

Écoulement d'un mélange de deux gaz dans un micro-canal circulaire sous l'effet d'un gradient de température pariétal et d'un gradient de pression

C. CROIZET ^a, R. GATIGNOL ^b

a. Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, CNRS, UMR 7190, Institut Jean Le Rond d'Alembert, F-75005 Paris, France, cedric.croizet@upmc.fr

b. Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, CNRS, UMR 7190, Institut Jean Le Rond d'Alembert, F-75005 Paris, France, renee.gatignol@upmc.fr

Résumé :

Les micro-canaux de taille submillimétrique sont présents dans de nombreux outils médicaux et industriels comme les micro-filtres. Les écoulements gazeux dans ces canaux sont souvent traités par la méthode DSMC qui nécessite d'importants temps de calcul [2, 1]. Il est donc intéressant de développer des méthodes alternatives pour décrire ces écoulements. Dans ce travail, on s'intéresse aux écoulements à faible nombre de Mach et avec un nombre de Knudsen faible à modéré de telle sorte que l'écoulement est en régime glissant. Nous proposons un modèle asymptotique pour l'écoulement axisymétrique d'un mélange de deux gaz compressibles dans un micro-canal de section droite circulaire avec un gradient de température à la paroi. Ce modèle est obtenu à partir des équations de Navier-Stokes-Fourier. Les résultats du modèle sont comparés à des simulations DSMC et l'influence du gradient de température est étudié.

Abstract :

Sub-millimeter-sized channels are present in many medical and industrial tools such as micro-filters. In order to describe the gas flows in these micro-channels, the DSMC methods are frequently used but a large computation time is usually required to obtain the solutions [2, 1]. Consequently, it is of main interest to develop alternative methods to describe these flows. In this contribution, we are interested in flows at low Mach numbers and with low to moderate Knudsen numbers so that the flow is in the slip regime. We propose an asymptotic model for the axisymmetric flow of a mixture of two compressible gases in circular microchannels with a temperature gradient at the wall. The model is obtained from the Navier-Stokes-Fourier equations. The results of the model are compared to DSMC simulations and the influence of the temperature gradient which is present along the walls is investigated.

Mots clefs : écoulement en micro-canal, modèle asymptotique, DSMC

1 Introduction

Les dispositifs microscopiques, comme les micro-turbines ou les échangeurs de chaleur à micro-canaux, sont couramment utilisés dans l'industrie. Les écoulements dans les micro-canaux ont ainsi été discutés dans un grand nombre de travaux aussi bien d'un point de vue théorique que numérique ou expérimental [2, 1, 11, 12]. Pour étudier les écoulements gazeux dans ces tubes microscopiques, les méthodes DSMC sont adaptées mais coûteuses en temps de calcul [2, 1]. Le développement de modèles asymptotiques est donc pertinent. Cette approche a été utilisée dans le cas d'un gaz seul [12, 7] par exemple et pour un mélange de gaz dans un canal plan [8, 9] ou cylindrique [5].

Dans cette contribution, on considère l'écoulement stationnaire et axisymétrique, d'un mélange de deux gaz parfaits compressibles dans un micro-canal circulaire (Fig. 1). Le long de la paroi du canal, dans sa direction axiale, un gradient de température est appliqué. Ce gradient de température, ainsi qu'une différence de pression entre les deux extrémités du canal, provoquent le mouvement des gaz. Notre objectif est de modéliser ces micro-écoulements par une approche macroscopique et d'obtenir un modèle asymptotique capable de décrire les principaux phénomènes physiques mis en jeu. On s'intéresse à des écoulements à faible nombre de Mach et à nombre de Knudsen faible ou modéré (typiquement de l'ordre de 0,1); ces écoulements sont modérément raréfiés. Dans ce régime, dit glissant, les équations du mouvement sont les lois de bilan usuelles pour la masse, la quantité de mouvement et l'énergie avec des termes additionnels de couplage [6, 5] obtenus à partir d'un modèle cinétique de type BGK. Les conditions d'adhérence aux parois usuelles doivent, néanmoins, être remplacées par des conditions de saut pour la vitesse et la température. Des conditions du premier ordre seront utilisées dans ce travail [12].

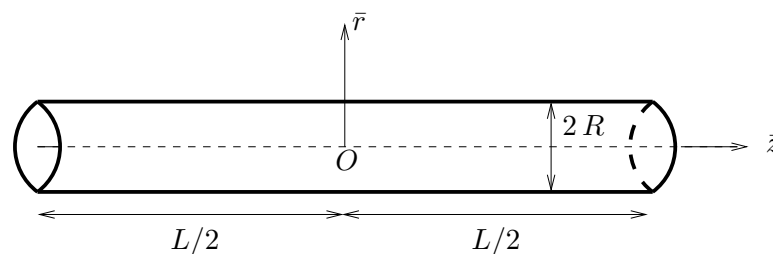


FIGURE 1 – Géométrie du canal

L'écoulement est supposé axisymétrique et stationnaire. A l'entrée du canal, chaque gaz a sa propre vitesse et sa propre pression. Dans un premier paragraphe nous présentons les équations du modèle. Pour chaque gaz, on introduit le nombre de Mach et le nombre de Reynolds construit avec la longueur caractéristique longitudinale. Le nombre de Knudsen de chaque espèce, construit avec la dimension transverse, s'exprime aisément à partir de ces deux nombres sans dimension. Le rapport d'aspect du canal, ϵ , est le petit paramètre de l'étude. Pour chaque gaz, les équations du mouvement sont écrites avec puis sans dimension. Dans les paragraphes suivants, la solution au premier ordre d'approximation en ϵ est étudiée et comparée à une simulation de Monte carlo (DSMC).

