

**DEBIT GAZEUX DANS UN MICROCANAL :
UNE FORMULE UTILISABLE DU REGIME CONTINU
AU REGIME MOLECULAIRE LIBRE**

*Mass-Flow Rate in a Microchannel:
a Formula Valid from Continuum to Free-Molecular Regimes*

Jean-Claude, Lengrand¹
Laboratoire d'Aérothermique du CNRS,
1C avenue de la recherche scientifique, 45071 Orléans Cedex 2, France
Jean-Claude.Lengrand@cnsr-orleans.fr

Tatiana, G., Elizarova
Institut for Mathematical Modeling, Russian Acad. of Sciences,
Miuskaya sq. 4a, 125047 Moscow, Russia
telizar@yahoo.com

MOTS-CLEFS

vitesse de glissement, nombre de Knudsen, régime de transition, Poiseuille, simulation numérique

ABSTRACT

One considers the flow of a gas through a 2D or axisymmetric microchannel. The objective is to find an expression of the mass-flow rate as a function of pressures at both channel ends, gas properties and gas-surface interaction. Previous expressions are reminded that take into account rarefaction effects through terms of 1st and 2nd order in Knudsen number, added to the Poiseuille formula. The paper emphasizes on the correct evaluation of the additional terms, as concerns viscosity law, wall accommodation, definition of mean free path and physical interpretation of velocity slip. Then the expression of the flow rate in the free molecular regime is presented, based on a numerical simulation at molecular level. Qualitative differences with the previous approach are evidenced: the flow rate is proportional to the difference of end pressures, rather than to the difference of squared pressures. Finally, an interpolation formula is proposed for the intermediate (transitional) regime. It fits with both previous approaches and does not require any additional adjustment.

RESUME

On considère un microcanal plan ou de section circulaire. On recherche une expression du débit qui le traverse en fonction des pressions à ses extrémités, des caractéristiques du gaz en écoulement et de son interaction avec la paroi du canal. On rappelle les expressions du premier et du second ordre en Kn (nombre de Knudsen) qui modifient la formule de Poiseuille pour tenir compte des effets de raréfaction. On insiste sur les précautions à prendre pour une évaluation correcte des différents termes, en particulier pour ce qui concerne la loi de viscosité, l'interaction gaz-surface, la définition du libre parcours moyen et la signification physique de la vitesse de glissement. On présente ensuite l'expression du débit d'un microcanal en régime moléculaire libre, par une simulation numérique à l'échelle moléculaire. On met en évidence les différences qualitatives par rapport à l'approche précédente : le débit massique est proportionnel à la différence des pressions et non plus à la différence des carrés des pressions. Enfin, on propose une formule d'interpolation en Kn pour traiter des écoulements en régime intermédiaire (régime de transition). Celle-ci se raccorde aux deux précédentes approches sans nécessiter de paramètre d'ajustement.

1. INTRODUCTION

L'écoulement d'un gaz dans un canal plan ou de section circulaire est régi classiquement par les équations de Navier-Stokes (NS). L'hypothèse implicite dans cette approche est celle de l'équilibre thermodynamique local. Les molécules présentes dans un "petit" volume fluide (de dimension très inférieure à la dimension transversale H du canal) ont suffisamment de collisions entre elles pour former une population proche de l'équilibre. La vitesse thermique des molécules suit une distribution proche d'une maxwellienne. La distribution transversale de la vitesse de l'écoulement et le débit du canal sont donnés par la solution classique de Poiseuille. Cette description est en défaut dans un microcanal dès lors que le libre parcours moyen λ des molécules n'est plus infiniment petit par rapport à la dimension transversale du microcanal. C'est l'effet de raréfaction.

Tant que le nombre de Knudsen ($Kn = \lambda / H$) reste modéré ($Kn < 0,4$ environ), la raréfaction peut être prise en compte en apportant des modifications à l'approche NS. Il s'agit d'introduire un glissement de vitesse à la paroi et éventuellement un terme non linéaire dans la relation entre contrainte et taux de déformation. On commentera ces modifications et on verra comment elles peuvent conduire à une estimation du débit d'un microcanal. On reste alors dans une approche continue de l'écoulement.

Quand Kn est très grand, ($Kn > 30$ environ), les notions liées aux caractéristiques collisionnelles des molécules (sections efficaces) ne jouent plus aucun rôle, de même que les propriétés de transport qui en dépendent (notamment la viscosité). On présentera une approche moléculaire statistique adaptée à ce régime.

Enfin on présentera une méthode pour évaluer le débit d'un microcanal dans le cas de valeurs intermédiaires du nombre de Knudsen. Il s'agit d'une interpolation entre les solutions données par les deux approches extrêmes, inspirée des *bridging methods* utilisées dans les écoulements raréfiés hypersoniques.

