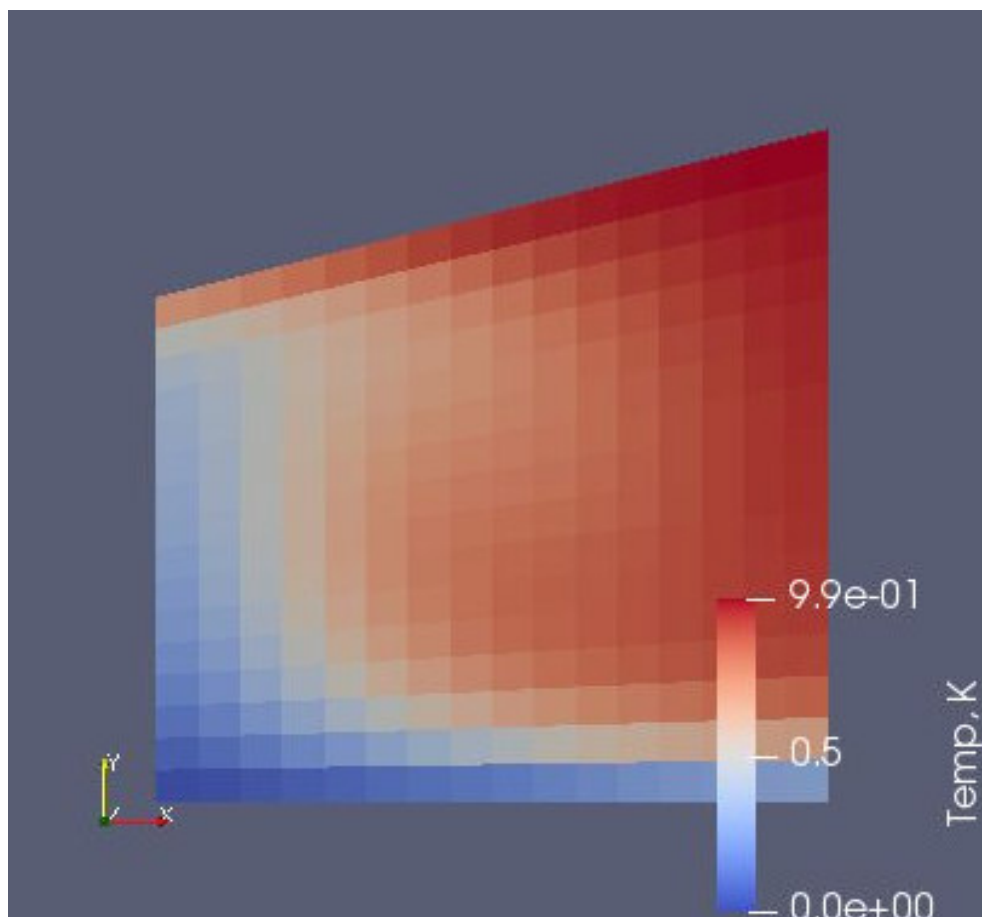


Rapport BE Volumes finis



Sommaire :

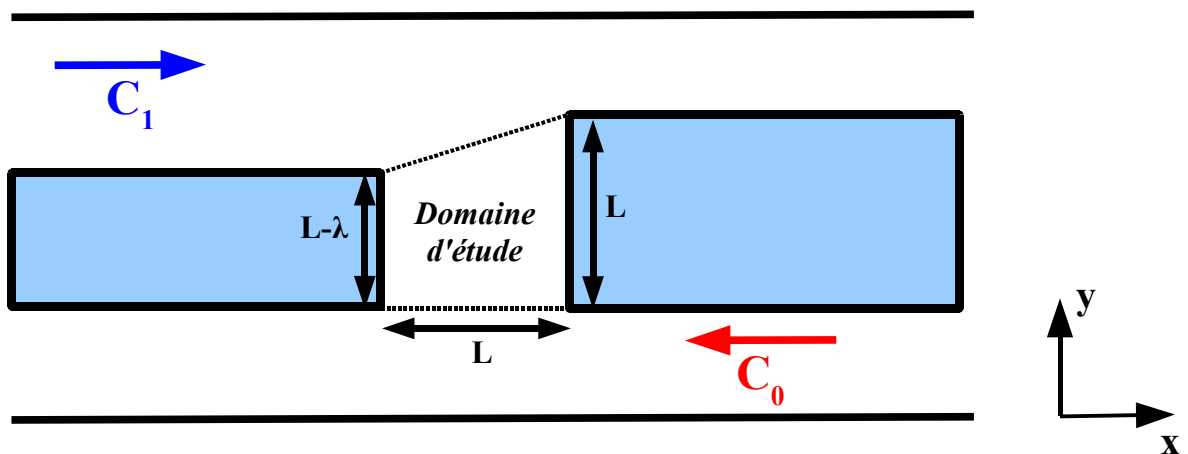
1. Introduction	3
1.1. Contexte	3
1.2. Hypothèses	3
1.3. Conditions initiale et aux limites	4
2. Approche en volumes finis	4
2.1. Explication de la méthode	4
2.2. Détail des flux de temps	5
2.3. Détail des flux advectifs	5
2.4. Détail des flux diffusifs	6
2.5. Bilan	7
3. Algorithme de résolution	7
3.1. Pré-processeur	7
a) Lecture des données	7
b) Création du maillage	7
c) Calcul du champs de vitesse	8
3.2. Noyau du calcul (solveur)	8
a) calcul des flux advectifs	8
b) calcul des flux diffusifs	8
c) calcul de la solution	8
3.3. Post-processeur	9
a) Ecriture des résultats	9
b) Paraview	9
c) gnuplot	9
3.4. Structure de l'algorithme	10
4. Résultats	10
4.1. Advection pure 1D	10
4.2. Diffusion pure 1D	10
4.3. Exploitation du programme	12
4.4. Conclusion	15

1. Introduction :

1.1. Contexte :

On considère le mélange de deux composés chimiques, de concentrations C_0 et C_1 et de diffusivités massiques identiques D , susceptibles de réagir entre eux dans un système de type "Lab-On-Chip" (laboratoire sur puce).

