

# Calcul du débit de micro-écoulements gazeux

Jean-Claude Lengrand<sup>1</sup>, Tatiana G. Elizarova<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire d'Aérothermique du CNRS, 1C, av. de la recherche scientifique, 45071 Orléans Cedex 2

<sup>2</sup>Institut de modélisation mathématique de l'Académie des Sciences de Russie, 4a Minskaïaya sq., 125047 Moscou, Russie

## Résumé :

L'écoulement d'un gaz dans un microcanal impose généralement le recours à des notions relatives aux écoulements raréfiés. On rappelle d'abord ces notions. On exprime ensuite le débit d'un microcanal plan ou cylindrique en fonction du gradient de pression, en utilisant des approches continues de complexité croissante. L'approche quasi hydrodynamique (QHD) donne (dans la limite  $Kn < 0,2-0,5$ ) des résultats très proches de l'approche moléculaire BGK. Enfin, on montre la possibilité de simuler expérimentalement des micro-écoulements gazeux en utilisant des géométries à plus grande échelle et des pressions plus basses.

## Abstract :

A gas flowing through a microchannel is generally associated with the concept of rarefied flow. The paper includes a short presentation of this concept. Then the flow-rate of a 2D or axisymmetric microchannel is expressed, based on different approaches. The quasi hydrodynamic equations (QHD) result in a flow-rate very close to that obtained by the BGK approach, provided the Knudsen number remains less than 0.2-0.5. Finally, one discusses the possibility of simulating experimentally gaseous micro-flows using large-scale devices and low pressures.

## Mots clefs :

## Microfluidique ; Gaz raréfiés

### 1 Introduction

L'écoulement d'un gaz dans un microcanal est un phénomène que l'on rencontre dans un certain nombre d'applications pratiques telles que micropompes, capteurs miniatures, etc. [1]. Il se caractérise en général par une vitesse faible. Dans certains cas il peut présenter un gradient longitudinal de température (compresseur de Knudsen). Les dimensions caractéristiques et les niveaux de pression rencontrés peuvent être tels qu'une approche classique de ces écoulements (milieu continu régi par les équations de Navier-Stokes) ne convient pas. Il faut alors prendre en compte les effets de raréfaction, soit par une modification de l'approche classique, soit par une description moléculaire.

On rappellera quelques notions relatives aux effets de raréfaction. On traitera la relation entre le débit d'un microcanal et le gradient longitudinal de pression et on comparera les expressions obtenues par diverses approches. Enfin, on utilisera l'analyse dimensionnelle pour discuter la possibilité de simuler un micro-écoulement en utilisant des géométries à plus grande échelle et des pressions plus basses.

### 2 Effets de raréfaction

Les effets de raréfaction font intervenir le libre parcours moyen  $\lambda$  des molécules, défini comme la vitesse thermique moyenne  $\langle c' \rangle = (8RT / \pi)^{1/2}$  multipliée par le temps moyen  $\tau_c$  entre collisions. Ici,  $R$  désigne la constante massique des gaz parfaits et  $T$  la température. L'expression de  $\tau_c$  et donc de  $\lambda$  dépend du modèle d'interaction moléculaire. Un modèle largement utilisé actuellement est le modèle VHS (*V*ariable *H*ard

*Spheres*) [2]. Ce modèle conduit à une loi de viscosité  $\mu \propto T^\omega$ , avec un exposant  $\omega$  quelconque, que l'on tire de la loi de viscosité du gaz :  $\omega = (d\mu/dT)/(\mu/T)$ . Ce modèle est plus général que le modèle "sphères rigides" qui en est un cas particulier extrême correspondant à  $\omega = 1/2$ . L'autre cas particulier extrême correspond à  $\omega = 1$  (molécules de Maxwell). En désignant par  $\rho$  la masse volumique, on trouve le libre parcours moyen pour le modèle VHS :

$$\lambda = K(\omega) \times \frac{\mu(T)}{\rho (2\pi RT)^{1/2}} \text{ avec } K(\omega) = \frac{2(7-2\omega)(5-2\omega)}{15}. \quad (1)$$

Le nombre de Knudsen se définit comme  $Kn = \lambda / H$ , où  $H$  est une dimension caractéristique du problème : profondeur d'un microcanal rectangulaire ou diamètre d'un microcanal circulaire.