2. APPROCHE CONTINUE.

On traite ici l'écoulement isotherme (à température T) dans un microcanal rectangulaire de longueur L , de largeur D et de profondeur H avec $L \gg D \gg H$. Le débit massique induit par une différence de pression entre les extrémités peut s'écrire sous la forme [Lengrand *et al.*, 2006]

$$q = \left[\frac{D (H/2)^3 p_{\text{aval}}^2}{\mu R T L} \times \frac{r_p^2 - 1}{3} \right] \times \left[1 + A_1 Kn_{\text{aval}} + A_2 Kn_{\text{aval}}^2 \right], \quad (1)$$

où le premier facteur est le débit de Poiseuille, l'indice 2 se rapporte aux conditions aval, r_p est le rapport des pressions $p_{\text{amont}} / p_{\text{aval}}$ aux extrémités du canal, μ est la viscosité du gaz à la température T , R est la constante massique des gaz parfaits, Kn_{aval} est le nombre de Knudsen $\lambda_{\text{aval}} / H$, où le libre parcours moyen λ_{aval} est évalué dans les conditions aval. Les coefficients A_1 et A_2 introduisent respectivement des corrections du premier et du second ordre au débit de Poiseuille.

2.1 Correction au premier ordre

La correction au premier ordre ($A_1 Kn_{\text{aval}}$) trouve son origine dans le fait que le gaz à la paroi a une vitesse longitudinale non nulle u_w . Cette vitesse de glissement s'interprète simplement dans le cas d'une accommodation parfaite du gaz à la paroi. La population de molécules au voisinage de la paroi est composée pour moitié de molécules qui s'éloignent de la paroi, qui viennent directement de la paroi et qui ont donc une vitesse axiale u nulle en moyenne. L'autre moitié provient directement d'une région distante de la paroi d'une quantité voisine du libre parcours moyen λ et la vitesse axiale qui règne dans cette région est $u_w + \lambda (\partial u / \partial y)_w$. La vitesse moyenne des molécules au contact de la paroi est alors

$$u_w = \frac{1}{2} \left(0 + \left(u_w + \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_w \right) \right), \text{ d'où } u_w = \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_w,$$

où y est la coordonnée suivant la normale à la paroi.

Barber et Emerson [2005] discutent les conditions aux limites proposées par différents auteurs et écrivent

$$u_w = \alpha_1 \times \left(\frac{2 - a_u}{a_u} \right) \times \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_w \text{ avec } \alpha_1 = 1,016 \times \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cong 1,1466. \quad (2)$$

Des termes supplémentaires devraient intervenir dans le cas d'un écoulement non isotherme et dans le cas d'une paroi présentant une courbure dans le sens de l'écoulement (serpentin). a_u est le coefficient d'accommodation de la quantité de mouvement tangentielle lors des collisions gaz-surface. α_1 est un coefficient qui provient d'un raisonnement plus rigoureux que le précédent, à partir de la théorie cinétique (équation de Boltzmann). Ce coefficient est source de difficultés :

- Le facteur 1,016 est remplacé par 0,98737 par certains auteurs, suite à une approche différente pour résoudre l'équation de Boltzmann.
- Il a été établi pour une accommodation parfaite ($a_u = 1$) et dépend de a_u pour une accommodation partielle.
- Sa valeur a été établie pour des molécules *sphères rigides* (donc pour un gaz dont la viscosité μ varie avec la température comme $\mu \propto T^{1/2}$).
- Beaucoup d'auteurs le prennent égal à 1.

Comme le coefficient d'accommodation est obtenu par ajustement sur l'expérience pour obtenir un débit correct, tout changement sur α_1 se traduit par une conclusion différente quant à la valeur du coefficient d'accommodation. Par exemple, Barber & Emerson [2005] montrent que certaines expériences de Colin *et al.* [2004] s'interprètent par des coefficients d'accommodation $a_u = 0,93$ si on prend $\alpha_1 = 1$ et par une accommodation quasi parfaite ($a_u = 0,998$) si on prend $\alpha_1 = 1,1466$.

On peut ajouter que la définition même du libre parcours moyen est source de confusion. Bird [1994] démontre que pour un gaz VHS (*Variable Hard Spheres*), la loi de viscosité est de la forme $\mu \propto T^\omega$ et le libre parcours moyen se relie aux grandeurs macroscopiques de l'écoulement par

$$\lambda = K(\omega) \times \frac{\mu(T)}{\rho(2\pi RT)^{1/2}} \text{ avec } K(\omega) = \frac{2(7-2\omega)(5-2\omega)}{15}. \quad (3)$$

où ρ est la masse volumique. Pour $\omega = 1/2$, on trouve une formule valable pour des sphères rigides

$$\lambda = \frac{16}{5} \frac{\mu(T)}{\rho(2\pi RT)^{1/2}} \quad (4)$$

qui diffère légèrement de celle de Chapman, établie également pour des sphères rigides, avec une autre définition du libre parcours moyen :

$$\lambda = \frac{\mu(T)}{\rho} \left(\frac{\pi}{2RT} \right)^{1/2} \quad (5)$$

Par extension, on peut utiliser l'équation (3) pour un gaz dont la loi de viscosité n'est pas une loi en puissance, par exemple pour de l'air dont la viscosité est bien représentée par la loi de Sutherland. Il suffit de considérer ω comme l'exposant d'une loi en puissance ajustée à la température T sur la loi de viscosité : $\omega = (d\mu/dT)/(\mu/T)$. Beaucoup d'auteurs utilisent la formule (5) et non pas la formule (3) quel que soit le gaz, ce qui, dans le cas le plus défavorable, entraîne une erreur d'un facteur 1,6 sur le libre parcours moyen et le nombre de Knudsen. Il est donc essentiel de connaître la définition du

libre parcours moyen utilisée par les auteurs des formules ou des résultats expérimentaux que l'on utilise.

