

## Micro-écoulements gazeux : validation expérimentale de modèles QHD et de Navier-Stokes avec conditions aux limites de glissement

Stéphane Colin<sup>1</sup>, Tatiana G. Elizarova<sup>2</sup>, Yurii V. Sheretov<sup>3</sup>, Jean-Claude Lengrand<sup>4</sup>, Henri Camon<sup>5</sup>

<sup>1</sup>LGMT-INSAT, 135 avenue de Ranguel, 31077 Toulouse cedex 4

<sup>2</sup>Institut de Modélisation Mathématique, Académie des Sciences de Russie, Moscou

<sup>3</sup>Tver State University, Russie

<sup>4</sup>Laboratoire d'Aérodynamique, 1C avenue de la Recherche Scientifique, 45071 Orléans cedex 2

<sup>5</sup>LAAS, 7 avenue du Colonel Roche, 31077 Toulouse cedex

[stephane.colin@insa-tlse.fr](mailto:stephane.colin@insa-tlse.fr)

### Résumé :

*On mesure des débits d'azote ou d'hélium dans des micro-conduites gravées sur silicium par DRIE. Les sections sont rectangulaires et les profondeurs de l'ordre du micromètre. Le régime d'écoulement est faiblement raréfié, caractérisé par des nombres de Knudsen inférieurs à l'unité. Les mesures effectuées sont confrontées à deux modèles. Le premier est un modèle d'écoulement 2D, qui utilise les équations de Navier-Stokes associées à des conditions aux limites traduisant un glissement du 2<sup>ème</sup> ordre en Knudsen. Le second est un modèle d'écoulement plan qui utilise un nouveau système d'équations, dit quasi hydrodynamique, basé sur l'utilisation d'une procédure de moyenne spatio-temporelle des variables hydrodynamiques fondamentales. Ces équations sont associées à des conditions aux limites du 1<sup>er</sup> ordre en Knudsen. On constate que ces deux modèles permettent d'augmenter la plage habituelle de validité du régime d'écoulement glissant, tout en conservant une modélisation simple de type milieu continu.*

### Abstract :

*Measurements of nitrogen and helium flow rates through micro-ducts are presented. The channels are etched in silicon by DRIE; sections are rectangular, with depths on the order of one micrometer. The flows, characterized by Knudsen numbers lower than unity, are slightly rarefied. The experimental data are compared with two models. The first model is a 2D flow model, based on the Navier-Stokes equations associated with second order slip-flow boundary conditions. The second model is a plane flow model that uses the so-called quasi hydrodynamic new system of equations; it is based on fundamental hydrodynamic variables defined from a spatiotemporal averaging of the molecular quantities. These equations are associated with first order boundary conditions. It is shown that both proposed models allow to increase the usual range of slip flow regime applicability, while keeping a simple continuum-type modeling.*

### Mots-clefs : microfluidique ; raréfié ; slip-flow

#### 1 Introduction

Dans les écoulements de gaz modérément raréfiés avec des nombres de Knudsen  $Kn$  dans l'intervalle  $[0,01 ; 1]$ , on constate souvent des effets qu'il est difficile d'expliquer avec le formalisme des équations classiques de Navier-Stokes (NS), même en utilisant des conditions aux limites de glissement de vitesse et de saut de température (Abramovich, 1991; Bird, 1998; Sone, 1997). Par exemple, lors d'expériences d'écoulements gazeux en micro-canaux, on observe expérimentalement un excès de débit massique par rapport à la valeur que prévoit la théorie classique (Lalonde, 2001). La simulation directe par méthode de Monte Carlo (DSMC), avec une adaptation adéquate, confirme cet excès de débit (Xie et al., 2002).