2 Equations du problème

On considère un micro-tube de longueur $L = 10 \mu\text{m}$ et de rayon $R = 1 \mu\text{m}$ (Fig. 1). La paroi du tube, à $\bar{r} = R$ est au repos et à une température qui dépend de la variable d'espace longitudinale : $\bar{T}_w(\bar{z})$. Les

équations du mouvement sont les équations de Navier-Stokes-Fourier pour un mélange de gaz parfaits, notés "a" et "b", à chaleur spécifiques à pression constante c_{pa} et c_{pb} et à volume constant c_{va} et c_{vb} . Les viscosités de cisaillement μ_a et μ_b et les conductivités thermiques κ_a et κ_b dépendent uniquement de la température et sont telles que les nombres de Prandtl sont constants. Les équations du mouvement sont les lois de bilan usuelles avec des termes supplémentaires de couplage. Les barres sont utilisées pour les quantités dimensionnées sauf lorsqu'elles sont constantes. Pour l'espèce a nous avons, pour la masse, la quantité de mouvement et l'énergie :

$$\frac{\partial \bar{\rho}_a}{\partial \bar{t}} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{\rho}_a \bar{\mathbf{u}}_a) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_a \bar{\mathbf{u}}_a}{\partial \bar{t}} + \bar{\nabla} \cdot (\bar{\rho}_a \bar{\mathbf{u}}_a \bar{\mathbf{u}}_a - \bar{\sigma}_a) = \bar{\nu}_{ab} \bar{\rho}_a (\bar{\mathbf{u}}_a - \bar{\mathbf{u}}_a^*), \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial \bar{t}} (\bar{\rho}_a \bar{\mathbf{u}}_a^2 + \bar{\rho}_a \bar{e}_a) + \bar{\nabla} \cdot \left[\bar{\rho}_a \left(\frac{1}{2} \bar{\mathbf{u}}_a \cdot \bar{\mathbf{u}}_a + \bar{e}_a \right) \bar{\mathbf{u}}_a - \bar{\sigma}_a \cdot \bar{\mathbf{u}}_a + \bar{\mathbf{q}}_a \right] = \bar{S}_a^E. \quad (3)$$

Les équations pour l'espèce b sont obtenues en échangeant a et b . On introduit la notation " θ " ($\theta = a, b$) pour désigner une des deux espèces. Du fait de l'axisymétrie, le champ de vitesse du gaz θ ($\theta = a, b$) est : $\bar{\mathbf{u}}_\theta = \bar{u}_\theta(\bar{r}, \bar{z}) \mathbf{e}_r + \bar{v}_\theta(\bar{r}, \bar{z}) \mathbf{e}_z$. En outre, ρ_θ est la masse volumique du gaz θ , $\bar{\sigma}_\theta$ son tenseur des contraintes de Navier-Stokes, $\bar{\mathbf{q}}_\theta$ son vecteur flux de chaleur et \bar{e}_θ son énergie interne massique. Les termes de couplage qui apparaissent dans les équations sont obtenus à partir d'un modèle de type BGK pour le mélange [6, 13] qui donne :

$$\bar{\mathbf{u}}_a^* = \bar{\mathbf{u}}_b^* = \frac{m_a \bar{\mathbf{u}}_a + m_b \bar{\mathbf{u}}_b}{m_a + m_b}, \quad (4)$$

$$\bar{\nu}_{ab} = \bar{\nu}_a \left(\frac{d_a + d_b}{2 d_a} \right)^2 \left(\frac{m_a + m_b}{2 m_b} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\bar{n}_b}{\bar{n}_a} \psi_{ab}, \quad (5)$$

avec :

$$\psi_{ab} = \left(\left(\frac{d_a}{d_b} \right)^2 \sqrt{\frac{m_b}{m_a} \frac{\Omega_b \bar{\mu}_a \bar{T}_b}{\Omega_a \bar{\mu}_b \bar{T}_a}} \right)^{1/2} \quad (6)$$

où m_θ est la masse moléculaire du gaz θ et où d_θ , $\bar{\nu}_\theta$ et \bar{n}_θ sont respectivement son diamètre moléculaire, sa fréquence de collision et sa densité numérique. Avec cette définition, ν_{ba} se déduit de ν_{ab} en échangeant "a" et "b" et on a :

$$\bar{n}_a \bar{\nu}_{ab} = \bar{n}_b \bar{\nu}_{ba}, \quad (7)$$

qui traduit l'équilibre des collisions entre les deux espèces et qui permet d'assurer la conservation de la quantité de mouvement du mélange. En outre :

$$\bar{\nu}_\theta = \frac{\bar{p}_\theta}{\bar{\mu}_\theta} \Omega_\theta \quad \text{avec} \quad \bar{\mu}_\theta = \mu_\theta^{ref} \left(\frac{\bar{T}_\theta}{T_\theta^{ref}} \right)^{\omega_\theta}, \quad (8)$$

$$\Omega_\theta = \frac{5(\alpha_\theta + 1)(\alpha_\theta + 2)}{\alpha_\theta(7 - 2\omega_\theta)(5 - 2\omega_\theta)}, \quad (9)$$

où \bar{p}_θ est la pression du gaz θ , α_θ is est une constante dépendant du modèle de collision et où ω_θ est l'exposant de la loi de viscosité (voir [2, 6]). Dans les bilans d'énergie, les termes de couplage sont :

$$\bar{S}_a^E = \frac{1}{2} \bar{\rho}_a \bar{\nu}_{ab} \left[\bar{\mathbf{u}}_a^{*2} - \bar{\mathbf{u}}_a^2 + \frac{2 r_a}{\gamma_a - 1} (\bar{T}_a^* - \bar{T}_a) \right], \quad (10)$$

avec $r_a = k/m_a$ où k est la constante de Boltzmann et où \bar{T}_a est la température de l'espèce a . Dans cette expression, la température \bar{T}_a^* est donnée par une formule de Morse [6] étendue aux gaz parfaits polyatomiques :

$$\bar{T}_a^* = \bar{T}_a + \frac{3}{2} (\gamma_a - 1) \frac{2m_a m_b}{(m_a m_b)^2} \left(\bar{T}_b - \bar{T}_a + \frac{m_b}{6k} (\bar{\mathbf{u}}_b - \bar{\mathbf{u}}_a)^2 \right). \quad (11)$$