On cherche alors à étudier le mélange d'un dispositif micro-fluidique qui possède un défaut de fabrication, quantifié par le paramètre $\varepsilon = \lambda/L$.



1.2. Hypothèses :

. Pour simplifier le problème, on suppose qu'à l'intérieur du domaine, on a $C_0(x,t) + C_1(x,t) = 1$ en tout point de l'espace et en tout temps. Cette condition permet de ne calculer qu'une seule concentration notée $C(x,t)$.

. L'écoulement est considéré comme invariant dans l'épaisseur des micro-canaux (selon z) donc le problème peut être supposé bidimensionnel.

. La vitesse δ de l'écoulement dans le domaine peut être modélisée par l'expression suivante :

$$\delta = u_{\hat{x}} + v_{\hat{y}} \quad \text{avec :} \quad \left| \begin{array}{l} u(x, y) = -\alpha \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi y}{L}\right) \\ v(x, y) = \alpha \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{L}\right) \end{array} \right.$$

où $\alpha = 0,05 \text{ m.s}^{-1}$

1.3. Condition initiale et aux limites :

A l'instant initial, la concentration dans tout le domaine vaut C_0 .

Puis son évolution spatio-temporelle est donné par : $\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\delta C) = \nabla \cdot (D \nabla C)$

Les conditions aux limites sont les suivants :

- frontière Sud (en $y = 0$) : $C = C_0$
 - frontière Nord (en $y = y_{\max}$) : $C = C_1$
 - frontière Est et Ouest (en $x = 0$ et $x = L$) : $\frac{\partial C}{\partial x} = 0$
- } (condition de Dirichlet)
(condition de Neumann)

2. Approche en volumes finis :

Cahier des charges :

Nous devons produire un programme qui calcule la distribution de la concentration dans le domaine ABCD pour un temps $t = t_{\text{final}}$.

Nous devons respecter les critères suivants :

- Modélisation par la méthode des VolumesFinis
- Maillage régulier en x , et régulier en y (pour une abscisse x donnée)
- Schéma amont pour le terme advectif
- Schéma centré pour le terme diffusif
- Intégration temporelle par la méthode d'Euler explicite

2.1 Explication de la méthode :

Dans cette partie, nous allons exposer notre discrétisation du problème par la méthode des volumes finis.

Le but de la méthode volumes finis est de découper la zone centrale de l'écoulement en mailles de volumes assez petits pour pouvoir modéliser un milieu continu, et d'intégrer les équations caractérisant le problème sur chacune de ces mailles.

Nous rappelons l'équation à discrétiser : $\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\delta C) = \nabla \cdot (D \nabla C)$

En appliquant le théorème de la divergence sur un volume de contrôle, nous obtenons :

$$\iint_D \frac{\partial C}{\partial t} dV + \iint_{\partial D} C \vec{u} \cdot \vec{n} dS + \iint_{\partial D} D \nabla C \cdot \vec{n} dS = 0 \quad \text{avec } D : \begin{array}{l} \text{un domaine de contrôle, soit une} \\ \text{maille de la zone de l'écoulement} \\ \text{considéré, et } \partial D \text{ son contour.} \end{array}$$

2.2 Détails des flux de temps :

Notations : $V_{i,j} = \frac{[dy(i) + dy(i+1)]dx}{2}$

$$\iint_D \frac{\partial C}{\partial t} dV \rightarrow \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\Delta t} V_{i,j}$$

2.3 Détails des flux advectifs :

Notations : $n_{nord} = \frac{(dy(i+1) - dy(i))j}{\sqrt{dx^2 + (dy(i+1) - dy(i))^2}}$

$$S_{nord} = \sqrt{dx^2 + (dy(i+1) - dy(i))^2}$$

$$S_{est} = dy(i+1)$$

$$C_0 = C(i,1)$$

$$C_1 = C(i,ny)$$

Flux advectif nord :

$$\iint_{\partial D} C \vec{u} n_{nord} dS \rightarrow \begin{cases} C_{i,j}^n \vec{u} n_{nord} S_{nord} & \text{si } \vec{u} n_{nord} \gg 0 \\ C_{i,j+1}^n \vec{u} n_{nord} S_{nord} & \text{si } \vec{u} n_{nord} < 0 \end{cases}$$

Flux advectif sud :

$$F_{sud}^{adv}(i,j) = -F_{nord}^{adv}(i,j-1)$$

Flux advectif est :

$$\iint_{\partial D} C \vec{u} n_{est} dS \rightarrow \begin{cases} C_{i,j}^n u S_{est} & \text{si } u \gg 0 \\ C_{i+1,j}^n u S_{est} & \text{si } u < 0 \end{cases}$$

Flux advectif ouest :

$$F_{ouest}^{adv}(i, j) = - F_{est}^{adv}(i-1, j)$$

Conditions aux limites :

$$F_{ouest}^{adv}(1, j) = F_{est}^{adv}(nx, j) = 0$$

$$F_{nord}^{adv}(i, ny) = C_1 \vec{u} n_{nord} S_{nord}$$

$$F_{sud}^{adv}(i, 1) = 0$$

2.4 Détails des flux diffusifs :

Notations : $C_{AB} = \frac{(C(i-1, j) + C(i-1, j+1) - C(i+1, j) - C(i+1, j+1))}{4}$

Flux diffusif nord :

$$\iint_{\partial D} D \nabla C \cdot \vec{n} dS \rightarrow D \left[\frac{(C_{AB})}{dx} + \frac{(C_{i,j+1} - C_{i,j})}{dy(i)} \right] S_{nord}$$