L'un des moyens de résoudre cette difficulté en conservant le système d'équations NS consiste à utiliser des conditions aux limites plus précises, traduisant un glissement du second ordre en  $Kn$  (Aubert and Colin, 2001). Une autre idée est d'utiliser le nouveau système d'équations "quasi hydro-dynamique" (QHD) établi par Sheretov (Sheretov, 2000), et qui se distingue du modèle NS par l'utilisation d'une procédure de moyenne spatio-temporelle pour la détermination des grandeurs hydrodynamiques fondamentales : densité, vitesse et température. Il en résulte des termes supplémentaires par rapport aux équations NS non négligeables dans le

cas d'écoulements très confinés. Les résultats prévus par ces deux modèles sont confrontés à des mesures expérimentales de débits d'azote et d'hélium à travers des microcanaux de sections rectangulaires.

## 2 Mesures expérimentales

Un banc d'essais (Lalonde, 2001), spécifiquement conçu pour l'étude des micro-écoulements gazeux, permet de mesurer des débits compris entre  $10^{-7}$  et  $5 \cdot 10^{-13} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ . Le principe de la mesure de débit est celui du suivi d'une goutte liquide dans une pipette calibrée, à l'aide de capteurs optiques. Le débit massique de gaz traversant le micro-canal est déduit d'une double mesure simultanée des débits volumiques dans des pipettes situées en amont et en aval de celui-ci. Les deux lignes de mesures sont isolées du milieu extérieur et peuvent être amenées indépendamment à des pressions comprises entre 20 et 400 kPa. La confrontation des deux mesures de débit permet de mettre en évidence la présence de fuites pouvant exister au niveau des connexions du microsysteme, fuites souvent non détectables par d'autres moyens.

| Echantillon n°                       |         | 1             | 2          | 3            | 4            | Incertitude |
|--------------------------------------|---------|---------------|------------|--------------|--------------|-------------|
| Nombre de canaux                     |         | 1             | 45         | 380          | 575          | -           |
| profondeur<br>$2h$ ( $\mu\text{m}$ ) | mesurée | 4,48          | 1,84       | 1,15         | 0,541        | 0.1         |
|                                      | retenue | 4,48          | 1,88       | 1,16         | 0,545        | -           |
| Largeur $2b$ ( $\mu\text{m}$ )       |         | 51,6          | 21,2       | 21           | 50           | 0.3         |
| Longueur $L$ ( $\mu\text{m}$ )       |         | 5000          | 5000       | 5000         | 5000         | 10          |
| Rapport de forme $a$                 |         | 0,087         | 0,087      | 0,055        | 0,011        | -           |
| Plage de Knudsen $Kn_o$              |         | 0,002 - 0,018 | 0,01 - 0,1 | 0,016 - 0,22 | 0,035 - 0,47 | -           |

TABLE 1 – Caractéristiques des échantillons testés

Les essais ont été réalisés avec des micro-canaux gravés par DRIE (Deep Reactive Ion Etching) dans une plaquette de silicium, scellée anodiquement avec une plaque de Pyrex. Les sections sont rectangulaires, les profondeurs varient entre 0,5 et 4,5  $\mu\text{m}$  (table 1), et plusieurs micro-canaux identiques sont disposés en parallèle afin d'obtenir un débit suffisant pour être mesuré avec une bonne précision.

## 3 Modèle de Navier-Stokes avec conditions aux limites d'ordre deux (NS2)

Le modèle développé (Aubert and Colin, 2001) fournit une solution semi-analytique des équations de Navier-Stokes compressibles, associées à des conditions aux limites du second ordre, dans une micro-conduite cylindrique longue, de section rectangulaire définie par  $x \in [-b; +b]$  et  $y \in [-h; +h]$ . Les conditions aux limites utilisées, établies par Deissler (Deissler, 1964), proposent une expression de la vitesse longitudinale  $u$  à la paroi sous la forme

$$u|_{y=h} = -\frac{2-\sigma}{\sigma} \lambda \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{y=h} - \frac{9}{16} \lambda^2 \left( 2 \left. \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right|_{y=h} + \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{y=h} + \left. \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right|_{y=h} \right), \quad [1]$$

exprimée ici en  $y = h$ , avec une forme similaire sur les trois autres parois. Le libre parcours moyen des molécules est noté  $\lambda$ , et le coefficient d'accommodation pour la quantité de mouvement, représentatif du type de réflexion des molécules à la paroi, est noté  $\sigma$ . Le deuxième terme des seconds membres introduit une correction au glissement prévu par les conditions du premier ordre de Maxwell. Le débit résultant peut s'exprimer sous la forme