Le mode de réflexion des molécules du gaz sur les parois joue un rôle important dans les écoulements raréfiés. On définit le coefficient d'accommodation d'une grandeur  $Q$  quelconque portée par les molécules comme  $a_Q = (\dot{Q}_i - \dot{Q}_r) / (\dot{Q}_i - \dot{Q}_w)$  où  $\dot{Q}_i$  désigne le flux incident de la grandeur  $Q$ , et  $\dot{Q}_r$  le flux réfléchi effectivement.  $\dot{Q}_w$  est le flux qui serait réfléchi si l'interaction était diffuse avec accommodation parfaite (les molécules semblent alors provenir d'un gaz en équilibre à la température de paroi  $T_w$ ). En principe, il existe une valeur de  $a_Q$  pour chaque grandeur  $Q$  considérée (quantité de mouvement normale, énergie rotationnelle, etc...). Mais on utilise souvent le modèle de Maxwell dans lequel toute molécule incidente a une probabilité  $a$  d'être réémise de manière diffuse et une probabilité  $1-a$  d'être réfléchie spéculairement. Alors tous les coefficients d'accommodation sont égaux simplement à  $a$ .

En écoulement classique, dans l'expression des conditions aux limites à l'interface gaz-paroi, on admet que la vitesse du gaz est égale à celle de la paroi (nulle en général) et que la température  $T_g$  du gaz est égale à la température  $T_w$  de la paroi. Il s'agit d'une approximation qui n'est légitime qu'aux très petites valeurs de  $Kn$ . Pour des applications en microfluidique, il faut tenir compte du glissement de vitesse  $u_s$  et du saut de température  $T_g - T_w$ . La contribution principale au glissement de vitesse est liée au gradient normal de vitesse. Pour un écoulement isotherme, Deissler [3] propose une formulation au 2nd ordre en  $\lambda$  :

$$u_s = \frac{2 - a_u}{a_u} \lambda \left( \frac{\partial u}{\partial y} \right)_w - \frac{9\lambda^2}{16} \left( 2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)_w, \quad (2)$$

où  $a_u$  est le coefficient d'accommodation de la quantité de mouvement tangentielle. On a supposé ici l'axe  $y$  orienté de la paroi vers l'écoulement. De nombreuses autres expressions ont été proposées, en particulier pour des écoulements non isothermes. En général, on ne retient que le premier terme dans le membre de droite de l'équation (2) (formulation au 1er ordre). On trouvera plus de détails sur les effets de raréfaction dans [1] et [4].

### 3 Débit d'un microcanal

#### 3.1 Section rectangulaire

Considérons l'écoulement bidimensionnel isotherme dans un microcanal de longueur  $L$  (dans la direction  $x$ ) et de profondeur  $H$  (dans la direction  $y$ ) avec  $H \ll L$ . La discussion reste valable si l'écoulement est limité par une largeur  $D$  (dans la direction  $z$ ) avec  $H \ll D \ll L$ . Elizarova et Sheretov proposent un système d'équations "quasi hydrodynamiques" (QHD) qui contiennent des termes dissipatifs complémentaires par rapport aux équations de Navier-Stokes (NS). En appliquant le système QHD à ce problème, et en utilisant les conditions de glissement du premier ordre, ils trouvent le débit massique par unité de largeur en fonction du gradient longitudinal de pression  $dp/dx$  [5] :

$$q = - \frac{(H/2)^3}{\mu RT} \left[ \frac{2}{3} p \frac{dp}{dx} + 4 \frac{2 - a_u}{a_u} p \frac{dp}{dx} \left( \frac{\lambda}{H} \right) + \frac{16\pi}{Sc K(\omega)^2} p \frac{dp}{dx} \left( \frac{\lambda}{H} \right)^2 \right], \quad (3)$$

où  $Sc$  est le nombre de Schmidt. Pour des molécules VHS, il est égal à  $5/(7-2\omega)$  d'après [2, appendix A]. Si l'on ne retient que le premier terme du crochet, on retrouve le résultat obtenu par les équations de Navier-Stokes sans glissement de vitesse (CL0) c'est-à-dire le débit de Poiseuille

$$q_{Poiseuille} = -2 \left( \frac{H}{2} \right)^3 \frac{p}{3\mu RT} \times \frac{dp}{dx} . \quad (4)$$