Flux diffusif sud :

$$F_{sud}^{diff}(i, j) = - F_{nord}^{diff}(i, j-1)$$

Flux diffusif est :

$$\iint_{\partial D} D \nabla C \cdot \vec{n} dS \rightarrow D \frac{(C_{i+1, j} - C_{i, j})}{dx} S_{est}$$

Flux diffusif ouest :

$$F_{ouest}^{diff}(i, j) = - F_{est}^{diff}(i, j-1)$$

2.5 Bilan :

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^n + \frac{\Delta t (F_{tot}^{adv} + F_{tot}^{dif})}{V_{i,j}}$$

3. Algorithme de résolution :

3.1 Pré-processeur :

a) Lecture des données :

Toutes les données physiques et numériques nécessaires à la résolution du problème sont préalablement données par l'utilisateur dans un fichier "donnees_entree.dat".

Les données sont les suivantes :

- D : diffusivité massique des 2 composés chimiques (m²/s)
- α : constante paramétrique pour la vitesse (m/s)
- C₀ : concentration du composé 1
- C₁ : concentration du composé 2 } (C₀ + C₁ = 1)
- λ : distance du défaut de fabrication (m) (hauteur du bord gauche=L-lambda)
- L : largeur et hauteur du bord droit du domaine (m)
- Nx : nombre de cellules selon x
- Ny : nombre de cellules selon y
- tf : temps final (s)
- Nt : nombre de pas de temps

Une subroutine "lecture" s'occupera de stocker toutes ces données dans une structure contenue dans un module qu'il suffira de déclarer dans chaque subroutine dans laquelle on aura besoin d'une ou plusieurs des données.

b) Création du maillage :

La création du maillage correspondant à notre problème s'effectue dans la subroutine "mesh2".

La subroutine "mesh1" quant à elle crée un maillage uniforme qui correspond à un système sans défaut de fabrication (domaine carré).

Il faudra alors choisir d'appeler l'une ou l'autre dans le programme principal "programme".

On y crée 4 tableaux :

- un tableau x contenant les abscisses des noeuds des cellules (taille Nx+1 * Ny+1)

- un tableau y contenant les ordonnées des noeuds des cellules (taille $N_x+1 * N_y+1$)
- un tableau xc contenant les abscisses des centres des cellules (taille $N_x * N_y$)
- un tableau yc contenant les ordonnées des centres des cellules (taille $N_x * N_y$)

Les sousroutines "mesh1" et "mesh2" s'occupent également de créer un tableau Vol contenant les volumes de toutes les cellules (taille $N_x * N_y$). Il servira au moment du calcul de la solution.

c) calcul du champ de vitesse :

La sousroutine "init_vitesse" est chargée de calculer la vitesse de l'écoulement à l'intérieur de chaque cellule.

Pour cela, on crée un tableau u contenant les coordonnées selon x de la vitesse de chaque cellule et un autre tableau v contenant celles selon y.

Les coordonnées se calculent grâce à l'expression donnée en 1.2 (page 2).

Il est également possible d'avoir une vitesse uniforme en utilisant la sousroutine "init_vitesse_uniform".

3.2 Noyau du calcul (solveur) :

a) calcul des flux advectifs :

Les flux advectifs sont calculés dans la sousroutine "advection" à l'aide des expressions trouvées en 2.2.

b) calcul des flux diffusifs :

Pour la diffusion, nous avons 2 sousroutines :

- "diffusion1" correspondant au maillage uniforme créé dans la sousroutine "mesh1"
- "diffusion2" correspondant au maillage demandé (non-uniforme) créé dans "mesh2"

Dans les 2 cas on définit des tableaux de taille N_x*N_y contenant les flux Nord, Sud, Est, Ouest de chaque cellule à un instant t .

Les flux Est de la dernière colonne de cellule (en $i=N_x$) et les flux Ouest de la première colonne de cellule (en $i=0$) sont nuls, conformément à la solution de Neumann.

Les autres flux sont calculés grâce à leurs expressions détaillées en 2.3.

c) calcul de la solution :

Le tableau contenant les concentration de chaque cellule est initialisé dans le programme principal : $C(i,j) = C_0$ dans tout le domaine.

On précise que ce tableau contient 2 lignes de plus que le nombre de cellules selon y (N_y) pour y intégrer la concentration en haut du domaine C_1 et en bas du domaine C_0 .

L'objectif de la sousroutine "calcul" est de calculer à un instant t la concentration de chaque cellule.

Pour ce faire, on utilise l'expression trouvée en 2.1.

Pour assurer la stabilité de la solution, on impose que la concentration soit comprise entre C_0 et C_1 .

On itère alors ce calcul, dans le programme principal à l'aide d'une boucle allant de 1 à N_t dans laquelle on appelle les sousroutines de calcul de flux ("advection" et "diffusion") et de calcul de la solution ("calcul") à chaque itération.

Une fois la boucle terminée, nous avons donc la concentration de chaque cellule à l'instant t_f stockée dans la mémoire.

3.3 Post-processeur :

a) Ecriture des résultats :

Pour la diffusion pure 1D ($\delta = 0$), on souhaite comparer nos résultats des concentrations en $x = L/2$ avec une solution analytique (qui dépend donc uniquement de y).

On crée alors la sousroutine "ecriture" qui écrit les valeurs finales des concentrations des cellules désirées (c'est à dire en $x = L/2$) dans un fichier "concentration_selony" avec leur ordonnées respectives ainsi que la solution analytique dans un autre fichier "solution_analytique". Cette sousroutine est donc appelée à la fin du programme principale.

b) paraview :

Pour exploiter nos calculs, nous affichons nos résultats sur Paraview.