Avec cette définition et l'équation (7) : $\bar{S}_a^E + \bar{S}_b^E = 0$ qui traduit la conservation de l'énergie. En outre, nous avons la loi de Mariotte des gaz parfaits :

$$\bar{p}_\theta = r_\theta \bar{\rho}_\theta \bar{T}_\theta \quad (12)$$

et les lois de comportement usuelles de Fourier et de Navier-Stokes. Pour les viscosités on adopte l'hypothèse de Stokes. En fin le modèle est complété par des conditions pariétales du premier ordre [11, 12] :

$$\bar{v}_\theta|_{\bar{r}=R} = \left(-\frac{\bar{\mu}_\theta \sigma_{\theta p}}{\bar{p}_\theta} \sqrt{2 r_\theta \bar{T}_\theta} \frac{\partial \bar{v}_\theta}{\partial \bar{r}} + \frac{\sigma_{\theta T} r_\theta \bar{\mu}_\theta}{\bar{p}_\theta} \frac{\partial \bar{T}_\theta}{\partial \bar{z}} \right)_{\bar{r}=R}, \quad (13)$$

$$\bar{u}_\theta|_{\bar{r}=R} = 0, \quad (14)$$

$$\bar{T}_\theta|_{\bar{r}=R} = \bar{T}_w(\bar{z}) - \left(\xi_{\theta T} \sqrt{2 r_\theta \bar{T}_\theta} \frac{\bar{\mu}_\theta}{\bar{p}_\theta} \frac{\partial \bar{T}_\theta}{\partial \bar{r}} \right)_{\bar{r}=R} \quad (15)$$

où les coefficients constants $\sigma_{\theta p}$, $\sigma_{\theta T}$ and $\xi_{\theta T}$ caractérisent le glissement visqueux et thermique de l'espèce θ aux parois [14]. Les conditions aux limites pour la pression en amont et en aval du canal seront spécifiées plus tard.

Afin de discuter les ordres de grandeur des différents termes des équations du modèle, on écrit les équations sans dimension correspondantes. Comme longueur caractéristique, on prend L dans la direction axiale et R dans la direction radiale et on pose $\epsilon = R/L \ll 1$. En outre, les valeurs caractéristiques pour les composantes radiales et longitudinales de la vitesse, la température, la pression et la masse volumique sont, respectivement : U et V , T_c (pour les deux gaz), $p_{\theta c}$ et $\rho_{\theta c}$ (avec $p_{\theta c} = r_\theta \rho_{\theta c} T_c$, $\theta = a, b$). A partir de ces grandeurs caractéristiques, on construit les nombres sans dimension suivants :

$$\gamma_a = \frac{c_{pa}}{c_{va}}, \quad Pr_a = \frac{\mu_a c_{pa}}{\kappa_a}, \quad Re_a = \frac{\rho_a c_{pa} V L}{\mu_a}, \quad Ma_a = \frac{V}{\sqrt{\gamma_a r_a T_c}}, \quad (16)$$

Naturellement nous avons des définitions analogues pour la seconde espèce. Puisque Pr_θ est constant, μ_θ et κ_θ sont proportionnels à $T_\theta^{\omega_\theta}$. On s'intéresse désormais au cas stationnaire. D'après le principe de moindre dégénérescence [15], les deux termes doivent être conservés dans les bilans de masse sans dimension. Par conséquent $U = \epsilon V$. Afin d'étudier les dégénérescences significatives, on suppose que les nombres de Reynolds et de Mach sont petits ou d'ordre unité ; on pose $Re_a = R_a \epsilon^\alpha$ et $Ma_a = M_a \epsilon^\beta$ où R_a et M_a sont d'ordre un. L'analyse des ordres de grandeur des termes des lois de bilan sans dimension obtenues de (1), (2) et (3) conduit à un nombre de Mach d'ordre ϵ et à un nombre de Reynolds d'ordre unité, *i.e.* à $\alpha = 0$ et $\beta = 1$ [13]. Au premier ordre d'approximation nous avons les équations sans dimension suivantes :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho_a u_a) + \frac{\partial}{\partial z} (\rho_a v_a) = 0, \quad (17)$$

pour la masse. Pour les projections axiale et radiale du bilan de quantité de mouvement, nous avons :

$$0 = -\frac{1}{\gamma_a M_a^2} \frac{\partial p_a}{\partial z} + \frac{1}{R_a} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_a \frac{\partial v_a}{\partial r} \right) + F_{ab} \frac{\rho_{bc}}{\rho_{ac}} \left(\frac{\mu_{ac}}{\mu_{bc}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{R_a}{\gamma_a M_a^2} p_a p_b \frac{(v_b - v_a)}{T(z)^{1 + \frac{\omega_a + \omega_b}{2}}}, \quad (18)$$

$$0 = -\frac{1}{\gamma_a M_a^2} \frac{\partial p_a}{\partial r}, \quad (19)$$

avec :

$$F_{ab} = \left(\frac{m_b}{m_a} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{m_a}{\sqrt{2 m_b (m_a + m_b)}} \left(\frac{d_a + d_b}{2 d_a} \right)^2 \frac{d_a}{d_b} \sqrt{\Omega_a \Omega_b}. \quad (20)$$