Si l'on retient les deux premiers termes dans le membre de droite de l'équation (3), on retrouve le résultat obtenu par les équations NS avec glissement de vitesse au premier ordre (CL1). Si l'on utilise les équations NS avec glissement de vitesse au deuxième ordre (CL2), on trouve un résultat analogue à l'équation (3), mais avec un coefficient différent devant le dernier terme du crochet. Il a été montré [3,5] que les approches QHD et CL2 conduisaient à des débits proches des valeurs expérimentales pour  $Kn < 0.2-0.5$ . Dans Ref. [1], au chapitre 2, on mentionne un système d'équations dit quasi gazodynamique (QGD). Pour le présent problème, les équations QGD et QHD sont identiques et, dans ce qui suit, tout ce qui concerne les équations QHD s'applique aussi aux équations QGD.

On a comparé ici le résultat donné par les différentes approches (CL0, CL1, QHD) avec celle proposée par Cercignani et ses collaborateurs (Cerc.) [6-8]. Cette dernière approche consiste à résoudre l'équation de Boltzmann avec l'approximation BGK, valable au voisinage de l'équilibre thermodynamique. Elle suppose que le profil transversal de vitesse est parabolique. On trouve dans [6-8] des tables du débit adimensionné

$$q^* = \frac{q}{q_0} \text{ avec } q_0 = \frac{-H^2}{(2RT)^{1/2}} \frac{dp}{dx} \quad (5)$$

en fonction d'un paramètre de raréfaction  $\delta$ . Il est intéressant de noter que ces tables permettent de traiter le cas où les parois supérieure et inférieure du canal ont des coefficients d'accommodation différents, comme cela peut se produire dans un microcanal.. Cette possibilité existe aussi dans les approches CL0, CL1, CL2 et QHD mais n'a pas été utilisée dans le présent travail.

Sous forme adimensionnée, et en utilisant l'équation (1) pour relier  $\mu$  et  $\lambda$ , l'équation (3) s'écrit

$$q^* = \frac{K(\omega)}{2\pi^{1/2}} \left[ \frac{Kn^{-1}}{6} + \frac{2 - a_u}{a_u} + \frac{4\pi}{Sc K(\omega)^2} Kn \right] . \quad (6)$$

Une comparaison avec [6] impose de relier le nombre de Knudsen utilisé ici au paramètre  $\delta$  ("reciprocal Knudsen number") utilisé par Cercignani. On trouve dans [7] la définition  $\delta = p H / \mu$ . Pour que la formule soit homogène, il faut comprendre  $\delta = p H / (\mu \cdot (2RT)^{1/2})$  car les vitesses sont rapportées à  $(2RT)^{1/2}$ . On trouve alors, toujours en utilisant l'équation (1),  $Kn = \frac{1}{\delta} \times \frac{K(\omega)}{2\pi^{1/2}}$ . On compare donc les résultats de [6-8] et la formule (6), dans laquelle on prend 1, 2 ou 3 termes entre crochets, selon l'approche choisie.

Un exemple de comparaison est donné sur la Fig. 1 pour de l'air ( $\omega$  est pris égal à 0,769 pour reproduire sa loi de viscosité au voisinage de la température ambiante) et en supposant l'accommodation parfaite à la paroi. On voit que le modèle QHD permet de retrouver le minimum du débit réduit  $q^*$  en fonction de  $Kn$  alors que les modèles CL0, CL1 donnent une évolution monotone. Le minimum est obtenu pour