Pour cela, on utilise sousroutine VTSWriter fournie.

c) gnuplot :

Après avoir écrit nos résultats dans le fichier, il suffira alors d'appeler gnuplot dans un terminal et de tracer sur la même figure la courbe décrivant la solution analytique et celle décrivant nos résultats.

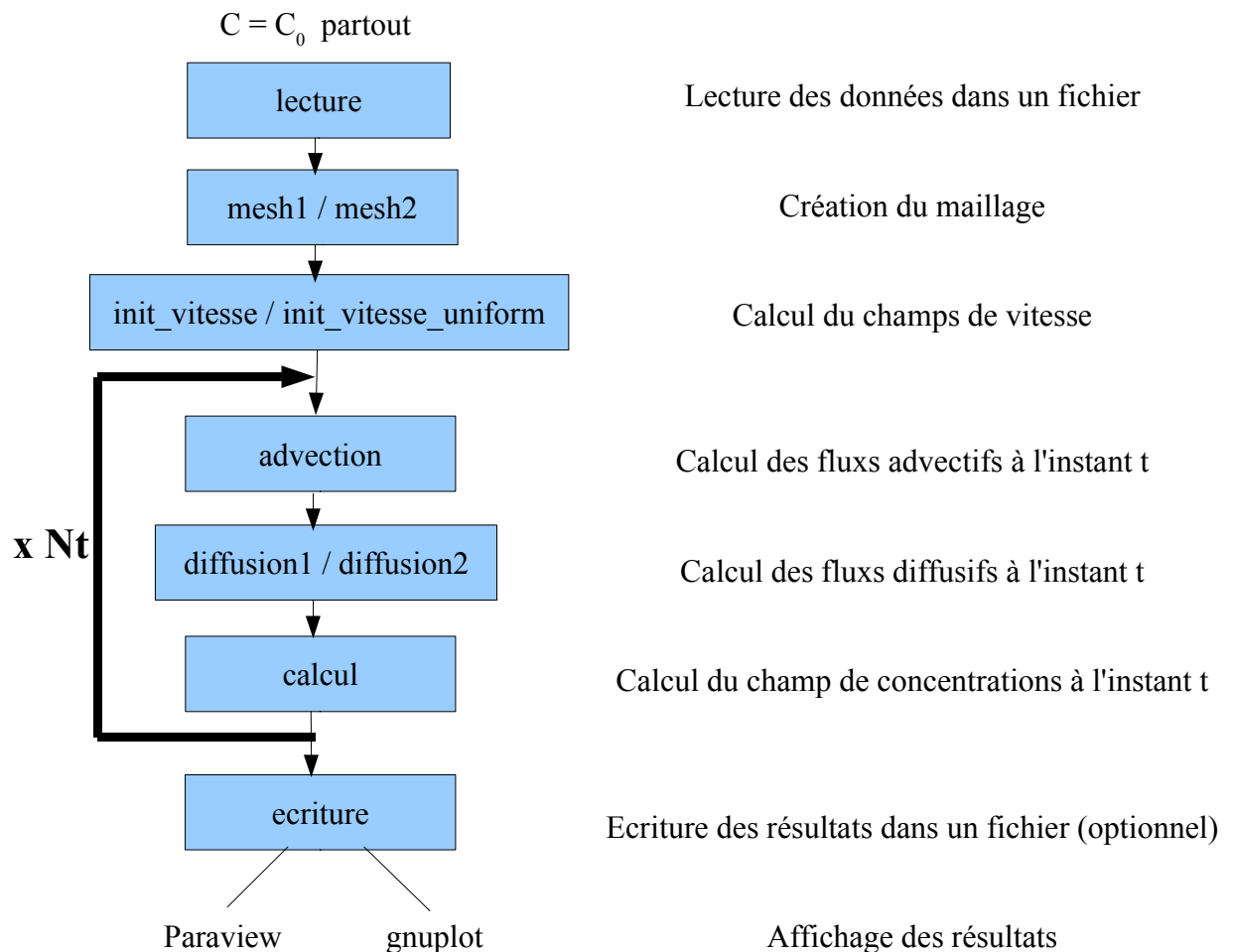
On utilise la commande suivante :

```
gnuplot> plot 'concentration_selony.dat' , 'solution_analytique.dat'
```

La courbe décrivant nos résultats est donc composée d'autant de points qu'on a défini de cellules selon y , soit N_y points.

3.4 Structure du programme :

Pour résumer, voici un schéma de notre programme principal :



4. Résultats :

4.1 Advection pure 1D :

Les résultats que nous avons dans cette section sont absurdes, l'exploitation du programme advection 1D n'a donc pas pu être réalisée.

4.2 Diffusion pure 1D :

On souhaite analyser l'influence du nombre de Fourier R sur la distribution de concentration tout en la comparant à une solution analytique..

