffèrent de la référence susnommée.

Tout d'abord, il convient de rappeler que le terme de tension de surface utilisé dans le modèle de Sussman *et al.* (1994) est une adaptation de la formulation Continuum Surface Force (CSF) introduite dans le travail fondateur de Brackbill *et al.* (1992), qui propose aussi une condition de stabilité numérique induite par le terme de tension de surface. Cette condition de stabilité, utilisée par un nombre conséquent de méthodes de suivi d'interface (Level Set, VOF, Front Tracking, ...) est donnée par : $\Delta t_\sigma \sim \sqrt{\frac{\rho}{\sigma}}\,\Delta x^{3/2}$.

La référence Galusinski et Vigneaux (2007) propose une dérivation théorique détaillée de cette condition de stabilité pour des écoulements à Reynolds faibles ou modérés, basée sur une analyse de la vitesse perturbée induite par une onde capillaire perturbant l'interface, qui se révèle être du type :

$$\Delta t_\sigma \sim \frac{\eta}{\sigma}\Delta x \tag{1}$$

Il apparaît donc qu'une première relaxation de la contrainte numérique, relativement au pas d'espace, est introduite par notre condition de stabilité. Cependant, il existe des configurations d'écoulements où les paramètres physiques induisent quand même une contrainte sur le pas de temps prohibitive (ainsi, en microfluidique, il peut arriver que Δt_σ soit 100 fois plus faible que le pas de temps lié à la condition CFL). C'est pourquoi, nous avons ensuite proposé une méthode de décomposition de l'écoulement (entre vitesse dans le référentiel du laboratoire et vitesse dans le référentiel de la goutte) qui permet, dans les cas où les interfaces ont une forme stationnaire (ce qui est rapidement le cas en microfluidique lorsque le canal est droit, grâce à la prépondérance de la tension de surface), de diminuer significativement le temps de calcul. Cette technique exploite la stationnarité de la forme de la goutte. Nous en référons à Galusinski et

Vigneaux (2007) et la résumons avec l'algorithme suivant (on note Δt_c, le pas de temps induit par la CFL standard liée au transport) :

1. $S_{u_d} = 0$
2. **Étape : déformation de l'interface**, itérer (2a) - (2d) tant que le temps Δt_c n'est pas atteint
   (a) Calculer la vitesse dans le référentiel du laboratoire $\mathbf{u}$, puis la vitesse de la goutte u_d et en déduire la vitesse dans le référentiel de la goutte $\mathbf{v}$ par soustraction du champ $\overline{u}_d\mathbf{U}$ (où $\mathbf{U}$ est le champ de translation unitaire).
   (b) Si $|\max|u_d^{loc}| - |u_d|| \leq 5\%$ alors stopper les itérations (u_d^{loc} est la vitesse locale de la goutte définie dans Galusinski et Vigneaux (2007))
   (c) Résoudre l'équation de transport associée à $\mathbf{v}$ avec le pas de temps Δt_σ.
   (d) Sommer u_d durant les itérations : $S_{u_d} = S_{u_d} + u_d$.
3. $S_{u_d} = S_{u_d} + ku_d$, où k est le nombre d'itérations manquantes dans (2) pour atteindre Δt_c, à cause de (2b).
4. $\overline{u}_d = S_{u_d}\frac{\Delta t_\sigma}{\Delta t_c}$.
5. **Étape : déplacement de l'interface**, résoudre l'équation de transport associée à $\overline{u}_d\mathbf{U}$ avec le pas de temps Δt_c ; reboucler en 1. autant de fois que nécessaire, pour atteindre le temps physique désiré.