$Kn = \frac{K(\omega)}{2} \left( \frac{Sc}{6\pi} \right)^{1/2}$ , soit  $Kn = 0,28$  dans notre exemple. La courbe libellée "Cerc.App." est pratiquement

confondue avec la courbe QHD. Elle correspond à l'approximation

$$q^* = \left[ \frac{\delta}{6} + \sigma + \frac{2\sigma^2 - 1}{\delta} \right] \quad (7)$$

donnée dans [8] quand  $Kn \rightarrow 0$  et en supposant ici  $\sigma = 1$ . Compte tenu de la relation entre  $\delta$  et  $Kn$ , le premier terme du membre de droite de l'équation (7) est identique à la solution CL0. On voit sur la figure que pour  $Kn < 0.2-0.5$ , le débit QHD est proche de celui donné par l'approche BGK. Par une méthode différente, Xu et Li [9] mettent également en évidence un minimum du débit réduit (pour  $Kn \approx 0,6$ ).

Comme le rappelle Cercignani [10], il est difficile de donner une interprétation physique à ce minimum et sa mise en évidence expérimentale par Knudsen a même été mise en doute. On peut toutefois la trouver dans une comparaison entre le débit effectif et le débit de Poiseuille. En se limitant à des corrections du 2<sup>ème</sup> ordre provenant de la modélisation du gaz ou des conditions aux limites, on obtient une relation du type

$$\frac{q}{q_{Poiseuille}} = 1 + A_1 Kn + A_2 Kn^2, \quad (8)$$

relation qui s'interprète comme un développement limité en  $Kn$ . et qui a une signification physique intuitive. Or Knudsen et Cercignani ont choisi la normalisation  $q/q_0$  (équation (5)). En utilisant l'équation (1), on voit que

$$\frac{q_{Poiseuille}}{q_0} = \frac{A_0}{Kn} \text{ avec } A_0 = \frac{K(\omega)}{12\pi^{1/2} \times 2RT} \quad (9)$$

et que le débit réduit  $q/q_0$  est nécessairement de la forme

$$\frac{q}{q_0} = A_0 \left( \frac{1}{Kn} + A_1 + A_2 Kn \right), \quad (10)$$

expression qui hérite de l'interprétation physique de l'équation (8) et qui présente un minimum si  $A_2$  est positif. L'équation (6) est effectivement de cette forme.

### 3.2 Section circulaire

Considérons maintenant un microcanal isotherme de section circulaire et de diamètre  $H$ . On trouve dans [4] une application des équations QHD à ce problème [4] et une expression du débit en fonction des conditions aux extrémités d'un microcanal. Cette expression a été obtenue par intégration d'une expression du débit à partir du gradient local de pression