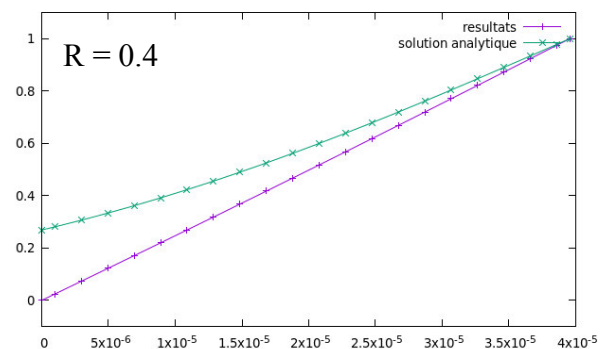
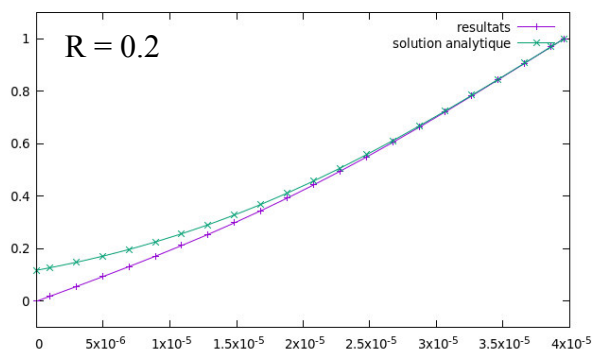
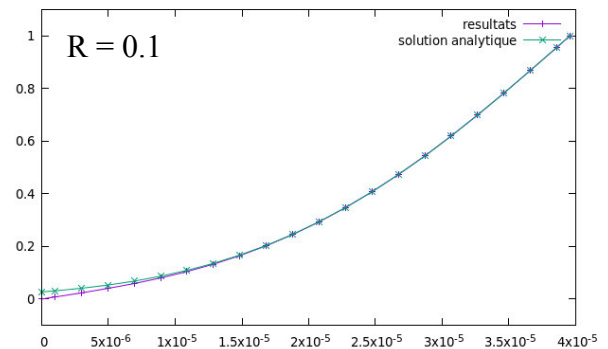
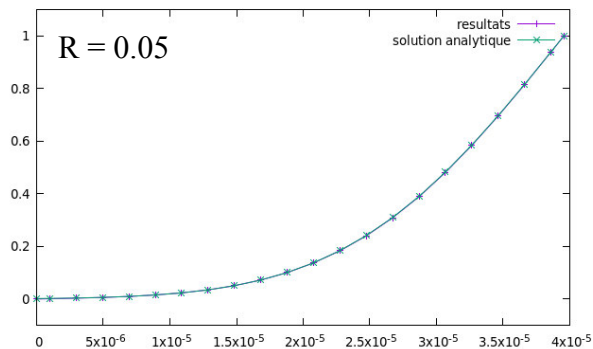
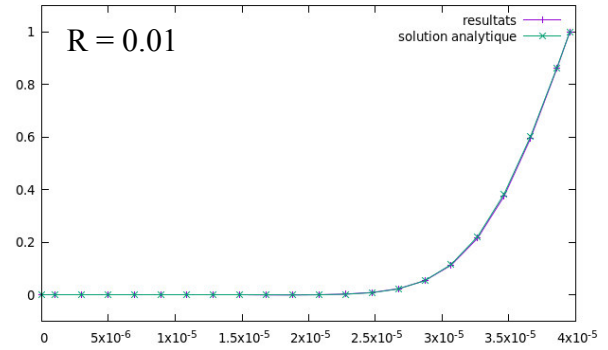
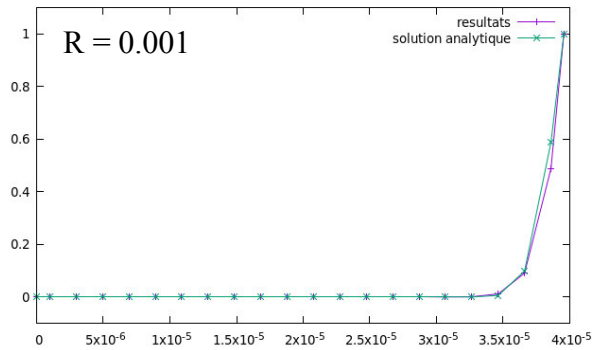
Pour cela, on fixe une vitesse nulle dans tout le domaine et une concentration $C_1=1$ en haut du domaine et $C_0=0$ en bas.

On rappelle l'expression du nombre de Fourier dans notre cas : $R = \frac{Dt}{L^2}$

- On s'intéresse d'abord à la distribution selon y de la concentration. On choisit de se placer en $x=Nx/2$.

La solution analytique dans ce cas est : $C(y,t)_{x=Nx/2} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{y_{\max} - y}{2\sqrt{Dt}}\right)$ avec $y_{\max} = L - \frac{\lambda}{2}$

Voici nos résultats pour différents nombres de Fourier :

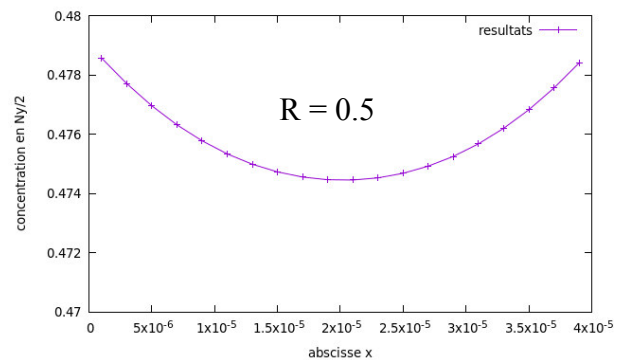
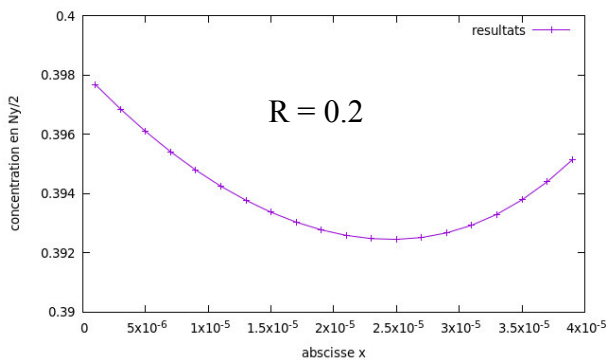
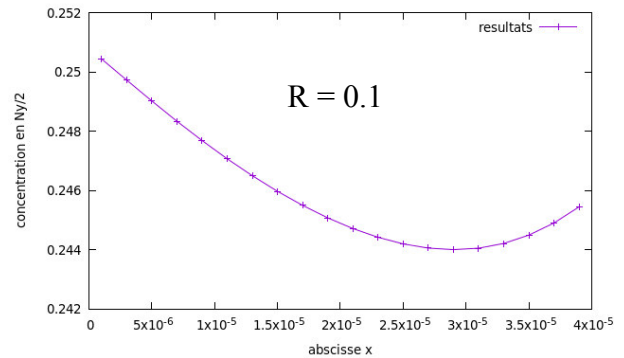
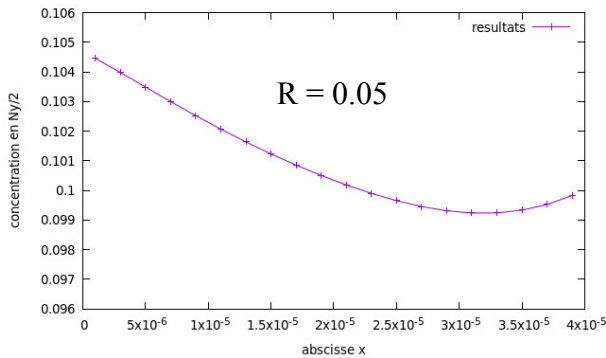