Si l'on retient l'équation (2) comme expression de la vitesse de glissement, on peut calculer le profil de vitesse dans une section du canal en fonction du gradient longitudinal de pression dp/dx , puis intégrer d'une extrémité à l'autre. Le coefficient A_1 de l'équation (1) est alors trouvé égal à

$$A_1 = \frac{12\alpha_1}{r_p + 1} \times \left[\frac{2 - a_u}{a_u} \right]. \quad (6)$$

Le coefficient α_1 était absent de [Lengrand *et al.* 2006].

2.2 Correction au deuxième ordre

Plusieurs auteurs ont proposé d'introduire un terme du second ordre dans la vitesse de glissement. Dans le cas d'une accommodation parfaite du gaz à la paroi, et pour un gaz de sphères rigides, Hadjiconstantinou [2004] écrit la vitesse de glissement sous la forme

$$u_w = \alpha_1 \times \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_w - \alpha_2 \times \lambda^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)_w, \quad (7)$$

avec $\alpha_1 = 1,11$ (voir la discussion précédente) et $\alpha_2 = 0,61$.

Barber & Emerson [2005], de même que Karniadakis *et al.* [2005] présentent un tableau des valeurs de α_1 et α_2 proposées par différents auteurs. Pour la plupart des auteurs, α_2 est une constante mais sa valeur varie de -0,5 à 1,309. Pour Lockerby *et al.* elle varie de 0,15 à 0,19 selon la valeur du nombre de Prandtl et du rapport des chaleurs massiques. Par intégration du profil de vitesse à travers le canal, la valeur de α_2 détermine la valeur du coefficient A_2 dans l'équation (1) :

$$A_2 = 24\alpha_2 \times \ln(r_p) / (r_p^2 - 1). \quad (8)$$

Par exemple, pour la valeur $\alpha_2 = 9/8$ proposée par Deissler [1964], on a $A_2 = 27 \times \ln(r_p) / (r_p^2 - 1)$. Cette valeur conduit à un bon accord entre la formule (1) et les débits expérimentaux, jusqu'à un nombre de Knudsen de l'ordre de 0,25 [Aubert & Colin, 2001].

Pour éviter une dérivée seconde dans l'expression de la vitesse de glissement, tout en introduisant une non-linéarité dans l'équation (2), Karniadakis *et al.* [2005] proposent de remplacer celle-ci par

$$u_w = \frac{2 - a_u}{a_u} \times \left[\frac{Kn}{1 - b Kn} \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_w \right],$$

où b est un coefficient de glissement généralisé.

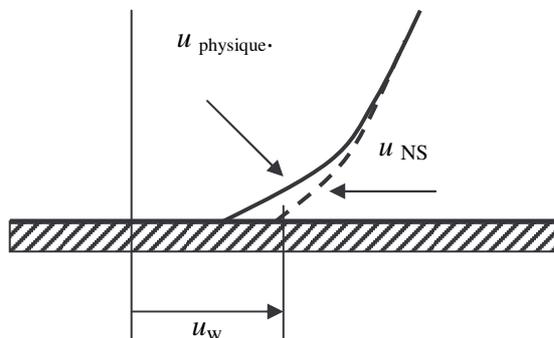


Figure 1 : vitesse de glissement à la paroi

Hadjiconstantinou [2003] attire l'attention sur la signification de la vitesse de glissement. La valeur de u_w est la condition aux limites qu'il faut associer aux équations de Navier-Stokes (NS) pour que celles-ci donnent une description correcte de l'écoulement dans l'ensemble de l'écoulement, mais pas nécessairement au voisinage immédiat de la paroi. Dans la couche de Knudsen (d'une épaisseur de

l'ordre de λ le long de la paroi), le gaz est en fort déséquilibre, la solution NS ne donne pas la vitesse physique du gaz (Fig. 1). En intégrant le profil de vitesse NS à travers l'épaisseur de l'écoulement, on commet donc une erreur sur le débit. L'erreur est du second ordre en Kn et n'affecte pas les calculs au premier ordre. Hadjiconstantinou montre que ce phénomène revient à remplacer α_2 par $(\alpha_2 - \xi)$ dans l'expression de A_2 , avec $\xi = 0,296$ pour un gaz de sphères rigides, d'où

$$A_2 = 24(\alpha_2 - \xi) \times \ln(r_p) / (r_p^2 - 1). \quad (9)$$

Ainsi, la détermination du coefficient du second ordre à partir de résultats expérimentaux de débit conduit à $(\alpha_2 - \xi)$ et non pas à α_2 .