$$q_{NS2}^* = \frac{q_{NS2}}{q_{NS0}} = 1 + \alpha_1 Kn_o \frac{1}{\Pi + 1} + \alpha_2 Kn_o^2 \frac{\ln \Pi}{\Pi^2 - 1}, \quad [2]$$

adimensionnée par le débit  $q_{NS0}$  correspondant à un régime non glissant. Le nombre de Knudsen aval (en sortie de conduite)  $Kn_o = \lambda_o / 2h$  est défini par rapport à la profondeur du microcanal, et le rapport des pressions amont sur aval est noté  $\Pi$ . Les coefficients  $\alpha_i$ , qui

dépendent du rapport de forme  $a = h/b$  de la section et de  $\sigma$ , sont obtenus suite à la résolution numérique d'équations transcendentes et d'un lissage polynomial ; ils peuvent ensuite être tabulés (Aubert and Colin, 2001). Par exemple, dans le cas d'un écoulement plan, pour lequel le rapport de forme  $a \rightarrow 0$ ,  $\alpha_{1(a \rightarrow 0)} = 12(2 - \sigma)/\sigma$  et  $\alpha_{2(a \rightarrow 0)} = 27$ . Le débit trouvé à l'aide de l'équation [2] apparaît supérieur au débit prédit par un modèle classique du premier ordre (qu'on retrouve formellement en posant  $\alpha_2 = 0$ ), l'augmentation sensible étant de l'ordre de 13 % pour une conduite de section carrée ( $a = 1$ ) avec  $Kn_o = 0,1$ . Notons qu'il existe d'autres types de conditions aux limites d'ordre supérieur, dont certaines conduisent à prédire un débit non pas supérieur mais inférieur à celui prévu par un modèle du premier ordre, d'où un intérêt renforcé de confrontation expérimentale.