Il s'agit d'un splitting au cours duquel on réalise une étape itérative qui permet de calculer la modification de la forme de l'interface due à la tension de surface, suivie d'une étape qui consiste à translater l'interface obtenue. Cette deuxième étape peut être supprimé si l'on ne se soucie que de la forme de la goutte et non de sa position dans le canal. La comparaison des temps de calcul entre une méthode standard et notre méthode de splitting est variable selon la longueur du canal. Le gain en temps CPU devient très élevé pour des canaux de longueur égale à un grand nombre de longueur de gouttes et pour des écoulements lents. Plus précisément, le gain théorique est nul tant que la goutte n'a pas atteint sa forme asymptotique et est d'un facteur Δ_c/Δ_σ au delà, si l'on s'impose de calculer le champ de vitesse global à chaque translation d'une maille de la goutte. En pratique, l'intérêt de la méthode est de n'effectuer que les calculs nécessaires pour l'obtention de la forme de goutte asymptotique. En effet, cette méthode a été développée pour éliminer les contraintes drastiques sur le pas de temps, inutiles lorsque les interfaces de forme stationnaire ne font que se translater dans un canal. Un autre avantage de cette méthode est que l'asymptotique de goutte est atteinte (point 2 de l'algorithme) en statique, le calcul de la courbure s'en trouve stabilisé. La pertinence de la méthode et son efficacité, pour capter ces formes stationnaires, sont montrées dans la section suivante.

3 Comparaisons entre simulations et expériences

Dans ce papier, nous concentrons notre attention sur la dynamique de mélange au sein des gouttes. Aussi allons nous présenter essentiellement les champs de vitesse et les lignes de courants dans le référentiel de la goutte, issus des simulations numériques. Nous notons bien, de plus, qu'à cause du confinement, les effets 3D jouent un rôle important sur l'hydrodynamique en microfluidique. Cependant, nous verrons dans la suite que les simulations 2D constituent un premier pas permettant d'obtenir une bonne description qualitative de la dynamique de mélange au sein des microgouttes, comparativement aux expériences physiques. Dans toutes les images qui suivent, les gouttes se meuvent de haut en bas.

On présente tout d'abord une goutte non confinée dans un microcanal, sur la Figure 1. A gauche, la goutte (en noir) est superposée avec le champ de vitesse dans le référentiel du laboratoire et un cercle parfait (en rouge) pour montrer la précision de la méthode et l'influence de la tension de surface : même si la courbure de la goutte est très faiblement perturbée par rapport au cercle, la vitesse est significativement modifiée. A droite, on montre la même goutte avec le champ de vitesse dans le référentiel de la goutte et quelques lignes de courants qui révèlent la dynamique de mélange au sein de la goutte.

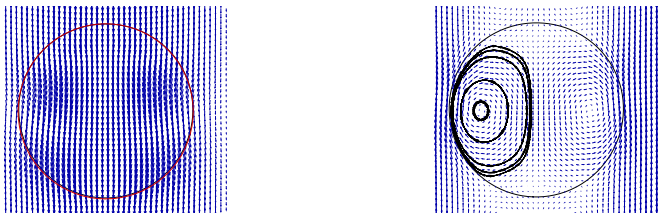

FIG. 1 – A gauche : une microgoutte confinée (ligne noire) et le champ de vitesse associé (flèches bleues) ainsi qu'un cercle parfait (ligne rouge). A droite : la même goutte avec le champ de vitesse et les lignes de courants dans le référentiel de la goutte.

On propose ensuite une série de Figures avec des microgouttes confinées. On considère deux tailles de gouttes. L'une, que l'on qualifiera de "petite", a une largeur de l'ordre de celle du canal $D = 120$ micromètres et une longueur de l'ordre de $1.3D$. L'autre, que l'on qualifiera de "grande", a une largeur de l'ordre de celle du canal et une longueur de l'ordre de $2D$. La vitesse d'injection dans le canal est $u_{in} = 0.2$ m/s. La viscosité de la goutte vaut $2.10^{-2}\ kg/(ms)$ et celle de la phase continue vaut $4.10^{-2}\ kg/(ms)$. Le coefficient de tension de surface vaut $\sigma = 3.10^{-2}$ N/m. Dans la suite, nous appellerons ces données, les "données de références". La petite goutte est présentée à gauche de la Figure 2 avec le champ de vitesse et quelques lignes de courants dans le référentiel de la goutte. De même, la grande goutte est présentée à droite de la Figure 2.