Des questions subsistent quant à la formulation au second ordre de la vitesse de glissement : Comment α_2 doit-il être modifié dans le cas d'une accommodation partielle ? Karniadakis *et al.* [2005] mettent l'expression $(2 - a_u)/a_u$ en facteur des deux termes de la loi de glissement (7). Quelle est la valeur de ξ pour un gaz autre qu'un gaz de sphères rigides ?

Une autre interprétation de la correction du second ordre dans l'expression (1) du débit a été proposée par Elizarova & Sheretov [2003]. L'hypothèse du fluide newtonien (relation linéaire entre contraintes et taux de déformation) suppose des distributions de vitesses moléculaires proches de distributions maxwelliennes. Ils considèrent que dans une situation de déséquilibre thermodynamique, cette condition n'est pas satisfaite et ajoutent des termes supplémentaires aux équations NS. Le système qu'ils obtiennent (équations quasi gazodynamiques QGD ou quasi hydrodynamiques QHD suivant les variantes) peut être appliqué à l'écoulement dans un microcanal, en utilisant une vitesse de glissement exprimée au premier ordre. Ils obtiennent une expression du débit donnée par l'équation (1), avec

$$A_2 = \left[\frac{48\pi}{K(\omega)^2 Sc} \right] \times \frac{\ln(r_p)}{r_p^2 - 1}, \text{ où } Sc \text{ est le nombre de Schmidt } Sc = \frac{5}{7 - 2\omega}. \quad (10)$$

Il se trouve que, malgré une interprétation physique différente, l'équation (10) conduit à une valeur de A_2 pratiquement identique à celle donnée par l'équation (8) avec la condition de Deissler et donc au même bon accord avec l'expérience.

En conclusion, l'équation (1) peut donner une expression du débit correcte jusqu'à des nombres de Knudsen de l'ordre de 0,25, voire 0,4. Toutefois, pour le terme du premier ordre, il doit y avoir cohérence entre la valeur de α_1 et la définition du libre parcours moyen. Alors seulement le coefficient d'accommodation a sa signification physique. Quant au terme du second ordre, il rend compte de plusieurs phénomènes et il est sans doute illusoire de vouloir obtenir son expression par un raisonnement théorique reposant sur des développements limités. En effet, dans la gamme de Kn où il a un intérêt, ce terme est largement plus grand que 1. On peut le considérer comme une description purement phénoménologique et écrire

$$A_2 = B(\omega, a_u) \times \ln(r_p) / (r_p^2 - 1), \quad (11)$$

où B est une fonction de ω et a_u qui sera ajustée sur l'expérience.

Dans le cas d'un microcanal de section circulaire de rayon H , Lengrand *et al.* [2006] donnent une expression du débit obtenue par les équations QHD

$$q_{\text{QHD}} = \left[\frac{\pi H^4 p_{\text{aval}}^2}{8\mu RTL} \times \frac{r_p^2 - 1}{2} \right] \left[1 + \frac{8\alpha_1}{r_p + 1} \times \frac{2 - a_u}{a_u} Kn_{\text{aval}} + \frac{32\pi}{K(\omega)^2 Sc} \times \frac{\ln(r_p)}{r_p^2 - 1} Kn_{\text{aval}}^2 \right]. \quad (12)$$

Conformément à la discussion qui précède, on a introduit dans l'équation (12) le coefficient α_1 qui était absent de la formulation initiale.

Plus généralement, toute approche au second ordre conduit, pour une section circulaire, à une formule analogue à la formule (1)

$$q = \left[\frac{\pi H^4 p_{\text{aval}}^2}{8\mu RTL} \times \frac{r_p^2 - 1}{2} \right] \left[1 + A_1 Kn_{\text{aval}} + A_2 Kn_{\text{aval}}^2 \right], \quad (13)$$

où le premier crochet est le débit de Poiseuille.

Dans les deux cas (canal plan ou de section circulaire), le débit est proportionnel à l'écart entre les carrés des pressions (au moins pour le terme de Poiseuille) : $q \propto p_{\text{amont}}^2 - p_{\text{aval}}^2$.

3. APPROCHE MOLECULAIRE LIBRE

On considère un microcanal qui relie deux réservoirs. Le régime moléculaire libre correspond aux situations dans lesquelles les libres parcours moyens dans les deux réservoirs sont très grands par rapport à la dimension transversale du microcanal. Le gaz de chaque réservoir est considéré comme au repos et en équilibre, sous les pressions et températures $p_{\text{amont}}, T_{\text{amont}}, p_{\text{aval}}, T_{\text{aval}}$. Les caractéristiques locales du gaz dans le canal n'interviennent pas dans le processus. Même si on peut toujours définir une pression et une température localement au sein du canal, chaque molécule se comporte indépendamment de ses voisines et n'a aucune interaction (collision) avec elles. C'est pourquoi il nous semble irréaliste de décrire l'écoulement moléculaire libre avec des notions comme le gradient de pression dp/dx . En revanche, on peut en faire une description moléculaire. On résume ici l'approche présentée par Lengrand *et al.* [2006].