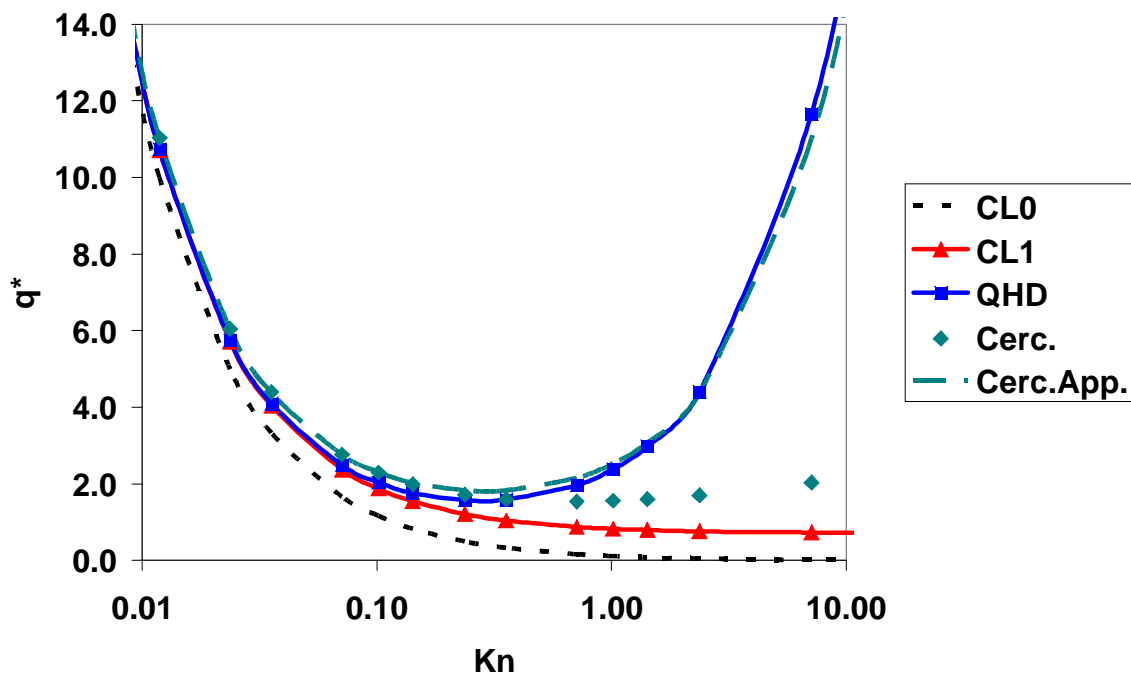


FIG. 1 – Débit d'un canal de section rectangulaire (variable réduite  $q^*$ ) pour  $\omega = 0,769$  et  $a_u = 1$

$$q = -\frac{\pi H^4}{8\mu RT} \left[ p \frac{dp}{dx} + 4 \frac{2 - a_u}{a_u} p \frac{dp}{dx} \left( \frac{\lambda}{H} \right) + \frac{16\pi}{Sc K(\omega)^2} p \frac{dp}{dx} \left( \frac{\lambda}{H} \right)^2 \right]. \quad (11)$$

Les trois termes du crochet ont la même signification que dans le cas précédent (modèles CL0 pour le 1er terme, CL1 pour les deux premiers). On peut encore faire une comparaison avec des résultats obtenus par Cercignani (Cerc.) avec l'approche BGK et tabulés dans [8] et avec des résultats obtenus par Knudsen (Knud.) et cités dans [8]. Il faut pour cela utiliser la même relation entre  $\delta$  et  $Kn$  et normaliser le débit par

$$q^* = \frac{q}{q_0} \text{ avec } q_0 = \frac{-\pi H^3}{(2RT)^{1/2}} \frac{dp}{dx}. \quad (12)$$

On trouve

$$q^* = \frac{K(\omega)}{2\pi^{1/2}} \left[ \frac{Kn^{-1}}{4} + \frac{2 - a_u}{a_u} + \frac{4\pi}{Sc K(\omega)^2} Kn \right]. \quad (13)$$

Le débit réduit présente un minimum pour  $Kn = \frac{K(\omega)}{4} \left( \frac{Sc}{\pi} \right)^{1/2} = 0,34$  (en utilisant les mêmes valeurs

de  $\omega$  et  $a_u$  que précédemment). La comparaison est donnée sur la figure 2 avec les résultats de Cercignani et de Knudsen qui sont presque confondus et qui présentent un minimum à peine visible pour  $Kn \approx 2 - 3$ .

Notons que l'approche BGK impose que le nombre de Prandtl soit égal à 1. Une correction pour  $Pr \neq 1$  est proposée dans [8] pour un canal circulaire

$$q(\delta, Pr) = q(\delta, 1) + (1 - Pr) \frac{\delta}{4}. \quad (14)$$

Elle n'a pas été utilisée ici.