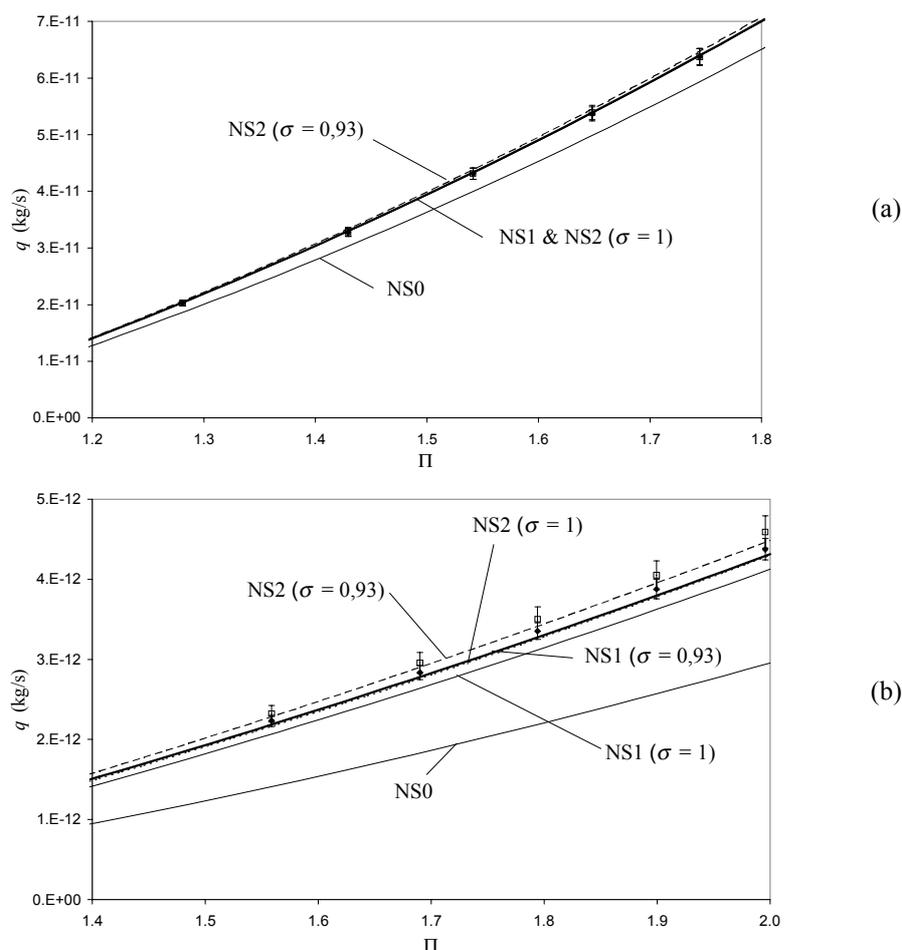


FIG. 1 – Débits théoriques et expérimentaux. Echantillon n° 2,  $2h = 1,88 \mu\text{m}$ ,  $T = 294,2 \text{ K}$ .  
 a) gaz N<sub>2</sub>,  $0,01 \leq Kn_o \leq 0,017$ ,  $P_o = 2 \cdot 10^5 \text{ Pa}$ . b) gaz He,  $0,05 \leq Kn_o \leq 0,1$ ,  $P_o = 1,026 \cdot 10^5 \text{ Pa}$

Un exemple typique de confrontation des débits théoriques et expérimentaux est représenté figure 1. La valeur de la profondeur des micro-canaux, difficile à déterminer avec une grande précision (Anduze, 2000), est calée lorsque les modèles traditionnel (noté NS1 - avec un glissement de Maxwell au premier ordre) et proposé ici (noté NS2 - avec prise en compte d'un glissement au second ordre) coïncident, ce qui est le cas pour de faibles valeurs de  $Kn_o$ . Pour ces faibles nombres de Knudsen, l'influence de la valeur du coefficient d'accommodation pour la quantité de mouvement  $\sigma$  est également négligeable. L'augmentation de la raréfaction, par

baisse du niveau de pression aval  $P_o$ , ou par utilisation d'un gaz offrant un plus grand  $\lambda$  (passage de l'azote à l'hélium), conduit à un écart entre les modèles NS1 et NS2, et à un rôle significatif joué par  $\sigma$ . Il apparaît que les points expérimentaux suivent parfaitement le modèle NS2, avec un coefficient  $\sigma = 0,93$ . Ceci est confirmé par une série d'essais effectués sur les différents échantillons, à différentes pressions, aussi bien avec de l'azote que de l'hélium. Pour un rapport des pressions amont/aval donné, on peut regrouper les résultats sur un même schéma, sous forme adimensionnelle (fig. 2). Jusqu'à  $Kn_o \approx 0,05$ , les modèles traditionnel (NS1) et proposé ici (NS2) prédisent tous deux correctement le débit effectivement mesuré. Pour  $0,05 \leq Kn_o \leq 0,25$ , le modèle NS1 n'est plus assez précis, alors que le modèle NS2 reste en parfait accord avec l'expérience. Au delà, pour  $Kn_o > 0,25$ , le modèle NS2, bien que plus précis que NS1, commence à montrer un écart sensible vis-à-vis de l'expérience.

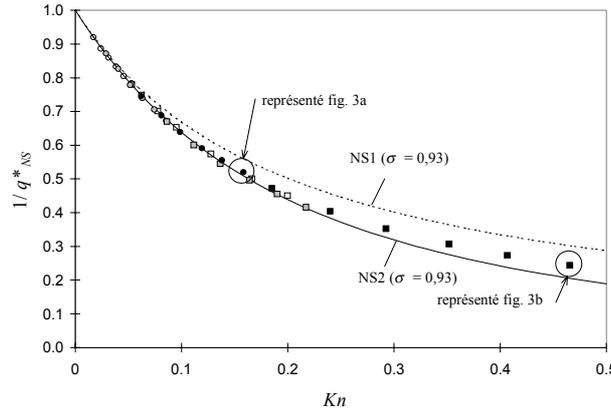


FIG. 2 – Débit massique adimensionné. Modèles NS1 et NS2 et mesures expérimentales, pour  $\Pi = 1,8$  et  $T = 294,2\text{K}$ . Échantillons n° 2 (blanc), n° 3 (grisé), n° 4 (noir). Gaz :  $\text{N}_2$  (ronds) et He (carrés).