La comparaison des Figures 1 et 2 permet de saisir la modification de la dynamique à l'intérieur de la goutte due tant au confinement qu'à la variation du volume de la goutte. Il apparaît que dans tous les cas, il existe une zone de recirculation majoritaire, au centre de la goutte, qui provoque le mélange. De plus, se révèlent deux zones plus petites, à l'avant et à l'arrière de la goutte, où le fluide est piégé (en microfluidique, il est d'usage de parler de "zones mortes"). Nous avons observé ce phénomène expérimentalement en utilisant des traceurs passifs ou du colorant à l'intérieur des gouttes ; et il l'a aussi été numériquement dans Sarrazin *et al.* (2006). Nous présentons deux images de nos expériences en microcanaux qui traduisent ce phénomène, dans la Figure 3. A gauche, il s'agit d'une photo tirée d'un film où des microgouttes, contenant des traceurs passifs, se meuvent avec une forme stationnaire. Ce film montre que les traceurs se déplacent le long de lignes de courants du type de la Figure 2, dans le centre de la goutte et que certains traceurs restent piégés à l'arrière de la goutte. Ceci met en évidence les petites zones de recirculation à l'arrière de la goutte. A droite, l'expérience consistait en l'injection de colorant qui réagit ensuite chimiquement dans la microgoutte. Nous n'insistons pas ici sur la réaction chimique mais plutôt sur le comportement dynamique du colorant dans la goutte : on observe qu'il est majoritairement propagé au centre de la goutte et non à l'avant. La zone de recirculation autonome à l'avant de la goutte, n'échangeant pas de fluide avec le centre, se voit donc ici matérialisée.

Les changements de la dynamique dus à l'inversion des viscosités entre la phase continue et

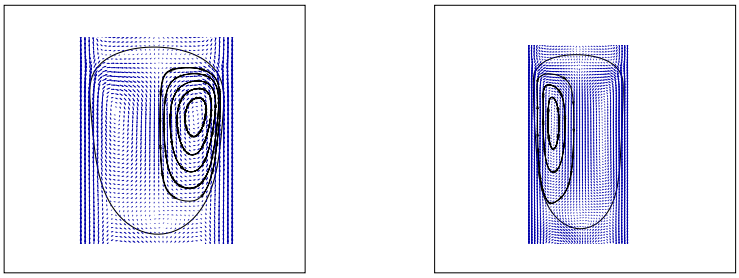

FIG. 2 – A gauche : petite goutte (ligne noire) avec le champ de vitesse (flèches bleues) et quelques lignes de courants dans le référentiel de la goutte. A droite : grande goutte ; données de référence.

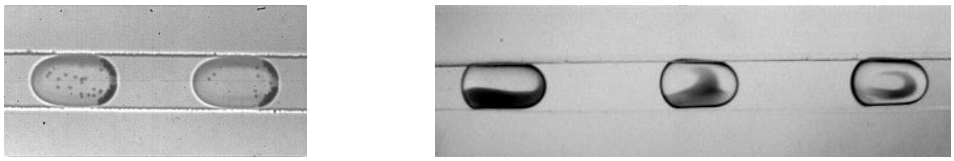

FIG. 3 – A gauche : expérience avec des traceurs passifs matérialisant les zones mortes à l'arrière de la goutte. A droite : expérience avec du colorant mettant en évidence, les zones mortes à l'avant de la goutte.

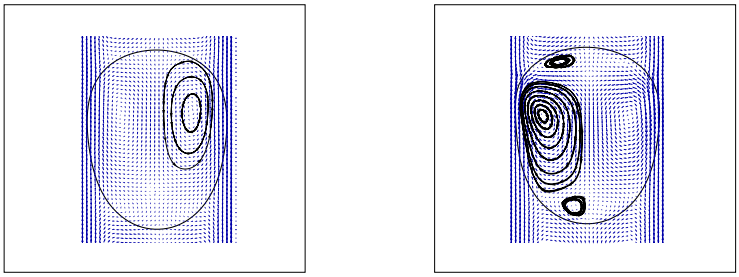

FIG. 4 – A gauche : données de référence sauf que les viscosités dans la goutte et de la phase continue sont échangées. A droite : données de référence sauf que r_η passe de 2 à 10 (voir texte).