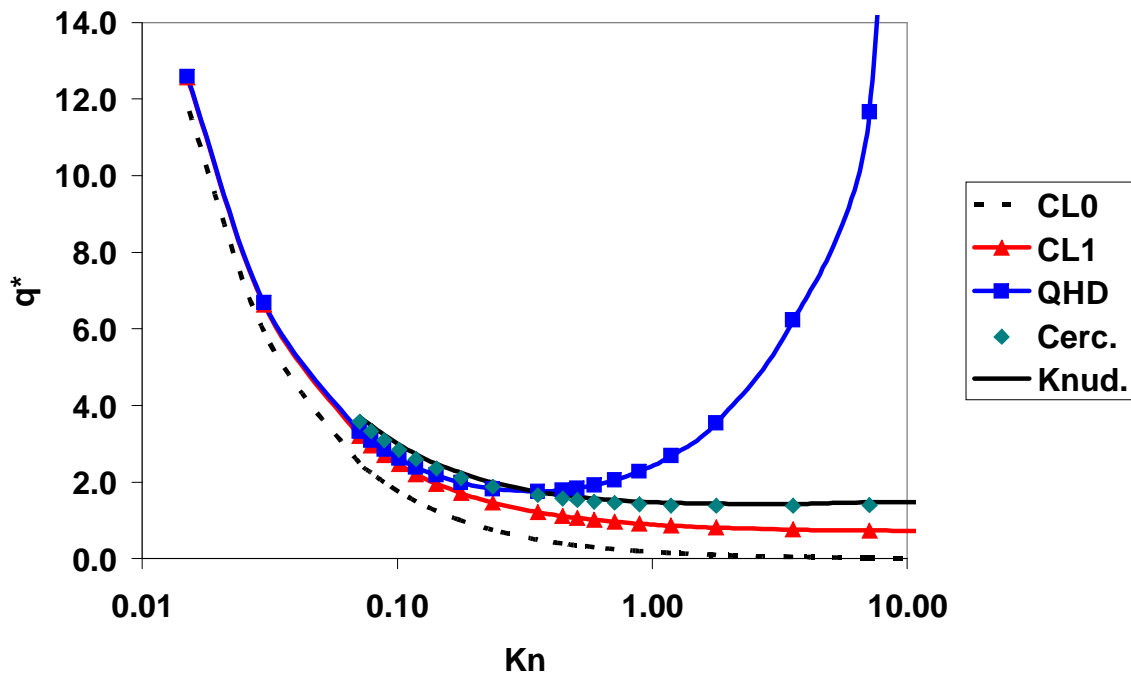


FIG. 2 – Débit d'un canal de section circulaire (variable réduite  $q^*$ ) pour  $\omega = 0,769$  et  $a_u = 1$

## 4 Similitude

A partir de la relation entre débit et gradient de pression, on peut calculer, par intégration le long du canal, le débit en fonction du rapport de pression entre l'entrée et la sortie. On trouvera dans [4] des expressions qui correspondent respectivement aux formulations CL0, CL1, CL2 et QHD dans le cas isotherme. Les expressions les plus complètes sont utilisables jusqu'à des nombres de Knudsen  $Kn < 0,2-0,5$  environ.

Par ailleurs, lorsque le nombre de  $Kn$  est très grand, une approche moléculaire libre permet encore d'obtenir, même dans le cas non isotherme, le débit en fonction du rapport de pression, du coefficient d'accommodation  $a_u$  et du rapport des températures aux deux extrémités [4].

Toutes ces expressions comportent des incertitudes liées à la validité de l'approche et à la valeur des coefficients qui décrivent l'interaction gaz-surface. En vue de faciliter la validation expérimentale, on peut envisager de travailler en similitude. On a montré [4] qu'aux nombres de Knudsen modérés, l'expression du débit d'un microcanal plan bidimensionnel pouvait se mettre sous forme adimensionnelle

$$s_2 = \frac{H}{L} \times \frac{1}{Kn_2} \times \frac{K(\omega)}{48\pi^{1/2}} \times (r_p^2 - 1) [1 + f(Kn_2, r_p, a_u, \omega)] \quad (15)$$

où  $s_2$  est le rapport des vitesses moléculaires  $s_2 = u_2 / (2RT_2)^{1/2}$  calculé sur la vitesse débitante  $u_2 = q / (\rho_2 A)$ ,  $A$  est l'aire de la section, l'indice 2 se rapporte aux conditions de sortie, l'indice 1 aux conditions d'entrée et  $r_p$  désigne le rapport des pressions  $r_p = p_1/p_2$ . L'incertitude porte sur la fonction  $f$ .

