

Écoulement induit par un gradient de température dans un micro-canal

Djilali Ameur*, Cédric Croizet*, Fadila Maroteaux \diamond & Renée Gatignol*

* Institut Jean Le Rond d'Alembert (UMR CNRS 7190) et Université Pierre et Marie Curie
couloir 55/65, case 162, 4 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05

\diamond Université Pierre et Marie Curie (UFR 923) Mécanique
couloir 55/65, case 163, 4 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex 05

ameur@lmm.jussieu.fr

Résumé :

L'objectif de cette étude est d'analyser le comportement d'un écoulement de gaz dans un micro-canal en faisant varier la température à l'entrée du micro-canal. L'approche utilisée est basée sur la simulation directe de Monte Carlo. Les résultats numériques sont comparés aux résultats obtenus analytiquement en utilisant une approche continue. Le phénomène de transpiration thermique est mis en évidence.

Abstract :

The objective of this study is to analyze the behavior of a gas flow into a micro channel, when the inlet temperature of the micro channel varies. The approach used in this study is based on the direct simulation of Monte Carlo. The numerical results are compared to analytical solutions obtained with a continuous approach. The thermal creep phenomenon is highlighted.

Mots-clefs :

Gaz raréfié ; simulation de Monte Carlo (DSMC) ; transpiration thermique.

1 Introduction et position du problème

L'étude des écoulements des gaz dans les micro-canaux est en pleine expansion étant donné leurs nombreuses applications dans différents domaines. Dans cette étude deux réservoirs remplis d'un gaz diatomique sont raccordés par un micro-canal (voir figure 1). Ici le gaz constitué uniquement d'azote, passe d'un réservoir à l'autre à travers le canal sous l'effet d'un gradient de pression imposé entre le réservoir 1 et le réservoir 2. Les notations utilisées sont présentées sur la figure 1. L'écoulement est supposé plan et compressible. Les deux réservoirs sont de dimensions identiques, de longueur $l' = 7\mu m$ et de hauteur $H = 5\mu m$. Le canal reliant les deux réservoirs est de longueur finie $l = 10\mu m$ et de hauteur $h = 1\mu m$.

Les conditions aux limites à l'entrée du réservoir 1 (en $x = -(l/2 + l')$) et à la sortie du réservoir 2 (en $x = +(l/2 + l')$) sont des conditions dites de pressions constantes introduites par Bird (2006) et utilisées par Ameur *et al.* (2006). Dans tous les calculs, la pression de sortie P_2 est fixée égale à la pression atmosphérique et la pression d'entrée P_1 fixée égale à 1.3×10^5 Pa. Des conditions de symétrie sont appliquées sur les frontières parallèles à l'axe du micro-canal des réservoirs 1 et 2. La température de sortie du réservoir 2 et la température de la paroi solide sont maintenues constantes et égales à 300K. Dans le but d'étudier numériquement l'effet d'un gradient de température entre l'entrée et la sortie du système (voir figure 1) sur le comportement de l'écoulement, la température d'entrée T_1 a été augmentée de 300K jusqu'à 700K.

Pour ce faire, nous avons utilisé le code de calcul DS2V développé par Bird (2006). Ce code est basé sur la méthode de DSMC qui est une méthode statistique consistant en une expérience