Pour le gaz a , le bilan d'énergie au premier ordre d'approximation est :

$$0 = \frac{\gamma_a}{R_a Pr_a} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \kappa_a \frac{\partial T_a}{\partial r} \right) \right] + G_{ab} \frac{R_a}{\gamma_a M_a^2} \frac{\rho_b p_a}{\sqrt{\mu_a \mu_b}} \sqrt{\frac{T_b}{T_a}} (T_b - T_a), \quad (21)$$

avec :

$$G_{ab} = \frac{3 m_a (\gamma_a - 1)}{m_a + m_b} \frac{\rho_{bc}}{\rho_{ac}} \frac{\mu_{ac}}{\mu_{bc}} F_{ab} \quad (22)$$

Les équations pour l'autre espèce s'obtiennent facilement en échangeant a et b dans les équations précédentes. Si l'on considère les bilans d'énergie (21) et que l'on suppose que les deux gaz sont en équilibre thermique alors, l'équation (21) munie de la condition pariétale (15) admet une solution unique :

$$T_a(r, z) = T_w(z) = T_b(r, z) = T(z) \quad (23)$$

Enfin, il reste à traiter les conditions aux limites pariétales pour la vitesse ; on obtient, au premier ordre d'approximation :

$$v_\theta(1, z) = -K_\theta \frac{[T_\theta(z)]^{\omega_a + \frac{1}{2}}}{p_\theta(z)} \frac{\partial v_\theta}{\partial r}(1, z) + \frac{\sigma_\theta T}{R_\theta} [T_\theta(z)]^{\omega_a} \frac{dT_\theta}{dz}(z) \quad u_\theta(1, z) = 0 \quad (24)$$

avec : $K_\theta = \sigma_\theta p \sqrt{2\gamma_\theta} \frac{M_\theta}{R_\theta}$. Au premier ordre d'approximation, on obtient ainsi un système de six équations : bilan de masse et de quantité de mouvement pour les deux gaz. Dans le paragraphe suivant on s'intéresse à la solution de ce système.

3 Solution au premier ordre d'approximation

La projection radiale du bilan de quantité de mouvement (19) pour les deux gaz conduit à des pressions qui ne dépendent que de la variable d'espace longitudinale z . Si on utilise, en plus, la loi des gaz parfaits sans dimension, on a : $p_a(z) = \rho_a(z) T(z)$ et $p_b(z) = \rho_b(z) T(z)$. Par conséquent, les équations du problème se réduisent à :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r p_a u_a) + \frac{\partial}{\partial z} (p_a v_a) = 0, \quad (25)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r p_b u_b) + \frac{\partial}{\partial z} (p_b v_b) = 0, \quad (26)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_a}{\partial r} \right) - \frac{B_a}{A_a} p_a p_b (v_a - v_b) = \frac{1}{A_a} \frac{dp_a}{dz}, \quad (27)$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_b}{\partial r} \right) + \frac{B_b}{A_b} p_a p_b (v_a - v_b) = \frac{1}{A_b} \frac{dp_b}{dz}, \quad (28)$$

avec :

$$A_\theta = \frac{\gamma_\theta M_\theta^2}{R_\theta} [T_\theta(z)]^{\omega_\theta} \quad \theta = a, b \quad (29)$$

et :

$$B_a = R_a \frac{\rho_{bc}}{\rho_{ac}} F_{ab} \frac{\mu_{ac}}{\mu_{bc}} [T_a(z)]^{-(1+\frac{\omega_a+\omega_b}{2})}, \quad B_b = R_b \frac{\rho_{ac}}{\rho_{bc}} F_{ba} \frac{\mu_{bc}}{\mu_{ac}} [T_b(z)]^{-(1+\frac{\omega_a+\omega_b}{2})} \quad (30)$$

Dans les expressions (29) et (30), A_a , A_b , B_a et B_b sont des fonctions qui dépendent de z . Les projections axiales (27) et (28) des bilans de quantité de mouvement apparaissent comme des équations de Bessel d'ordre zéro modifiées. Elles sont résolues pour obtenir les composantes axiales des vitesses. Comme les vitesses longitudinales des deux gaz doivent être finies sur l'axe du canal ($r = 0$), la fonction de Bessel de seconde espèce disparaît des solutions. En utilisant les conditions aux limites pariétales (24), les composantes axiales de la vitesse s'expriment explicitement en fonction des pressions :

$$\begin{aligned} v_a(r, z) = & \frac{1}{A_a B_b + A_b B_a} \left[A_b B_a C_1 I_0(\lambda_1 r) + \left(A_a \frac{dp_b}{dz} - A_b \frac{dp_a}{dz} \right) \frac{A_b B_a E_a}{E p_a p_b} \right. \\ & + \left. \left(B_a \frac{p_b}{dz} + B_b \frac{dp_a}{dz} \right) \left(\frac{r^2 - 1}{4} - \frac{K_b T^{\omega_b + \frac{1}{2}}}{2 p_b} \frac{A_b B_a E_a}{E} - \frac{K_a T^{\omega_a + \frac{1}{2}}}{2 p_a} \frac{A_a B_b E_b}{E} \right) \right] \\ & + \left[\frac{A_a B_b E_b}{E} \frac{\sigma_a T}{R_a} T(z)^{\omega_a} + \frac{A_b B_a E_a}{E} \frac{\sigma_b T}{R_b} T(z)^{\omega_b} \right] \frac{dT}{dz}(z), \quad (31) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} v_b(r, z) = & \frac{1}{A_a B_b + A_b B_a} \left[-A_a B_b C_1 I_0(\lambda_1 r) + \left(A_b \frac{dp_a}{dz} - A_a \frac{dp_b}{dz} \right) \frac{A_a B_b E_b}{E p_a p_b} \right. \\ & + \left. \left(B_a \frac{p_b}{dz} + B_b \frac{dp_a}{dz} \right) \left(\frac{r^2 - 1}{4} - \frac{K_b T^{\omega_b + \frac{1}{2}}}{2 p_b} \frac{A_b B_a E_a}{E} - \frac{K_a T^{\omega_a + \frac{1}{2}}}{2 p_a} \frac{A_a B_b E_b}{E} \right) \right] \\ & + \left[\frac{A_a B_b E_b}{E} \frac{\sigma_a T}{R_a} T(z)^{\omega_a} + \frac{A_b B_a E_a}{E} \frac{\sigma_b T}{R_b} T(z)^{\omega_b} \right] \frac{dT}{dz}(z), \quad (32) \end{aligned}$$