On peut envisager des études en similitude, par exemple en simulant l'écoulement dans un microcanal par un écoulement à pression beaucoup plus basse dans un canal de dimension transversale beaucoup plus grande. En pratique, quand on applique un facteur multiplicatif à  $H$  pour le rendre, par exemple, de dimension centimétrique, alors la longueur  $L$  devient prohibitive si on lui applique le même facteur. Mais on voit sur l'équation (15) qu'il n'est pas indispensable de respecter la similitude géométrique, puisque la dépendance en  $H/L$  est connue ( $H/L$  n'intervient pas dans  $f(\cdot)$ ). Il faut toutefois continuer à respecter les inégalités  $D \gg H$  (effets de bord latéraux négligeables, en écoulement tridimensionnel) et  $L \gg H$  (effets d'extrémité négligeables) qui ont été supposées dans l'établissement de l'équation (15). Sous cette réserve, il suffit de respecter les valeurs de  $Kn_2$  et  $r_p$ , ainsi que les constantes caractéristiques du gaz et de l'interaction gaz-surface ( $\omega$  et  $a_u$ ).

Si les écoulements deviennent plus raréfiés, la dépendance de  $s_2$  en  $H/L$  n'est, en principe, plus assurée. Toutefois le calcul moléculaire libre de [4] montre que  $s_2$  tend vers une évolution en  $H/L$  quand  $L/H \rightarrow \infty$ . On peut donc raisonnablement appliquer les réflexions précédentes sur la similitude pour tout régime de raréfaction.

La similitude ainsi obtenue (pression plus faible, profondeur plus grande, rapport longueur/profondeur plus faible, vitesse adimensionnée  $s_2$  plus grande) est favorable non seulement à l'expérience, mais aussi au calcul : maillage plus facile à créer, vitesse plus facile à extraire du bruit statistique dans un calcul DSMC.

## 5 Conclusion

On a rappelé des notions et des formules relatives aux effets de raréfaction dans les écoulements gazeux en microcanaux. On a exprimé le débit en fonction du gradient longitudinal de pression en utilisant plusieurs approches de complexité croissante. Les approches quasi hydrodynamique (QHD) ou quasi gazodynamique donnent (dans la limite  $Kn < 0,2-0,5$ ) des résultats très proches de l'approche moléculaire BGK. On a présenté les formules de débit sous forme adimensionnelle, ce qui a mis en évidence la possibilité de poursuivre des études dans des conditions plus accessibles à l'expérience et au calcul.

## References

- [1] Colin S.: Microfluidique, Ed. Hermes, 2004.
- [2] Bird G.A.: Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows, Oxford University Press, 1994.
- [3] Colin S., Elizarova T.G., Sheretov Yu.V., Lengrand J.C., Camon H.: Micro-écoulements gazeux: validation expérimentale de modèles QHD et de Navier-Stokes avec conditions aux limites de glissement, Proc. sur CD-ROM du 18<sup>ème</sup> Congrès Français de Mécanique, Nice, 1 - 5 Septembre 2003.
- [4] Lengrand J.C., Elizarova T.G, Shirokov I.A.: Calcul de l'écoulement visqueux compressible d'un gaz dans un microcanal, Proc. sur CD-ROM du 2<sup>ème</sup> Congrès Français de Microfluidique, Toulouse, 14-16 décembre 2004.
- [5] Elizarova T.G., Sheretov Yu.V.: Analyse du problème de l'écoulement gazeux dans les microcanaux par les équations quasi hydrodynamiques, La Houille Blanche, N.5-2003, pp.66 - 72, 2003.
- [6] Cercignani C., Lampis M., Lorenzani S.: Variational approach to gas flows in microchannels, Phys. of fluids, V.16, N.9, pp.3426-3437, 2004.
- [7] Cercignani C., Daneri A. : Flow of a rarefied gas between two parallel plates, J. of applied physics, V.34, N.12, pp.3509-3513, Dec. 1963.
- [8] Cercignani C. : Theory and application of the Boltzmann equation, Scottish Academic Press, Edinburgh and London, 1975.
- [9] Xu K., Li Z : Microchannel flow in the slip regime: gas-kinetic BGK-Burnett solutions, J. Fluid Mechanics, V.513, pp.87-110, 2004.
- [10] Cercignani C. : Rarefied gas dynamics : from basic concepts to actual calculations, Cambridge University Press, 2000.