Une molécule de gaz qui pénètre dans le canal à une extrémité ne fera qu'un va-et-vient entre les parois et ressortira de l'autre côté avec une probabilité P ou du même côté avec une probabilité $1-P$.

Dans un gaz au repos en équilibre, le nombre de molécules qui traversent dans un sens donné l'unité d'aire par unité de temps est donné par

$$\dot{N} = n(2RT)^{1/2} / (2\pi^{1/2}),$$

où n est la concentration moléculaire. Cette formule est utilisable pour connaître les flux moléculaires qui pénètrent à chaque extrémité. En multipliant par la masse de la molécule, et l'aire A de la section du microcanal, on fait apparaître son débit massique

$$\begin{aligned} q_{\text{ML}} &= \frac{P A}{(2\pi)^{1/2}} \left(\rho_{\text{amont}} (RT_{\text{amont}})^{1/2} - \rho_{\text{aval}} (RT_{\text{aval}})^{1/2} \right) \\ &= \frac{P A}{(2\pi)^{1/2}} \left(\frac{p_{\text{amont}}}{(RT_{\text{amont}})^{1/2}} - \frac{p_{\text{aval}}}{(RT_{\text{aval}})^{1/2}} \right), \end{aligned} \quad (14)$$

avec $A = HD$ pour un canal plan et $A = \pi H^2$ pour un canal de section circulaire de rayon H .

La probabilité P de transmission d'une molécule à travers le canal est la même dans les deux sens. Elle ne dépend que de la géométrie du canal et de l'interaction gaz-surface. Dans le cas particulier isotherme $T_{\text{amont}} = T_{\text{aval}} = T$, on voit que le débit est proportionnel à la différence de pression

$p_{\text{amont}} = p_{\text{aval}}$:

$$q_{\text{ML}} = \frac{p_{\text{aval}} \times (r_p - 1)}{(2\pi RT)^{1/2}} \times P \times A. \quad (15)$$

Pour calculer effectivement le débit d'un microcanal, il reste à évaluer P . On utilise une méthode de Monte Carlo qui consiste à injecter successivement un grand nombre de molécules (10 millions) dans le canal par une de ses extrémités et à noter de quel côté la molécule ressort. On considère d'abord un canal bidimensionnel plan, avec une interaction gaz-surface régie par le modèle de Maxwell. Une fraction a des collisions gaz-surface est diffuse et une fraction $1 - a$ est spéculaire. Le coefficient d'accommodation de toute grandeur est égal à a , en particulier a_w , coefficient d'accommodation de la quantité de mouvement tangentielle.

L'injection consiste à poser $x=0$, à tirer aléatoirement une ordonnée ($0 < y < H$ avec une probabilité uniforme) et trois composantes de vitesse suivant les fonctions de distributions relatives à un gaz en équilibre. On "suit" alors la molécule jusqu'à ce qu'elle ressorte. Si elle entre en collision

avec une paroi, on décide si la réflexion doit être diffuse ou spéculaire (avec des probabilités respectives a et $1-a$). Dans le premier cas, on tire à nouveau trois composantes de vitesses avec les mêmes fonctions de distribution qu'à l'entrée (la direction normale étant toutefois changée de x à y). Dans le deuxième cas, on ne change que le signe de la vitesse normale. La molécule se propage ainsi jusqu'à sortir par l'une ou l'autre des extrémités. Sur un grand nombre de molécules, on en déduit la probabilité de transmission P du microcanal. On note que seule la direction de la vitesse (et non pas son module) intervient sur le résultat. Donc la valeur de P est indépendante de la température de paroi et ne dépend que de L/H et a . Le calcul a été effectué pour 10 millions de molécules pour chaque couple $(L/H, a)$ et les résultats $P(L/H, a)$ sont donnés dans la table 1 et sur la figure 2. Cette figure se substitue à la figure 3 de [Lengrand *et al.* 2006] qui était fautive en raison d'une erreur de programmation. Pour une réflexion totalement spéculaire ($a = 0$), la probabilité serait égale à 1. En pratique les surfaces courantes correspondent plutôt à des réflexions presque diffuses ($a \approx 1$). La raison pour laquelle la probabilité semble devenir constante quand $L/H \rightarrow \infty$ n'est pas claire. Mais la probabilité est très faible, les tirages de nombres aléatoires sont très nombreux et un artefact dû à la génération des nombres aléatoires n'est pas exclue.

On peut appliquer la même démarche à un microcanal de section circulaire. La probabilité de transmission d'une molécule à travers un canal de rayon H et de longueur L est donnée dans la table 2 et sur la figure 3 en fonction du rapport L/H et de a .