où I_0 est la fonction de Bessel modifiée de première espèce d'ordre zéro. En outre les fonctions de z suivantes apparaissent dans (31) et (32) :

$$\lambda_1(z) = \sqrt{\left(\frac{B_a}{A_a} + \frac{B_b}{A_b} \right) p_a(z) p_b(z)}, \quad (33)$$

$$E_\theta(z) = I_0(\lambda_1(z)) + \frac{K_\theta T(z)^{\omega_\theta + \frac{1}{2}}}{p_\theta(z)} \lambda_1(z) I_1(\lambda_1(z)) \quad \theta = a, b \quad (34)$$

$$E(z) = A_a B_b E_b(z) + A_b B_a E_a(z), \quad (35)$$

$$\begin{aligned} C_1(z) = & \frac{B_b}{E(z)} \left[\frac{A_b}{B_b p_a(z) p_b(z)} + \frac{K_b T^{\omega_b + \frac{1}{2}}}{2 p_b(z)} - \frac{K_a T^{\omega_a + \frac{1}{2}}}{2 p_a(z)} \right] \frac{dp_a}{dz}(z) \\ & + \frac{B_a}{E(z)} \left[-\frac{A_a}{B_a p_a(z) p_b(z)} + \frac{K_b T^{\omega_b + \frac{1}{2}}}{2 p_b(z)} - \frac{K_a T^{\omega_a + \frac{1}{2}}}{2 p_a(z)} \right] \frac{dp_b}{dz}(z) \\ & + \frac{A_a B_b + A_b B_a}{E} \left(\frac{\sigma_a T}{R_a} T(z)^{\omega_a} - \frac{\sigma_b T}{R_b} T(z)^{\omega_b} \right) \frac{dT}{dz}(z), \quad (36) \end{aligned}$$

où I_1 est la fonction de Bessel modifiée de première espèce d'ordre un et où K_θ , A_θ et B_θ ($\theta = a, b$) sont donnés dans (24), (29) et (30).

Pour chaque gaz, la pression apparaît comme la solution d'une équation différentielle ordinaire obtenue en intégrant les équations de bilan de masse (25) et (26) entre $r = 0$ et $r = 1$. On utilise la condition à la limite pariétale pour la composante radiale de la vitesse et on obtient :

$$\int_0^1 \rho_a(z) v_a(r, z) r dr = \frac{Q_{ma}}{2}, \quad (37)$$

$$\int_0^1 \rho_b(z) v_b(r, z) r dr = \frac{Q_{mb}}{2}, \quad (38)$$

où Q_{ma} et Q_{mb} sont les débits massiques constants de chaque espèce ($Q_{m\theta} = Q_{m\theta}^*/(\rho_{\theta c} \pi R^2 V)$, $\theta = a, b$). Les équations (37) et (38) sont intégrées en r et ainsi on obtient, après quelques calculs, les équations suivantes pour $p_a(z)$ et $p_b(z)$:

$$X_a \frac{dp_a}{dz} + Y_a \frac{dp_b}{dz} = (A_a B_b + A_b B_a) \left[\frac{T Q_{ma}}{p_a} - \left(\frac{A_a B_b E_b \sigma_a T}{E R_a} T^{\omega_a} + \frac{A_b B_a E_a \sigma_b T}{E R_b} T^{\omega_b} \right) \frac{dT}{dz} \right. \\ \left. - \frac{2A_b B_a}{E \lambda_1} I_1(\lambda_1) \left(\frac{\sigma_a T}{R_a} T^{\omega_a} - \frac{\sigma_b T}{R_b} T^{\omega_b} \right) \frac{dT}{dz} \right], \quad (39)$$

$$Y_b \frac{dp_a}{dz} + X_b \frac{dp_b}{dz} = (A_a B_b + A_b B_a) \left[\frac{T Q_{mb}}{p_b} - \left(\frac{A_a B_b E_b \sigma_a T}{E R_a} T^{\omega_a} + \frac{A_b B_a E_a \sigma_b T}{E R_b} T^{\omega_b} \right) \frac{dT}{dz} \right. \\ \left. + \frac{2A_a B_b}{E \lambda_1} I_1(\lambda_1) \left(\frac{\sigma_a T}{R_a} T^{\omega_a} - \frac{\sigma_b T}{R_b} T^{\omega_b} \right) \frac{dT}{dz} \right], \quad (40)$$

avec :

$$X_a = \frac{A_b B_a B_b}{E \lambda_1} \left[\frac{2 A_b}{B_b p_a p_b} + \frac{K_b T^{\omega_b + \frac{1}{2}}}{p_b} - \frac{K_a T^{\omega_a + \frac{1}{2}}}{p_a} \right] I_1(\lambda_1) - \frac{A_b^2 B_a E_a}{E p_a p_b} \\ - B_b \left[\frac{1}{8} + \frac{K_b T^{\omega_b + \frac{1}{2}}}{2p_b} \frac{A_b B_a E_a}{E} + \frac{K_a T^{\omega_a + \frac{1}{2}}}{2p_a} \frac{A_a B_b E_b}{E} \right], \quad (41)$$

$$Y_a = + \frac{A_b B_a^2}{E \lambda_1} \left[-\frac{2 A_a}{B_a p_a p_b} + \frac{K_b T^{\omega_b + \frac{1}{2}}}{p_b} - \frac{K_a T^{\omega_a + \frac{1}{2}}}{p_a} \right] I_1(\lambda_1) + \frac{A_a A_b B_a E_a}{E p_a p_b} \\ - B_a \left[\frac{1}{8} + \frac{K_b T^{\omega_b + \frac{1}{2}}}{2p_b} \frac{A_b B_a E_a}{E} + \frac{K_a T^{\omega_a + \frac{1}{2}}}{2p_a} \frac{A_a B_b E_b}{E} \right]. \quad (42)$$