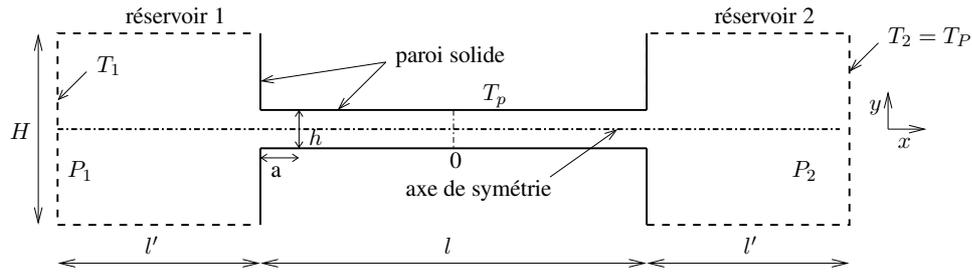


FIG. 1 – Schéma de la géométrie étudiée

numérique où l'on simule un nombre limité de molécules, chacune d'elles étant représentative d'un grand nombre de molécules réelles. Durant chaque pas de temps, le code de calcul exécute deux étapes découplées : une de déplacement et une de collision. Le découplage n'a de sens que si le pas de temps est inférieur au temps moyen de vol des molécules. Durant la première étape, les molécules subissent un déplacement sans aucune collision. Dans la seconde étape, trois cas sont possibles : les molécules quittent le domaine de calcul et dans ce cas elles seront éliminées, les molécules entrent en collision avec la paroi, ou les molécules entrent en collision entre elles. Dans le cas de l'interaction des molécules avec la paroi, le modèle de réflexion diffuse avec accommodation parfaite est utilisé. Si les molécules entrent en collision entre elles, le modèle VHS (Variable Hard Sphere) est utilisé. Ce dernier conduit à une loi de viscosité en puissance assez réaliste et un calcul de collision assez simple (Kandlikar *et al.* (2005)).

Le champ d'écoulement est subdivisé en plusieurs cellules, où sont évaluées les quantités macroscopiques. Pour toutes les simulations, la dimension des cellules doit être inférieure ou égale au libre parcours moyen des molécules. Ce dernier dépend essentiellement des caractéristiques du gaz, dans cette étude il varie de $0.04\mu m$ à $0.18\mu m$. Par conséquent le nombre de Knudsen construit avec la hauteur h du micro-canal varie de 0.04 à 0.18. Le nombre total des molécules simulées est de l'ordre de 6×10^5 molécules. Le nombre d'échantillons retenu est de l'ordre de 7×10^5 , ce qui nous a permis de réduire le bruit statistique à un niveau de l'ordre de 1%.

2 Résultats numériques et discussion

Les calculs ont été réalisés pour des températures d'entrée T_1 égales à 300K, 400K, 500K, et 700K. La figure 2 reproduit l'évolution de la pression le long de l'axe de symétrie pour les différentes valeurs de la température T_1 . Cette figure montre que le gradient de pression (dp/dx) entre l'entrée du canal ($x = -5\mu m$) et sa sortie ($x = 5\mu m$) diminue progressivement lorsque T_1 décroît. Ce gradient passe d'une gamme de valeurs positives ($2900Pa/\mu m$ et $1200Pa/\mu m$) pour les températures 300K et 400K, vers une gamme de valeurs négatives ($-59Pa/\mu m$ et $-1700Pa/\mu m$) correspondant à 500K et 700K. On observe sur cette même figure que ce gradient de pression est proche de zéro lorsque la température est à peu près égale à 500K. D'après ces résultats numériques, on observe que l'effet du gradient de température compense l'effet du gradient de pression.

Kogan (1969) étudie le passage d'un gaz en régime moléculaire libre d'un réservoir vers un autre réservoir à travers un petit orifice. Il vérifie analytiquement la relation trouvée expérimentalement par Knudsen :

$$\frac{P_1}{P_2} = \sqrt{\frac{T_1}{T_2}} \quad (1)$$

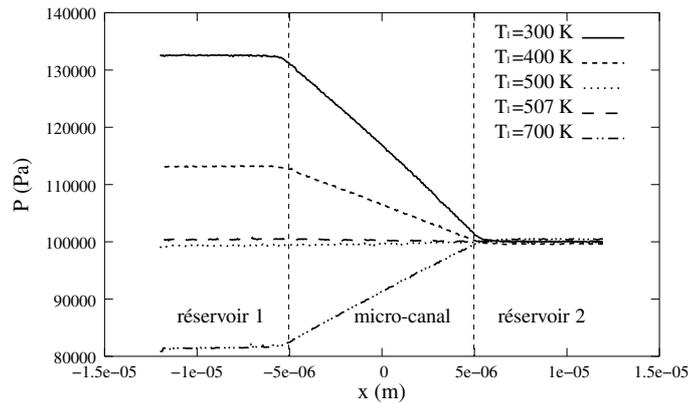


FIG. 2 – Variation de la pression le long de l'axe pour les différentes valeurs de T_1

où P_1 , P_2 , et T_1 , T_2 représentent respectivement les pressions et les températures du gaz dans les réservoirs 1 et 2.