L/H	$a = 1$	$a = 0.5$	$a = 0.2$	$a = 0.1$	$a = 0.01$
1.00E-01	9.53E-01	9.76E-01	9.90E-01	9.95E-01	1.00E+00
3.00E-01	8.71E-01	9.32E-01	9.72E-01	9.86E-01	9.99E-01
1.00E+00	6.84E-01	8.19E-01	9.17E-01	9.56E-01	9.95E-01
3.00E+00	4.57E-01	6.40E-01	8.08E-01	8.88E-01	9.86E-01
1.00E+01	2.40E-01	4.06E-01	6.12E-01	7.41E-01	9.57E-01
3.00E+01	1.16E-01	2.26E-01	4.01E-01	5.44E-01	8.92E-01
1.00E+02	4.71E-02	1.02E-01	2.10E-01	3.20E-01	7.48E-01
3.00E+02	1.94E-02	4.52E-02	1.02E-01	1.68E-01	5.52E-01
1.00E+03	7.39E-03	1.74E-02	4.14E-02	7.29E-02	3.28E-01
3.00E+03	3.82E-03	7.39E-03	1.73E-02	3.14E-02	1.73E-01
1.00E+04	2.90E-03	3.72E-03	6.88E-03	1.22E-02	7.50E-02
3.00E+04	2.88E-03	2.96E-03	3.78E-03	5.38E-03	3.27E-02

Table 1 : Probabilité $P(L/H, a)$ pour une molécule de traverser un canal plan de longueur L et de profondeur H

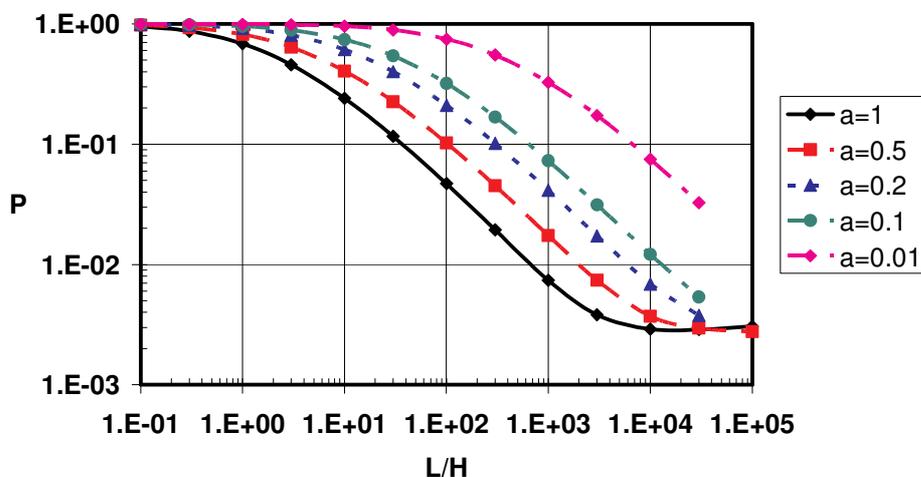


Figure 2 : Probabilité $P(L/H, a)$ pour une molécule de traverser un canal plan de longueur L et de profondeur H .

L/H	a=1	a=0.5	a=0.1	a=0.01
1.00E-02	9.95E-01	9.98E-01	1.00E+00	1.00E+00
3.00E-02	9.85E-01	9.93E-01	9.99E-01	1.00E+00
1.00E-01	9.52E-01	9.75E-01	9.95E-01	9.99E-01
2.00E-01	9.09E-01	9.51E-01	9.89E-01	9.99E-01
5.00E-01	8.01E-01	8.85E-01	9.69E-01	9.96E-01
1.00E+00	6.72E-01	7.96E-01	9.37E-01	9.90E-01
2.00E+00	5.14E-01	6.72E-01	8.84E-01	9.80E-01
5.00E+00	3.11E-01	4.80E-01	7.76E-01	9.54E-01
1.00E+01	1.91E-01	3.39E-01	6.67E-01	9.22E-01
2.00E+01	1.10E-01	2.20E-01	5.38E-01	8.72E-01
5.00E+01	4.85E-02	1.11E-01	3.60E-01	7.71E-01
1.00E+02	2.53E-02	6.16E-02	2.41E-01	6.65E-01
2.00E+02	1.30E-02	3.30E-02	1.49E-01	5.40E-01
5.00E+02	5.27E-03	1.38E-02	7.14E-02	3.64E-01
1.00E+03	2.63E-03	7.04E-03	3.86E-02	2.45E-01
3.00E+03	8.77E-04	2.37E-03	1.38E-02	1.11E-01
1.00E+04	2.58E-04	7.07E-04	4.29E-03	3.98E-02

Table 2 : Probabilité $P(L/H, a)$ pour une molécule de traverser un canal de longueur L et de rayon H .

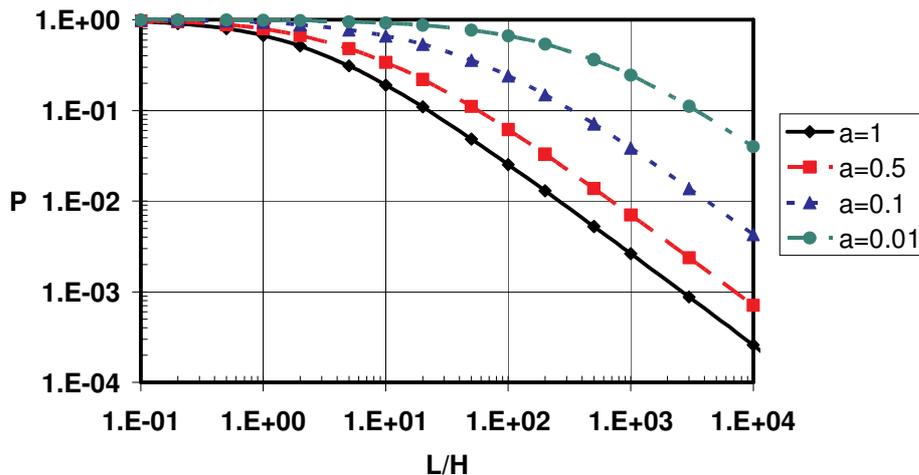


Figure 3 : Probabilité $P(L/H, a)$ pour une molécule de traverser un canal de section circulaire de longueur L et de rayon H .