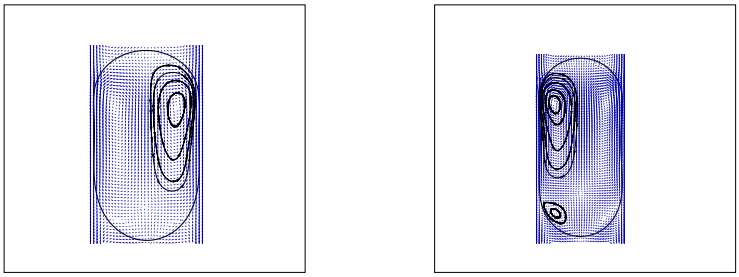

FIG. 5 – A gauche : données de référence sauf que $u_{in} = 0.05$ m/s. A droite : données de référence avec une goutte encore plus grosse et une vitesse faible (voir texte).

la phase dispersée sont présentés à gauche sur la Figure 4 qui peut être comparée à l'image de gauche de la Figure 2. Le rapport de viscosité r_η entre la phase continue et la phase dispersée joue aussi un rôle dans la modification de la dynamique de mélange au sein des microgouttes, comme on peut le voir à droite de la Figure 4. Ici, la viscosité de la goutte vaut $2.10^{-3}\ kg/(ms)$ et celle de la phase continue vaut $2.10^{-2}\ kg/(ms)$, soit un rapport r_η = 10. La comparaison avec le cas de référence, où r_η = 2, montre que l'augmentation du rapport de viscosité induit un

renforcement des recirculations à l'avant et à l'arrière de la goutte ainsi qu'un recul du coeur de la recirculation centrale.
L'effet du changement de la vitesse d'injection est présenté à gauche de la Figure 5, avec une grosse goutte et une vitesse d'injection $u_{in} = 0.05$ m/s. On note naturellement que l'influence de la tension de surface augmente induisant une forme plus sphérique de l'interface à l'avant et à l'arrière de la goutte. Enfin, à droite de la Figure 5, on présente le cas d'une goutte encore plus grosse dont la largeur est de l'ordre de celle du canal et la longueur est de l'ordre de $2.5D$. De plus, la vitesse d'injection est $u_{in} = 0.02$ m/s. Il ressort que la zone de recirculation à l'avant de la goutte se renforce comme le montre les lignes de courants.

4 Conclusions

Ainsi, grâce aux nouvelles méthodes numériques utilisées dans ce travail, nous avons obtenus des simulations numériques rapides et précises qui sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Nous avons retrouvé numériquement les phénomènes de zones mortes à l'avant et à l'arrière des microgouttes et nous avons mis en évidence différents régimes de mélange au sein des gouttes en fonction de divers paramètres que sont, le volume des gouttes, les vitesses d'injection, les contrastes de viscosités ou encore le confinement. Il s'agit, à notre connaissance, des premiers résultats numériques explorant l'ensemble de ces paramètres, présentés dans la littérature. En résumé, si l'on veut que la zone de mélange soit la plus étendue possible au sein de la goutte, on peut agir sur deux leviers : le premier consiste à diminuer r_η, le second vise à diminuer l'influence de la tension de surface.

Les algorithmes utilisés permettent d'explorer la dynamique de mélange au sein des microgouttes. Ils constituent ainsi une aide à la conception de réseaux de microcanaux, dans lesquels le contrôle de l'écoulement, nécessaire aux applications pratiques, est satisfait par les gouttes.

Références

Anna, S. L., Bontoux, N., Stone, H. A. 2003 Formation of dispersions using "flow focusing" in microchannels. *Applied Physics Letters* **82** 364-366

Brackbill, J. U., Kothe, D. B., Zemach C. 1992 A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys* **100** 335-354

Galusinski, C., Vigneaux, P. 2007 On stability condition for bifluid flows with surface tension : application to microfluidics. *submitted*

Guillot, P., Colin, A. 2005 Stability of parallel flows in a microchannel after a T junction. *Phys. Rev. E* **72** 066301

Sarrazin, F., Loubière, K., Laurent, P., Gourdon, C., Bonometti, T., Magnaudet, J. 2006 Experimental and numerical study of droplets hydrodynamics in microchannels. *AIChE Journal* **52** 4061-4070

Song, H., Ismagilov, R.F. 2003 Millisecond Kinetics on a Microfluidic Chip Using Nanoliters of Reagents. *Journal of the American Chemical Society* **125** 14613-14619

Sussman, M., Smereka, P., Osher, S. 1994 A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow. *J. Comput. Phys* **114** 146-159