### 3 Equations quasi-hydrodynamiques avec conditions aux limites d'ordre 1 (QHD1)

Considérant un écoulement gazeux visqueux, compressible et conducteur de la chaleur, on note  $\rho$  la masse volumique,  $\vec{u}$  la vitesse,  $P$  la pression,  $\varepsilon$  l'énergie interne massique,  $T$  la température, ces différentes grandeurs dépendant de  $(\vec{x}, t)$ ,  $r$  la constante massique du gaz parfait,  $c_v = r/(\gamma - 1)$  et  $c_p = \gamma r/(\gamma - 1)$  les chaleurs massiques à volume et pression constants, et  $\gamma = c_p/c_v$  le rapport de ces dernières. Construit phénoménologiquement (Sheretov, 2000), le système QHD, comme le système NS, sans prendre en compte les forces extérieures, peut être écrit sous la forme des lois de conservation locales de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j}_m &= 0, & \frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \text{div}(\vec{j}_m \otimes \vec{u}) + \vec{\nabla} P &= \text{div} \Sigma, \\ \frac{\partial}{\partial t} [\rho (\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon)] + \text{div} [\vec{j}_m (\frac{\vec{u}^2}{2} + \varepsilon + \frac{P}{\rho}) + \vec{q}] &= \text{div}(\Sigma \cdot \vec{u}). \end{aligned} \quad [3]$$

Ici, le vecteur flux de masse  $\vec{j}_m$ , le tenseur des contraintes  $\Sigma$  et le vecteur flux thermique  $\vec{q}$  se calculent par  $\vec{j}_m = \rho(\vec{u} - \vec{w})$ ,  $\Sigma = \Sigma_{NS} + \rho(\vec{u} \otimes \vec{w})$  et  $\vec{q} = \vec{q}_{NS}$ , avec  $\vec{q}_{NS} = -k \vec{\nabla} T$ ,  $\vec{w} = (\tau/\rho)[\rho(\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u} + \vec{\nabla} P]$  et  $\Sigma_{NS} = \eta[(\vec{\nabla} \otimes \vec{u}) + (\vec{\nabla} \otimes \vec{u})^T - (2/3)I \text{div} \vec{u}]$ . Les symboles  $\otimes$  et  $\cdot$  désignent respectivement les opérations de produits tensoriel et scalaire directs. Dans le calcul de divergence de  $(\vec{j}_m \otimes \vec{u})$ , l'opérateur  $\text{div}$  est appliqué au premier vecteur. L'indice  $()^T$  indique la transposition.

Pour fermer le système, on ajoute les équations du gaz dilué  $P = \rho r T$  et  $\varepsilon = c_v T$ . Le temps caractéristique  $\tau$ , le coefficient de viscosité dynamique  $\eta$  et le coefficient de conductivité thermique  $k$  sont liés par les relations  $\tau = \eta / (P Sc)$  et  $k = c_p \eta / Pr$  avec  $\eta = \eta(T) = \eta_0 (T/T_0)^\omega$ , où  $\eta_0$  est la viscosité dynamique à la température  $T_0$ ,  $\omega \in [0,5; 1]$ ,  $Pr$  est le nombre de Prandtl. Le nombre de Schmidt  $Sc$  est égal 0,77 pour un gaz monoatomique et à 0,74 pour un gaz diatomique (Sheretov, 2000). Le libre parcours moyen  $\lambda$  peut être calculé par la formule de Chapman (Abramovich, 1991)  $\lambda = (\eta/P) \sqrt{\pi r T / 2}$ , ou celle de Bird (Bird, 1998)  $\lambda = [2(7-2\omega)(5-2\omega)\eta / (15P)] \sqrt{r T / 2\pi}$ . Le système QHD diffère du système classique NS par des termes divergents supplémentaires en facteur d'un petit paramètre  $\tau$ , qui apparaissent par l'introduction d'un lissage temporel supplémentaire dans la définition des grandeurs macroscopiques (Sheretov, 2000). Pour  $\tau = 0$ , le système QHD dégénère en système NS.