Les expressions de X_b et Y_b , respectivement, sont obtenues des expressions de X_a et Y_a en échangeant a et b . Les équations (39) et (40) sont couplées et linéaires en fonction des gradients de pression longitudinaux mais non linéaires en z .

4 Résolution numérique

Afin de résoudre les deux équations (39) et (40), la température de paroi et quatre conditions aux limites sont requises : par exemple, les pressions p_a et p_b à l'entrée du canal et les débits massiques sans dimension Q_{ma} et Q_{mb} . On prend : $\bar{p}_a(-L/2) = 2,33 \cdot 10^4$ Pa, $\bar{p}_b(-L/2) = 2,64 \cdot 10^4$ Pa, $\bar{Q}_{ma} = 1,57 \cdot 10^{-13}$ kg.m⁻¹.s⁻¹ and $\bar{Q}_{mb} = 8,21 \cdot 10^{-14}$ kg.m⁻¹.s⁻¹. Ces valeurs sont obtenues à partir d'une simulation DSMC dans la même configuration. On considère le cas d'un écoulement isotherme ($T = 300$ K) d'un mélange d'Argon (a) et de Néon (b). D'après [2], nous avons : $m_a = 66,3 \cdot 10^{-27}$ kg, $m_b = 33,5 \cdot 10^{-27}$ kg, $d_a = 4,11 \cdot 10^{-10}$ m, $\gamma_a = \gamma_b = 5/3$, $[\mu_a]_{VSS} = 2,117 \cdot 10^{-5}$ Pa.s, $\alpha_a = 1,40$, $\omega_a = 0,81$, $d_b = 2,72 \cdot 10^{-10}$ m, $[\mu_b]_{VSS} = 2,975 \cdot 10^{-5}$ Pa.s, $\alpha_b = 1,31$ et $\omega_b = 0,66$.

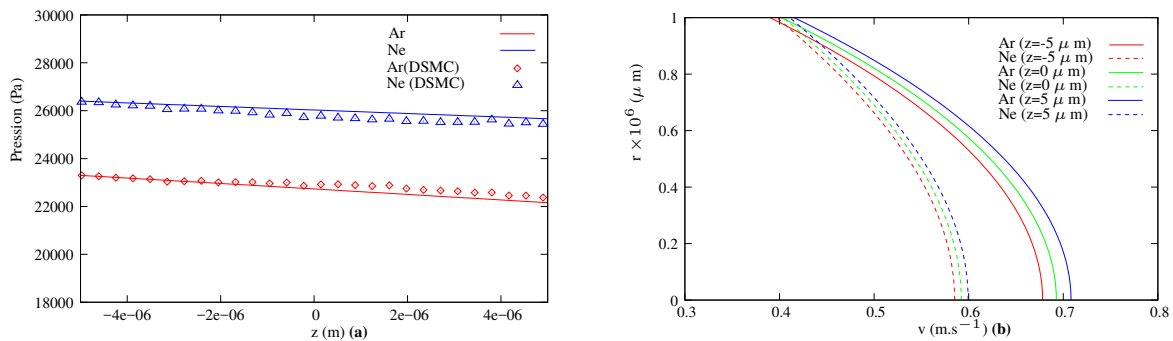


FIGURE 2 – Pressions le long de l'axe du canal : comparaison avec DSMC (a) - Vitesses longitudinales (modèle asymptotique) (b)

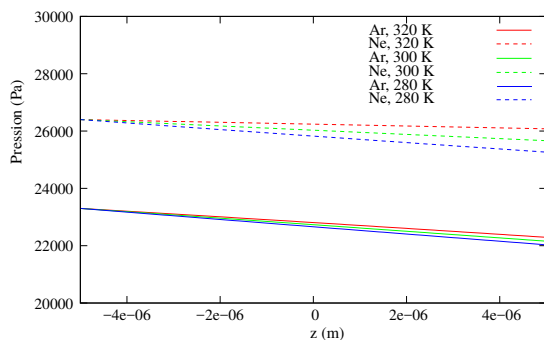


FIGURE 3 – Pressions le long de l'axe du canal pour $T_{in} = 300\text{K}$ et différentes valeurs de T_{out}

Ces valeurs sont celles utilisées aussi bien dans les simulations DSMC avec le programme DS2V développé par Bird [3] que dans la résolution du modèle asymptotique constitué des équations (39) et (40). Ces équations sont intégrées avec MATLAB en utilisant une méthode de Runge-Kutta du quatrième ordre à pas variables. A partir des pressions ainsi obtenues, la vitesse axiale de chaque gaz est calculée grâce à (31) et (32). La solution obtenue par le modèle asymptotique est comparée à la solution DSMC dans la figure Fig. 2a. Naturellement le temps de calcul est beaucoup plus court pour notre modèle asymptotique (quelques secondes) que pour la simulation DSMC (plusieurs jours). La figure Fig. 2a représente l'évolution de la pression le long de l'axe du canal pour chaque gaz par les deux méthodes. Elles sont en bon accord. Comme la différence de pression entre l'entrée et la sortie du canal est, pour chaque gaz, assez faible, les pressions semblent quasi linéaires en z pour les deux méthodes. Si l'accord est très bon à l'entrée du canal, l'écart entre les deux modèles est plus important à la sortie du canal où il est de l'ordre 1 % pour le Néon et l'Argon. Cette différence entre les deux approches est une conséquence de la forte non linéarité des équations (39) et (40) : elles sont très sensibles aux conditions aux limites. En conséquence, une petite variation pour les pressions d'entrée ou les débits massiques conduit à une variation sensible de la solution.