On constate que pour des petits nombres de Fourier ($R < 0.1$), la théorie colle quasi parfaitement avec notre simulation.

Cependant, pour des nombres de Fourier plus grands, on observe que nos résultats s'éloignent de la solution analytique notamment en bas du domaine.

En effet, on a fixé la concentration en bas du domaine ($C(y=0)=C_0$) alors qu'en réalité cette concentration augmente puisque le bas du domaine reçoit un flux diffusif positif (due à la différence de concentration avec les cellules supérieures).

- On refait le même test dans la direction x en se plaçant en $y = Ny/2$:



Nous observons que la distribution de la concentration en $Ny/2$ tend à former une parabole. Pour des petits nombres de Fourier ($R < 0.5$), la concentration à l'ouest du domaine est légèrement plus importante qu'à l'est mais au delà, nous obtenons une parfaite parabole.

On explique ce phénomène par la géométrie du problème : les cellules à l'est sont plus grandes qu'à l'ouest, et plus les cellules sont grandes plus elles reçoivent un flux diffusifs importants. Mais celles qui se situent complètement à l'est ne reçoivent pas de flux diffusifs venant de l'Est (condition de Neumann), ce qui explique qu'elles n'ont pas la concentration la plus faible. Alors quand on attend un temps suffisant, ce sont les cellules en $Nx/2$ qui reçoivent le flux diffusif le plus important.

4.3 Exploitation du programme :

Valeurs sélectionnées :

- D	: 4.10^{-7}	- C_1	: 1	- N_x	: 16
- α	: 0,05	- λ	: 10.10^{-6}	- N_y	: 16
- C_0	: 0	- L	: 40.10^{-6}		

Nombre de Fourier : $R = \frac{Dt}{L^2} = 0.5$

Nombre de Courant : $CFL = \frac{\alpha t}{L} = 1$

Nombre de Péclet : $Pe = \frac{\alpha L}{D} = 5$

Pour obtenir le champ stationnaire, on essaie d'obtenir sur paraview une concentration constante dans chaque cellule, si la concentration n'est pas constante, on augmente le temps jusqu'à obtenir l'objectif souhaité.

On confirme alors en envoyant les valeurs sur Excel et on compare ces valeurs au temps suivant, si les valeurs sont identiques on a atteint le champ stationnaire.

On en déduit la concentration moyenne C_∞ en envoyant les valeurs des concentrations de chaque volume sur une feuille Excel grâce à un outil de Paraview, on somme ensuite toutes les valeurs avec la fonction somme sur Excel et on divise le tout par le nombre de cellules.

Concentration moyenne : $C_\infty = \frac{\sum_i C_{\text{cellule } i}}{\text{nbre de cellules}}$

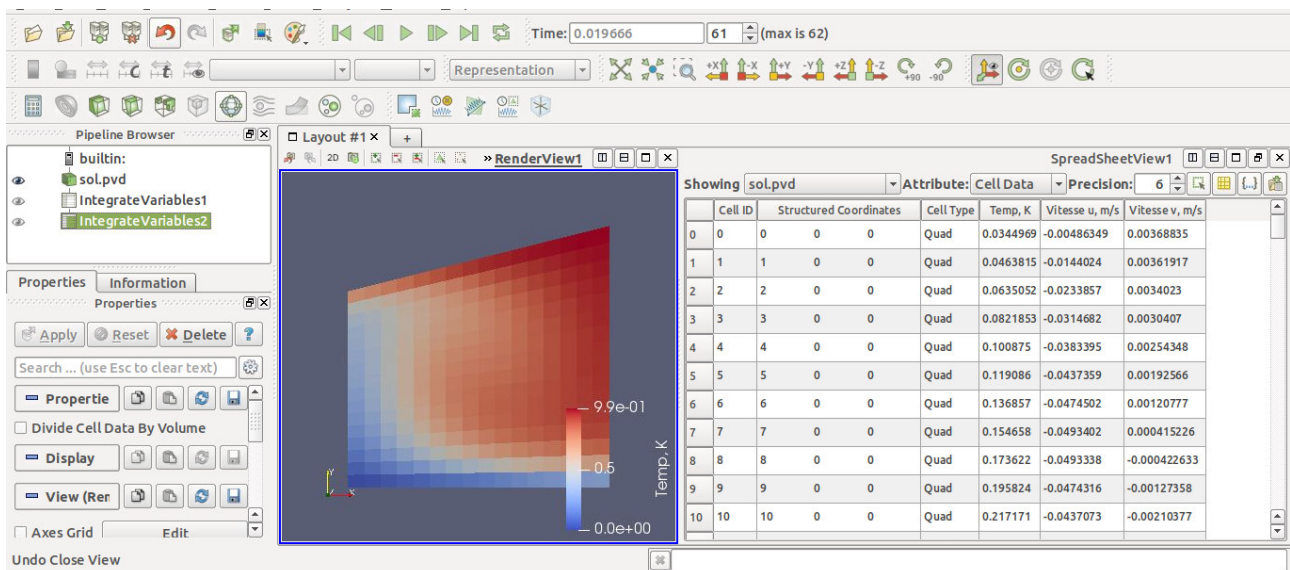


Figure montrant la démarche de détermination de C_∞ .