Dans notre étude, nous observons que la température T_1 qui vérifie l'équation (1) est 507K. Un calcul numérique par la méthode de DSMC a été effectué pour cette température, les résultats sont reproduits sur la figure 2. On observe que le gradient de pression entre l'entrée du canal et sa sortie est proche de zéro ($dp/dx = 0.2 \text{ Pa}/\mu\text{m}$). La pression est quasiment la même dans tout le champ d'écoulement ; de plus les calculs numériques ont montré que cette pression est quasi-indépendante de l'ordonnée y ; cette indépendance en y a été également vérifiée dans le cas d'écoulements isothermes dans le même canal (Ameur *et al.* (2006)).

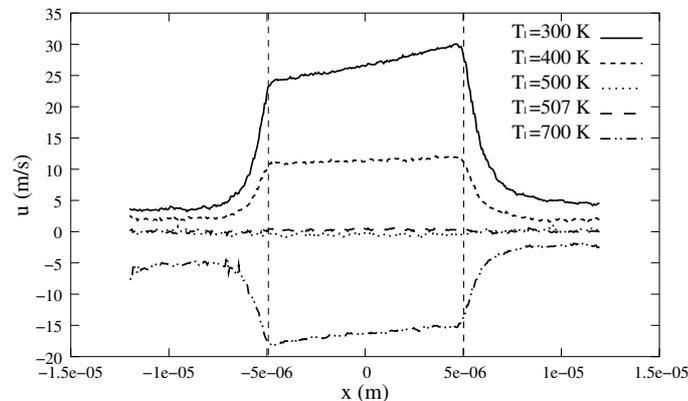


FIG. 3 – Variation de la vitesse longitudinale le long de l'axe pour différentes valeurs de T_1

La figure 3 montre la variation de la composante longitudinale u de la vitesse le long de l'axe de symétrie. On remarque également que plus on augmente la température d'entrée T_1 , plus la vitesse de l'écoulement diminue. On observe sur cette figure que l'état de repos du gaz est atteint approximativement pour cette température d'entrée $T_1 = 507\text{K}$. Dans ce cas la vitesse de l'écoulement est pratiquement nulle, le gradient de pression est compensé par le gradient de température et le mouvement est ainsi annulé (u est de l'ordre de 10^{-1}m/s). Au delà de cette température et pour $T_1 = 700\text{K}$, l'écoulement du gaz s'inverse et va du réservoir 2 vers le réservoir 1. Le changement de direction est traduit par une vitesse négative, ce phénomène lié à la raréfaction du gaz est appelé : *phénomène de transpiration thermique* ou *thermal creep*. On soulignera que Vargo *et al.* (1997) et Kandlikar *et al.* (2005) ont utilisé ce phénomène pour

créer une pompe à vide.

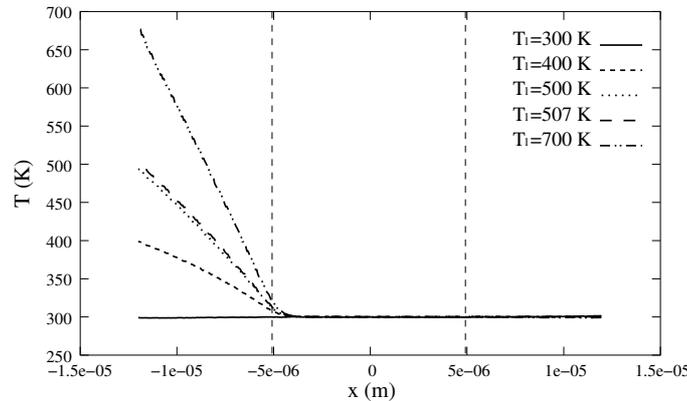


FIG. 4 – Variation de la température le long de l'axe pour différentes valeurs de T_1

La figure 4 représente la variation de la température le long de l'axe de symétrie pour différentes valeurs de la température T_1 . On remarque que la température varie linéairement dans le réservoir 1. Dans le canal, excepté dans une zone proche de l'entrée, et dans le réservoir 2, cette température reste constante et égale à la température de la paroi $T_p = 300\text{K}$.