En outre, pour cette comparaison, les conditions aux limites sont issues d'une simulation DSMC. Du fait du bruit numérique dans les simulations de Monte Carlo, il est donc difficile d'évaluer ces conditions de manière très précise. En particulier, l'erreur statistique dans les simulations DSMC, pour les vitesses, est inversement proportionnelle au nombre de Mach [10] qui est de l'ordre de $3 \cdot 10^{-3}$ dans le cas présent. Il en résulte une erreur statistique relativement importante pour les vitesses (de l'ordre de 6%) et donc pour les débits massiques.

L'évolution de la vitesse axiale est représentée sur la figure Fig. 2b. Contrairement au cas de deux gaz de

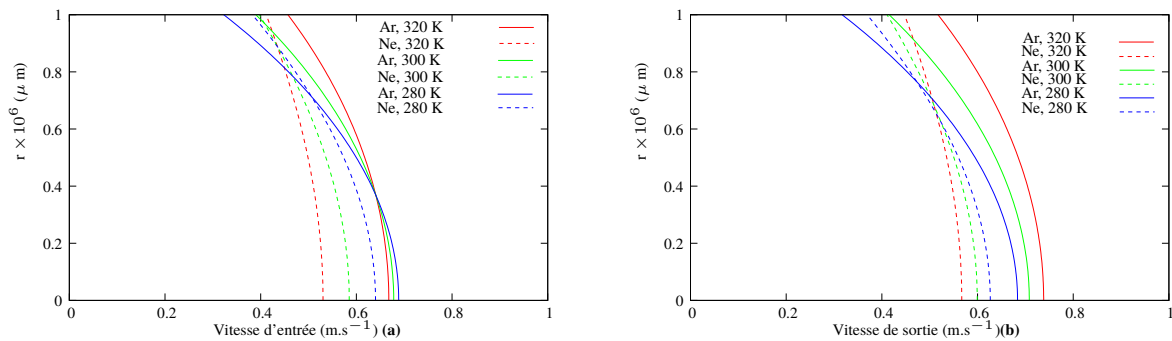


FIGURE 4 – Vitesses axiales à l’entrée **(a)** et à la sortie **(b)** du canal pour $T_{in} = 300$ K et différentes valeurs de T_{out}

même masse moléculaire [4] où les vitesses des deux espèces sont très proches, on observe ici d’importantes différences. Elles sont naturellement dues à la différence de masse moléculaire. Avec les conditions aux limites choisies, les deux gaz sont accélérés dans le canal et la vitesse de l’argon est plus importante que celle du néon.

Pour les mêmes gaz, on s’intéresse maintenant aux effets d’un gradient de température constant aux parois. La température d’entrée est toujours de 300 K et la température de sortie varie. Les pressions d’entrée et les débits massiques sont inchangés. La figure Fig. 3 montre l’évolution de la pression de chaque espèce pour trois différentes températures de sortie. Les pressions décroissent avec z . Pour une valeur donnée de z , les pressions augmentent lorsque la température de sortie augmente. Ce résultat est en accord avec les observations dans le cas de gaz de masses moléculaires identiques [4] et dans le cas plan [8]. Les profils de vitesses sont donnés dans la figure Fig. 4. Dans le cas isotherme, comme on pouvait s’y attendre [5, 4] la vitesse axiale des deux gaz augmente le long du canal tandis que la pression décroît. Dans le cas non isotherme, on observe le phénomène de transpiration thermique qui induit un mouvement des gaz de l’extrémité froide du canal vers l’extrémité la plus chaude : lorsque la température d’entrée est plus grande que la température de sortie (cas $T_{out} = 280$ K), les effets du gradient de pression et du gradient de température sont opposés et on observe une décélération des deux gaz dans le canal. Lorsque la température d’entrée est plus petite que la température de sortie (cas $T_{out} = 320$ K), les effets du gradient de pression et du gradient de température contribuent tous les deux à accélérer les gaz le long du canal. On observe ainsi, numériquement, un résultat bien établi dans le cas de l’écoulement d’un seul gaz.

Nous considérons maintenant deux mélanges différents dans le cas isotherme ($T=300$ K) et avec les conditions aux limites suivantes : $\bar{p}_a(-L/2) = \bar{p}_b(-L/2) = 2,5 \cdot 10^4$ Pa et $\bar{Q}_{ma} = \bar{Q}_{mb} = 5 \cdot 10^{-13}$ kg.m⁻¹.s⁻¹. Le premier est constitué d’argon et de néon (dont les caractéristiques ont été données plus haut) et le second de néon et de xenon. Pour le xenon, nous avons : $m = 218 \cdot 10^{-27}$ kg, $d = 5,65 \cdot 10^{-10}$ m, $\gamma = 5/3$, $[\mu]_{VSS} = 2,107 \cdot 10^{-5}$ Pa.s, $\alpha = 1,44$ et $\omega = 0,85$. Les résultats obtenus sont présentés dans les figures Fig. 5 et Fig. 6.

Dans les deux cas traités, la pression de l’espèce la plus lourde augmente, ce qui se traduit par une décélération du gaz le long du canal. La pression de l’espèce la plus légère, à l’inverse, diminue ; le gaz est alors accéléré dans le canal. La vitesse de l’espèce la plus lourde, du fait d’une inertie plus importante, est moins modifiée que celle de la plus légère.