Démarche : filtre / integrate variable / envoie sur une feuille Excel / utilisation de la formule de C_∞

On obtient :

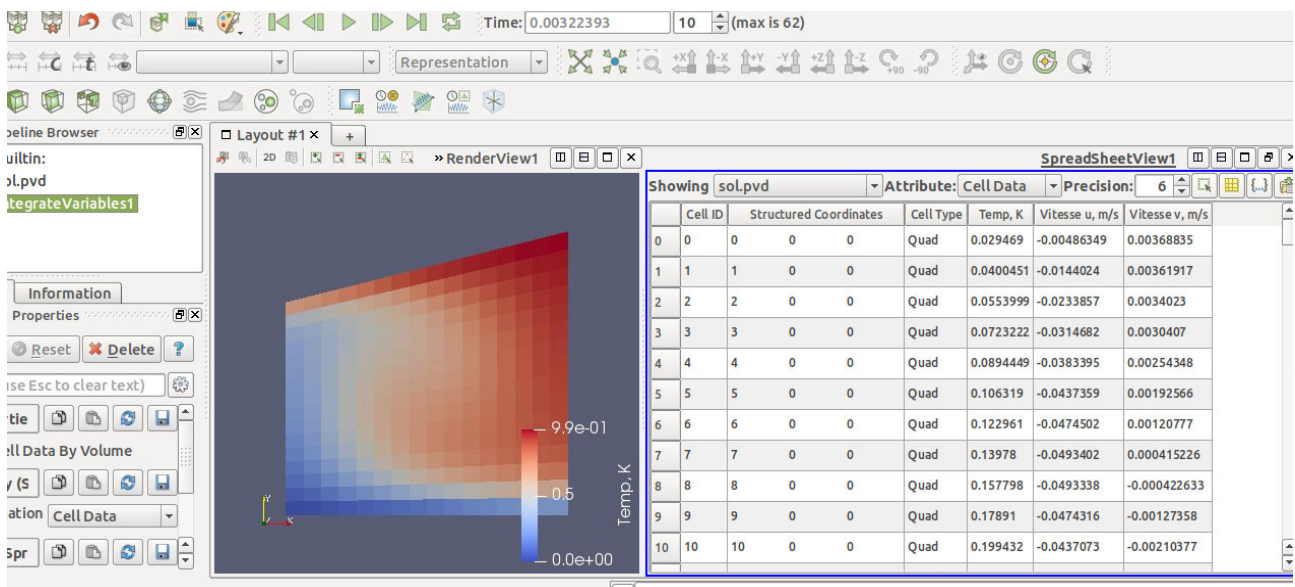
$Pe = 5 / C_\infty = 0,517$

Un critère permettant de vérifier que la solution stationnaire est atteinte serait d'observer que la quantité δC est très petite pendant une période dt .

Pour faire varier le nombre de Péclet {0,5; 5; 50}, on fait varier D { $4 \cdot 10^{-6}$; $4 \cdot 10^{-7}$; $4 \cdot 10^{-8}$ }

=SOMME(F2:F257)/256												
B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	
Structured Coordinates:0	Structured Coordinates:1	Structured Coordinates:2	Cell Type	Temp	K	Vitesse u	m/s	Vitesse v	m/s	vtkIsSelected		
0	0	0	9	0.0344969	-0.00486349	0.00368835	0					
1	0	0	9	0.0463815	-0.0144024	0.00361917	0					
2	0	0	9	0.0635052	-0.0233857	0.0034023	0					
3	0	0	9	0.0821853	-0.0314682	0.0030407	0				resultats Cinf	
4	0	0	9	0.100875	-0.0383395	0.00254348	0				0.661370729	
5	0	0	9	0.119086	-0.0437359	0.00192566	0					
6	0	0	9	0.136857	-0.0474502	0.00120777	0					
7	0	0	9	0.154658	-0.0493402	0.000415226	0					
8	0	0	9	0.173622	-0.0493338	-0.000422633	0					
9	0	0	9	0.195824	-0.0474316	-0.00127358	0					
10	0	0	9	0.217171	-0.0437073	-0.00210377	0					
11	0	0	9	0.23675	-0.0383045	-0.00287906	0					
12	0	0	9	0.254106	-0.0314313	-0.00356643	0					
13	0	0	9	0.268833	-0.0233523	-0.00413538	0					
14	0	0	9	0.280427	-0.0143784	-0.00455922	0					
15	0	0	9	0.287947	-0.0048545	-0.00481634	0					
0	1	0	9	0.0925398	-0.00475378	0.0109835	0					
1	1	0	9	0.123829	-0.0140687	0.0107742	0					
2	1	0	9	0.169417	-0.0228234	0.0101254	0					
3	1	0	9	0.219855	-0.0306824	0.00904636	0					
4	1	0	9	0.271134	-0.0373454	0.0075646	0					
5	1	0	9	0.321729	-0.042559	0.0057252	0					
6	1	0	9	0.370981	-0.0461259	0.00358963	0					