4. REGIME INTERMEDIAIRE

Une méthode qui a été largement utilisée pour traiter des problèmes d'aérodynamique en gaz raréfié, notamment pour des applications au vol hypersonique, est connue sous le nom de *bridging method*. Elle permet d'estimer une grandeur globale en régime intermédiaire entre le régime continu classique et le régime moléculaire libre. Pour trouver, par exemple le coefficient de traînée aérodynamique C_D d'un véhicule spatial dans des conditions d'écoulement données, on effectue un calcul en régime continu et on trouve une valeur $C_{D,C}$. Pour les mêmes conditions d'écoulement, on fait un calcul en régime moléculaire libre et on trouve une valeur $C_{D,ML}$. Une fonction d'interpolation supposée universelle pour une géométrie donnée permet alors d'obtenir C_D à partir des deux valeurs $C_{D,C}$ et $C_{D,ML}$.

Dans le cas d'un microcanal plan, on connaît l'expression du débit pour $Kn \rightarrow 0$ (débit de Poiseuille) et pour $Kn \rightarrow \infty$ (Eq.15). Le succès de l'équation (1) pour des nombres de Knudsen

modérés suggère une expression du débit qui coïncide avec l'équation (1) pour les faibles Kn et qui tend vers l'équation (15) pour $Kn \rightarrow \infty$. Nous proposons de remplacer l'équation (1) par

$$q = \left[\frac{D (H/2)^3 p_{\text{aval}}^2}{\mu RTL} \times \frac{r_p^2 - 1}{3} \right] \times \left[1 + A_1 Kn_{\text{aval}} + \frac{A_2 Kn_{\text{aval}}^2}{1 + \beta Kn_{\text{aval}}} \right]. \quad (16)$$

L'équation se confond avec l'équation (1) pour les faibles Kn et tend bien vers l'équation (15) si l'on prend

$$\beta = \frac{B}{24} \times \frac{\ln(r_p)}{(r_p - 1)} \times \left[\left(\frac{P(L/H, a)}{K(\omega)} \times \frac{L}{H} \right) - \left(\frac{\alpha_1}{2} \times \frac{2 - a_u}{a_u} \right) \right]^{-1} \quad (17)$$

et si l'on tient compte de la relation (3) entre viscosité et libre parcours moyen, de l'équation (6) pour A_1 et de l'équation (11) pour A_2 .

A titre d'exemple, on a considéré le débit d'un microcanal plan dans les conditions suivantes. Le gaz en écoulement est de l'air à 300K ($\mu = 1,85 \times 10^{-5}$ Pa.s, $\omega = 0,769$, $R = 287$ J.kg⁻¹.K⁻¹). Le canal a des dimensions $H = 10$ μ m, $D = 0,15$ mm, $L = 3$ mm. L'accommodation est parfaite ($a = a_u = 1$). Le rapport de pression est fixé à $r_p = 2$. On a pris ici $\alpha_1 = 1,146$ et $B = 27$ d'où $A_1 = 4,584$ et $A_2 = 6,238$. La pression p_{aval} varie de 1 à 100000 Pa pour faire varier le nombre de Knudsen Kn_{aval} de $5,45 \times 10^{-3}$ à 545. Le débit adimensionnel (rapporté au débit de Poiseuille) est représenté sur la figure 4 en fonction de Kn_{aval} . La courbe marquée $q1$ correspond à la correction au premier ordre. Elle commence à s'écarter du débit de Poiseuille pour $Kn_{\text{aval}} = 0,02$ environ. La courbe marquée $q2$ correspond à la correction au second ordre. Elle s'écarte de la précédente pour $Kn_{\text{aval}} = 0,1 - 0,2$. Les formules proposées (Eqs 16 et 17) correspondent à la courbe marquée $qgen$. Elle suit la précédente jusqu'à $Kn_{\text{aval}} = 0,5$. Elle garde donc le même accord avec l'expérience que l'expression au second ordre. Elle rejoint la courbe du régime moléculaire libre qfm pour $Kn_{\text{aval}} = 30$ environ.