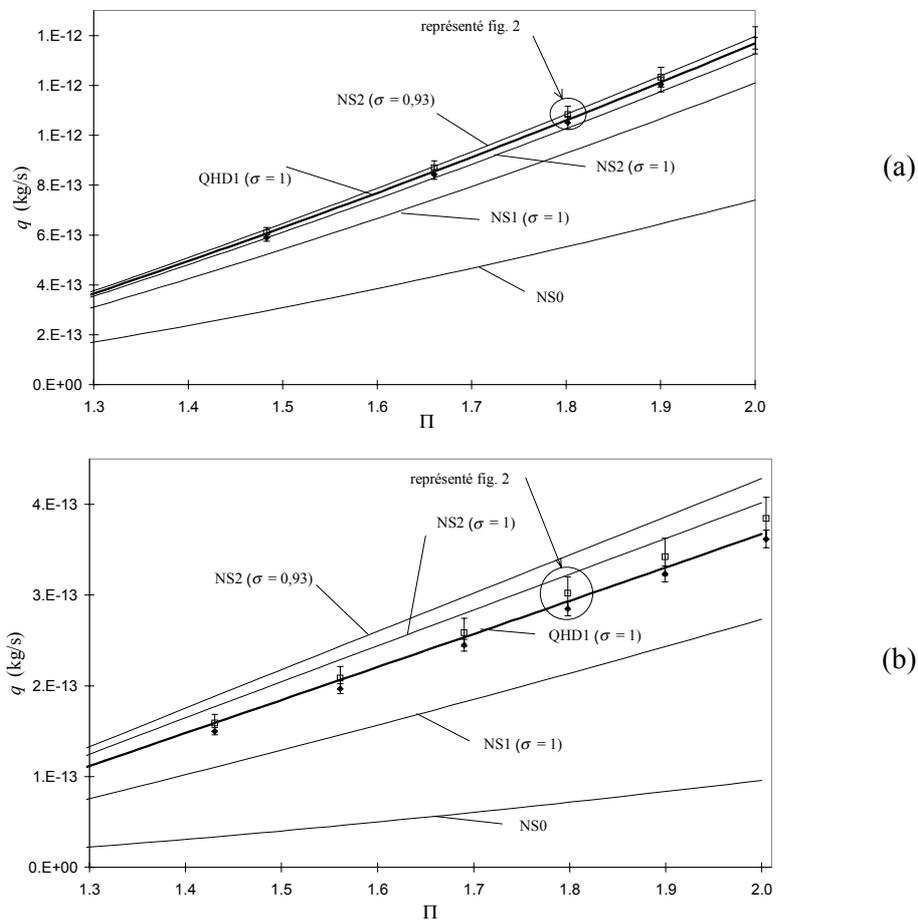


FIG. 3 – Débit massique. Modèles QHD1 et NS2 et mesures expérimentales. Echantillon n° 4.

$$P_0 = 75 \text{ kPa}, T = 294,2 \text{ K}$$

a) Gaz :  $N_2$  ;  $\eta = 17,8 \cdot 10^{-6} \text{ Pa s}$  ;  $r = 2,962 \cdot 10^2 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$  ;  $Sc = 0,74$

b) gaz :  $He$  ;  $\eta = 19,6 \cdot 10^{-6} \text{ Pa s}$  ;  $r = 2,079 \cdot 10^3 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$  ;  $Sc = 0,77$

Le système peut être résolu assez simplement dans le cas d'un écoulement gazeux plan, avec conditions aux limites du premier ordre (Elizarova and Sheretov, 2002), et conduit au débit

$$q^*_{QHD1} = \frac{q_{QHD1}}{q_{NS0}} = 1 + 12 \frac{2-\sigma}{\sigma} \frac{Kn_o}{\Pi+1} + \frac{24}{A^2 Sc} Kn_o^2 \ln \Pi, \quad [4]$$

dans lequel le coefficient  $A$  est égal à  $\sqrt{\pi/2}$  pour la formule de Chapman et à  $2(7-2\omega)(5-2\omega)/(15\sqrt{2\pi})$  pour la formule de Bird. L'équation [4] est à comparer à [2], établie à l'aide du modèle NS2, et qui dans le cas d'un écoulement plan ( $a \rightarrow 0$ ) s'écrit

$$q^*_{NS2(a \rightarrow 0)} = 1 + 12 \frac{2-\sigma}{\sigma} \frac{Kn_o}{\Pi+1} + 27 Kn_o^2 \ln \Pi. \quad [5]$$