=SOMME(F2:F257)/256												
B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	
Structured Coordinates:0	Structured Coordinates:1	Structured Coordinates:2	Cell Type	Temp	K	Vitesse u	m/s	Vitesse v	m/s	vtkIsSelected		
0	0	0	9	0.029469	-0.00486349	0.00368835	0					
1	0	0	9	0.0400451	-0.0144024	0.00361917	0					
2	0	0	9	0.0553999	-0.0233857	0.0034023	0					
3	0	0	9	0.0723222	-0.0314682	0.0030407	0				resultats Cmo	
4	0	0	9	0.0894449	-0.0383395	0.00254348	0				0.599591661	
5	0	0	9	0.106319	-0.0437359	0.00192566	0					
6	0	0	9	0.122961	-0.0474502	0.00120777	0					
7	0	0	9	0.13978	-0.0493402	0.000415226	0					
8	0	0	9	0.157798	-0.0493338	-0.000422633	0					
9	0	0	9	0.17891	-0.0474316	-0.00127358	0					
10	0	0	9	0.199432	-0.0437073	-0.00210377	0					
11	0	0	9	0.218494	-0.0383045	-0.00287906	0					
12	0	0	9	0.235599	-0.0314313	-0.00356643	0					
13	0	0	9	0.250266	-0.0233523	-0.00413538	0					
14	0	0	9	0.261891	-0.0143784	-0.00455922	0					
15	0	0	9	0.26943	-0.0048545	-0.00481634	0					
0	1	0	9	0.078968	-0.00475378	0.0109835	0					
1	1	0	9	0.106767	-0.0140687	0.0107742	0					
2	1	0	9	0.147555	-0.0228234	0.0101254	0					
3	1	0	9	0.193111	-0.0306824	0.00904636	0					
4	1	0	9	0.23992	-0.0373454	0.0075646	0					



Figures montrant la démarche de détermination de 90% de C_∞ puis de $t_{90\%}$

On obtient :

$Pe = 0,5 / C_\infty = 0,501$	et	$t_{90\%} = 6,3 \cdot 10^{-5}$
$Pe = 5 / C_\infty = 0,517$	et	$t_{90\%} = 6,1 \cdot 10^{-4}$
$Pe = 50 / C_\infty = 0,661$	et	$t_{90\%} = 3,2 \cdot 10^{-3}$

Lorsque le nombre de Péclet augmente, $t_{90\%}$ augmente car la diffusivité massique a diminué et donc l'advection prend le dessus petit à petit sur le phénomène de diffusion, et avec l'advection l'équilibre arrive plus vite qu'avec la diffusion

On décide ensuite de fixer un nombre de Péclet, on fait ensuite varier le facteur de défaut ε . Pour cela, on a va modifier la valeur de λ .

En doublant λ , $Pe = 5 / C_{\infty} = 0,529$ et $t_{90\%} = 5.10^{-4}$

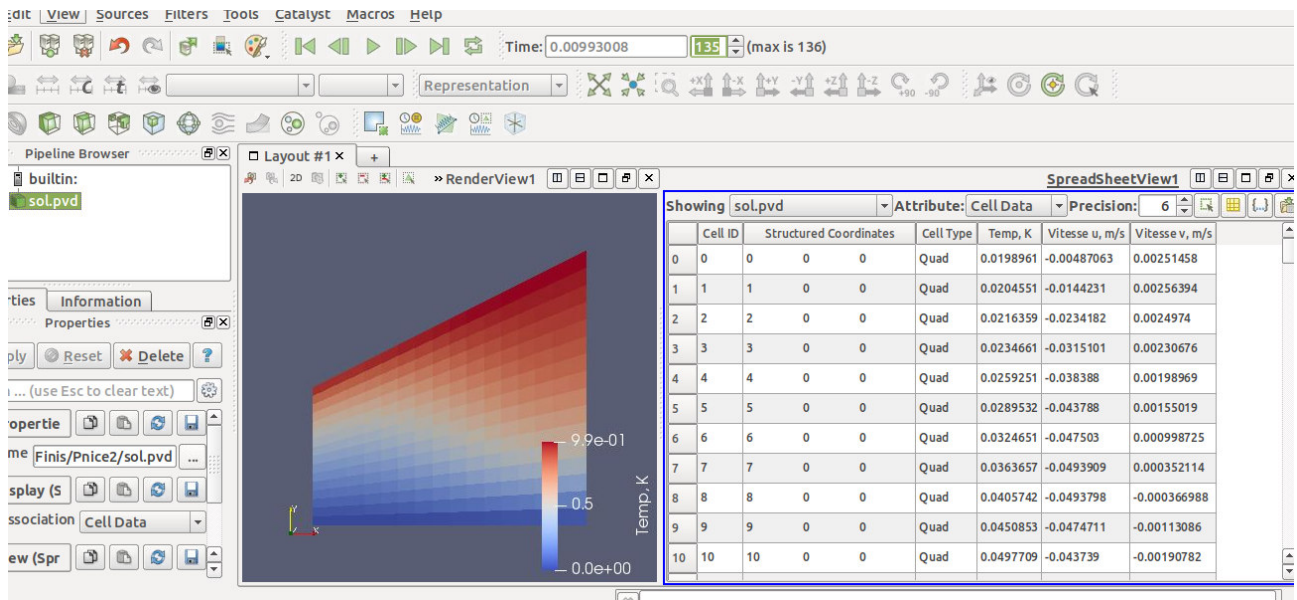


figure montrant l'espace avec un facteur de défaut plus grand

En triplant λ , même constat.

On constate qu'avec l'augmentation de ε , on a C_{∞} qui augmente et $t_{90\%}$ qui diminue.

Le fait que la surface exposée à la concentration C_1 soit plus grande, fait que la concentration sera plus grande car plus de fluide de concentration C_1 rentre. Le temps $t_{90\%}$ diminue car il y a un plus grand déséquilibre entre les concentrations.

4.4 Conclusion :

La réalisation de ce projet nous a permis de simuler numériquement les phénomènes d'advection et de diffusion de la concentration dans un système micro-fluidique à l'aide de la méthode volumes finis.