Afin de mieux comprendre ce phénomène, une modélisation théorique du même problème a été effectuée à partir d'une approche continue et fait l'objet du paragraphe suivant.

3 Modèle analytique

Nous cherchons d'abord la solution de l'équation de la chaleur dans le micro-canal plan, puis nous raccordons les deux extrémités de ce micro-canal à deux réservoirs de taille finie et nous étudions la variation de la température à travers cet ensemble.

3.1 Etude de la température dans le micro-canal

Considérons l'écoulement du gaz dans le micro-canal long et plan. L'écoulement dans le micro-canal est compressible, stationnaire et laminaire. Seule la composante u de la vitesse suivant l'axe longitudinal est prise en compte.

Dans Ameer (2003) l'écoulement compressible d'un gaz parfait dans un micro-canal a été modélisé à partir des équations de Navier-Stokes. A l'aide d'une analyse asymptotique portant sur le petit paramètre constitué par le rapport de la largeur du canal sur sa longueur, en première approximation le modèle analytique proposé est :

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0, \quad \frac{\partial P}{\partial y} = 0, \quad \mu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{\partial P}{\partial x}, \quad \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0 \quad (2)$$

où μ représente la viscosité dynamique du gaz. Les conditions aux limites pour la température sont :

$$\frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0} = 0 \quad \text{et} \quad T \Big|_{y=h/2} = T_p \quad (3)$$

Ainsi, le problème thermique admet une solution triviale $T(x, y) = T_p$.

3.2 Etude de la température dans les réservoirs

Dans cette section nous raccordons les deux extrémités du micro-canal aux deux réservoirs. Pour effectuer une comparaison avec les calculs numériques, nous utilisons pour ce cas la même géométrie (figure 1). Le problème est le suivant : on applique à l'entrée du réservoir 1 (en $x = -(l/2 + l')$) une température T_1 et à sa sortie ($x = -l/2$) une température $T = T_p$; à l'entrée du réservoir 2 ($x = (l/2)$) et à sa sortie ($x = l/2 + l'$), la température est maintenue constante et égale à la température de la paroi T_p . Ces conditions aux limites s'appuient sur le résultat établi dans la section précédente, où l'on a trouvé que la température dans le micro-canal est égale à la température de la paroi. Si on considère que le gradient de la température dans la direction transversale y est négligeable et si le gaz est supposé au repos, alors la résolution de l'équation de la chaleur dans les réservoirs 1 et 2 revient à résoudre l'équation :

$$d^2T/dx^2 = 0 \quad (4)$$

La solution de l'équation (4) avec les conditions aux limites précisées ci-dessus est :

- $T = T_p$, dans le réservoir 2.
- $T = \frac{T_p - T_1}{l'}x + T_p(1 + \frac{l}{2l'}) - T_1(\frac{l}{2l'})$, dans le réservoir 1.

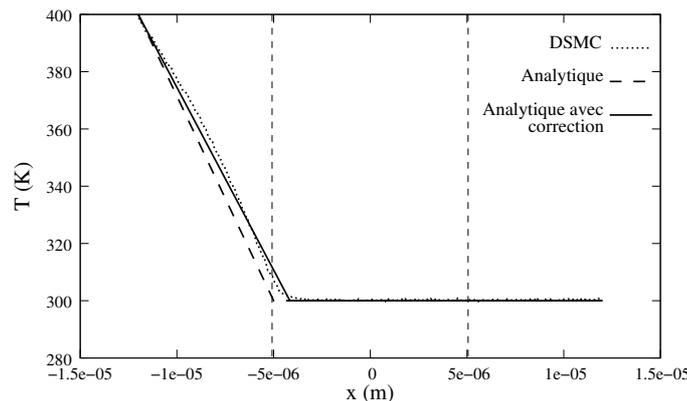


FIG. 5 – Comparaison entre la méthode de DSMC et les résultats analytiques de la température pour le cas de $T_1 = 400\text{K}$

La figure 5 reproduit les profils de la température obtenus avec l'approche analytique et la simulation de Monte Carlo pour une température $T_1 = 400\text{K}$. La comparaison entre les deux profils (DSMC et analytique) montre un bon accord entre les deux modèles dans le réservoir 2 et dans le canal. Par ailleurs, cette figure montre une différence supérieure au niveau de bruit dans le réservoir 1. Cet écart est dû probablement à la condition de température imposée au point de raccordement entre le réservoir 1 et le canal en $x = -l/2$ pour la solution analytique. Le profil de la température numérique montre que la température du gaz est différente de la température de la paroi à l'entrée du canal. Une certaine distance est nécessaire pour que la température du gaz s'accommode à celle de la paroi. Dans cette zone, la température et donc la longueur d'accommodation, dépendent de y .