Ces deux équations ne diffèrent que par le coefficient de leur dernier terme. On peut les confronter toutes deux aux mesures effectuées sur l'échantillon n° 4, car c'est celui dont le rapport de forme est le plus faible. Pour le calcul de  $q$ , l'erreur introduite par l'utilisation de [5] à la place de [2] est de 0,6 %, ce qui permet de penser que l'effet 2D, non pris en compte par la modèle QHD1, peut être négligé, ce qui n'est pas le cas des autres échantillons. L'écart entre les modèles NS2 et QHD1 reste faible pour les mesures avec l'azote, le nombre de Knudsen étant modéré (fig. 3a). Il devient significatif avec l'hélium (fig. 3b). La meilleure corrélation est trouvée avec  $\sigma = 0,93$  dans le cas de l'azote et  $\sigma = 1$  dans le cas de l'hélium. Les paramètres  $A$  et  $\lambda$  sont calculés à l'aide de la formule de Chapman. Les résultats correspondant à celle de Bird sont présentés dans (Elizarova & Sheretov, 2002).

#### 4 Conclusions

Les deux modèles proposés permettent d'ores et déjà d'étendre le domaine d'applicabilité du régime d'écoulement glissant jusqu'à des nombres de Knudsen de l'ordre de 0,2 à 0,5, ce qui présente l'avantage de donner lieu à des solutions analytiques facilement exploitables dans un régime traditionnellement traité par des approches moléculaires. Des essais systématiques plus nombreux sont en préparation pour confronter les deux modèles, avec des gaz et des états de surfaces variés, et des niveaux de raréfaction plus poussés encore. Les discussions porteront notamment sur le rôle des effets 2D et les moyens d'accéder à la valeur de  $\sigma$ .

#### Références

- Abramovich, G.N., 1991 (en russe). Applied gas dynamics, **2**, Ed. Nauka, Moscou.
- Anduze, M., 2000 Etude expérimentale et numérique de microécoulements liquides dans les microsystèmes fluidiques. Thèse de l'INSAT, Toulouse.
- Aubert, C. and Colin, S., 2001 High-order boundary conditions for gaseous flows in rectangular microchannels. *Microscale Thermophys. Eng.*, **5**(1), 41-54.
- Bird, G.A., 1998 Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Clarendon Press, Oxford.
- Deissler, R.G., 1964 An analysis of second-order slip flow and temperature-jump boundary conditions for rarefied gases. *Int. J. Heat Mass Transfer*, **7**, 681-694.
- Elizarova, T.G. and Sheretov, Y.V., 2002 Analyse du problème de l'écoulement gazeux dans les microcanaux par les équations quasi hydrodynamiques, In Microfluidique. Microécoulements liquides et gazeux : phénomènes physiques et applications. SHF, 309-318.
- Lalonde, P., 2001. Etude expérimentale d'écoulements gazeux dans les microsystèmes à fluides. Thèse de l'INSAT, Toulouse.
- Sheretov, Y.V., 2000 (en russe) Mathematical modeling of gas and liquid flows based on quasihydrodynamic and quasigasdynamic equations. Tver University Ed., Tver.
- Sone, Y., 1997 Continuum gas dynamics in the light of kinetic theory and new features of rarefied gas flows. In: C. Shen (Editor), Proceedings of 20th Int. Symp. on Gas Dynamics. Peking University Press, Beijing, 3-24.
- Xie, C., Fan, J. and Shen, C., 2002 Rarefied gas flows in micro-channels, Proceedings of 23th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics, Vancouver, Canada.