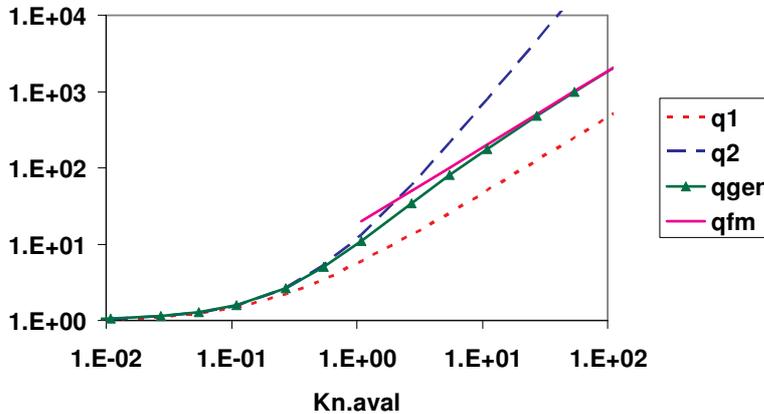


Figure 4 : Comparaison des approches pour le débit d'un microcanal plan. Débit rapporté au débit de Poiseuille pour les conditions indiquées dans le texte.

Dans le cas d'un canal section circulaire, on procède de la même manière. A partir du débit avec correction au second ordre (Eq.12), on pose

$$q = \left[\frac{\pi H^4 p_{\text{aval}}^2}{8\mu RTL} \times \frac{r_p^2 - 1}{2} \right] \times \left[1 + A_1 Kn_{\text{aval}} + \frac{A_2 Kn_{\text{aval}}^2}{1 + \beta Kn_{\text{aval}}} \right] \quad (18)$$

$$\text{avec } A_1 = \frac{8\alpha_1}{r_p + 1} \times \frac{2 - a_u}{a_u} \quad \text{et} \quad A_2 = B \times \frac{\ln(r_p)}{r_p^2 - 1} \quad (19)$$

et le raccordement au régime moléculaire libre est assuré pour

$$\beta = \frac{B}{16} \times \frac{\ln(r_p)}{(r_p - 1)} \times \left[\left(\frac{P(L/H, a)}{K(\omega)} \times \frac{L}{H} \right) - \left(\frac{\alpha_1}{2} \times \frac{2 - \alpha_u}{\alpha_u} \right) \right]^{-1}. \quad (20)$$

L'expression de B dépend du modèle au second ordre choisi. Par exemple, pour les équations QHD, on prend $B = [32\pi] / [K(\omega)^2 Sc]$.

CONCLUSION

On a rappelé l'expression du débit d'un microcanal plan ou de section circulaire à partir de l'approche continue, en mettant en évidence le débit de Poiseuille et les corrections du premier et du second ordre en Kn . On a insisté sur les précautions à prendre pour une évaluation correcte des différents termes, en particulier pour ce qui concerne la loi de viscosité (ω), l'interaction gaz-surface (α_u), la définition du libre parcours moyen et la signification physique de la vitesse de glissement.

On a présenté l'expression du débit d'un microcanal en régime moléculaire libre, par une approche moléculaire réaliste. On a mis en évidence les différences qualitatives par rapport au cas précédent : le débit massique est proportionnel à la différence des pressions et non à la différence des carrés des pressions.

Enfin, on a proposé une formule d'interpolation en Kn . Elle permet d'évaluer le débit en régime de transition en se raccordant aux deux précédentes approches sans nécessiter de paramètre d'ajustement. Ce travail devrait faciliter l'interprétation d'expériences passées et à venir.

REFERENCES

- Aubert, C. & Colin, S. 2001. High-order boundary conditions for gaseous flows in rectangular microducts. *Microscale Thermophysical Engineering*, **5**, 41-54.
- Barber, R.W. & Emerson D.R. 2005. Challenges in modeling gas-phase flow in microchannels: from slip to transition. *Proc. of ICMM2005 (Intern. Conf. on Microchannels and Minichannels)*, paper ICMM2005-75074.
- Bird, G.A. 1994. *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*, Clarendon Press, Oxford.
- Colin, S., Lalonde, P. & Caen, R. 2004. Validation of a second-order slip flow model in rectangular microchannels, *Heat transfer engineering*, **25**, 23-30.
- Deissler, R.G. 1964. An analysis of second-order slip flow and temperature jump boundary conditions for rarefied gases. *Int. J. of Heat and Mass transfer*, **7**, 681-694.
- Elizarova, T.G., & Sheretov Yu.V. 2003. Analyse du problème de l'écoulement gazeux dans les microcanaux par les équations quasi hydrodynamiques. *La Houille Blanche*, **5-2003**, 66-72.
- Hadjiconstantinou N.G. 2003. Comments on Cercignani's second-order slip coefficient. *Phys. of Fluids*, **15**, 2352-2354.
- Hadjiconstantinou N.G. 2004. Validation of a second-order slip model for hard sphere gases. *ICMM2004 (Intern. Conf. on Microchannels and Minichannels)*.
- Karniadakis, G., Beskok A. & Aluru N. 2005. *Microflows and Nanoflows. Fundamentals and Simulation*, Springer.
- Lengrand, J.C., Elizarova T.G. & Shirokov, I.A. 2006. Calcul de l'écoulement visqueux compressible d'un gaz dans un microcanal. *La Houille Blanche*, **1-2006**, 40-46.