Afin d'améliorer le modèle analytique, nous proposons de trouver la distance a (indiquée sur la figure 1) à partir des résultats numériques. La longueur d'accommodation est calculée pour différentes valeurs de y qui correspondent aux centres des cellules réparties dans l'entrée du canal et numérotées de $i = 1$ à n dans la direction transversale. La valeur de a est alors calculée

par : $a = l/2 + \sum_{i=1}^{i=n} x_i/n$, où x_i représente l'abscisse de la première cellule d'ordonnée y_i dans laquelle la température atteint la valeur (300 ± 0.1) K. Par exemple, pour un calcul avec une température $T_1 = 400$ K, la constante a est égale à $0.84 \mu m$. Si on effectue une translation de la condition aux limites à la sortie du réservoir 1 de $x = (-l/2)$ à $x = (-l/2) - a$, la solution de l'équation (4) dans le réservoir 1 devient :

$$T = \frac{T_p - T_1}{l' + a} x + T_p \left(\frac{2l' + l}{2l' + a} \right) - T_1 \left(\frac{l - 2a}{2l' + 2a} \right) \quad (5)$$

La figure 5 montre un bon accord entre ce modèle analytique corrigé et le calcul numérique utilisant la méthode de DSMC.

4 Conclusions

L'analyse de l'écoulement gazeux à travers un micro-canal sous l'effet d'un gradient de température a été présentée. Ce gradient de température est variable par le biais de la température d'entrée du micro-canal, les autres conditions imposées aux extrémités et le long de la paroi du canal restant inchangées. Les résultats numériques ont permis de montrer dans un premier temps que l'effet du gradient de température compense l'effet du gradient de pression ainsi, lorsque la température d'entrée du canal augmente, le gradient de pression est d'abord positif puis négatif. Entre ces deux paliers, un palier d'équilibre est atteint (gradient de pression autour de zéro) pour une température d'équilibre qui vérifie la relation de Knudsen. Par ailleurs, pour les gradients de pression négatifs (i.e. température d'entrée supérieure à la température d'équilibre) le phénomène de transpiration thermique est observé. Enfin, les résultats numériques et théoriques ont montré que la température du gaz dans le micro-canal est dominée par la température de la paroi.

Références

- Ameur, D. 2003 Modélisation des écoulements dans des micro-canaux par les équations de Navier Stokes avec glissement à la paroi. *Mémoire DEA*, Univ. Pierre et Marie Curie, Paris.
- Ameur, D., Croizet, C., Maroteaux, F., Gatignol, R. 2006 DSMC Simulation of Pressure-Driven Flows and Heat Transfer in Micro-Filters. *In Proceedings of the 25th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, July 22-27, 2006, Saint-Petersburg*, (à paraître).
- Ameur, D., Croizet, C., Maroteaux, F., Gatignol, R. 2006 Modélisation des écoulements dans des micro-filtres par la méthode DSMC. *Actes du 3^{ème} congrès français de microfluidique 12-14 décembre 2006, Toulouse*, (CD-ROM).
- Bird, G.A. 1994 Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. Oxford University Press, New York.
- Bird, G.A. 2006 Direct Simulation Monte Carlo Method. <http://gab.com.au/>.
- Kandlikar, S.G., Garimella, S., Li, D., Colin, S., King, M.R. 2005 Heat transfer and fluid flow in minichannels and microchannels. Elsevier, Paris.
- Kogan, M.N. 1969 Rarefied Gas Dynamics. Plenum Press, New York.
- Vargo, S., Muntz, E.P. 1997 An evaluation of a multiple-stage micromechanical Knudsen compressor and vacuum pump. *In Proceedings of the 20th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Beijing* pp. 995-1000.