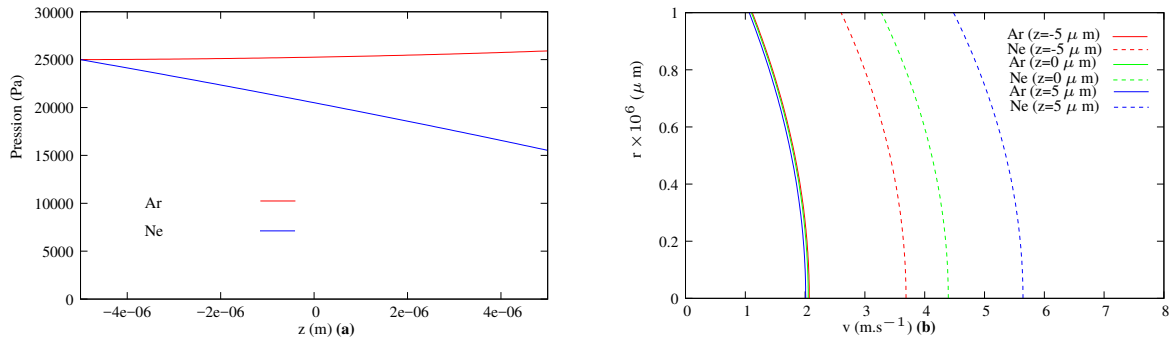


FIGURE 5 – Mélange Ar-Ne : Pressions le long de l'axe du canal (a) - Vitesses longitudinales (b)

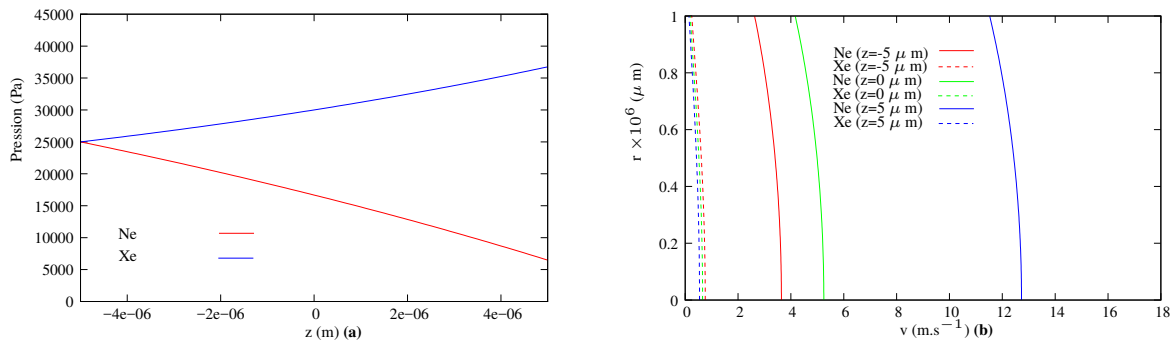


FIGURE 6 – Mélange Xe-Ne : Pressions le long de l'axe du canal (a) - Vitesses longitudinales (b)

5 Conclusion

Dans cette contribution, nous présentons une étude asymptotique de l'écoulement d'un gaz dans un micro-canal. Ce modèle est obtenu à partir des équations de Navier-Stokes-Fourier avec des termes de couplages additionnels. Les vitesses longitudinales sont données explicitement en fonction des pressions qui sont calculées à partir d'un système de deux équations différentielles. Les avantages de cette méthode, comparée à DSMC, sont un temps de calcul très court et ainsi une étude paramétrique facilitée.

Dans un premier temps, les résultats obtenus ont été comparés à des simulations de Monte-Carlo. Les deux méthodes sont en bon accord. Les effets d'un gradient de température pariétal constant ont été étudiés et le phénomène de transpiration thermique a ainsi été observé.

Références

- [1] O. Aktas, N. R. Aluru, and U. Ravaioli. Application of a parallel dsmc technique to predict flow characteristics in microfluidic filters. *J. Microelectromech. S.*, 10 :538–549, 2001.
- [2] G. A. Bird. *Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Clarendon Press, 1994.
- [3] G. M. Bird. Dsmc resources, 2014.
- [4] Croizet Cédric and Renée Gatignol. Asymptotic modeling of the axisymmetric flow of a thermal binary gas mixture in a circular micro-channel. *AIP Conference Proceedings*, 1786(1) :080010, 2016.
- [5] Cédric Croizet and Renée Gatignol. Asymptotic modelling of the axisymmetric flow of a binary gas mixture in a circular microchannel. In *Proceedings of the 28th Int. Symp. of Rarefied Gas*

- Dynamics*, AIP Conference Proceedings, pages 799–806, New York, 2014. American Institute of Physics.
- [6] T. G. Elizarova, I. A. Graur, and J. C. Lengrand. Two-fluid computational model for a binary gas mixture. *Eur. J. Mech. B-Fluids*, 3 :351–369, 2001.
- [7] Renée Gatignol and Cédric Croizet. Asymptotic modelling of the flows in micro-channel by using macroscopic balance equation. In A. Levin, I. J. Wysong, and A. L. Garcia, editors, *Proceedings of the 27th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics*, pages 730–735, New York, 2011. American Institute of Physics.
- [8] Renée Gatignol and Cédric Croizet. Asymptotic modelling of the flow of a thermal binary gas mixture in a microchannel. In *Proceedings of the 28th Int. Symp. of Rarefied Gas Dynamics*, AIP Conference Proceedings, pages 807–814, New York, 2014. American Institute of Physics.
- [9] Renée Gatignol and Cédric Croizet. Asymptotic modeling of thermal binary monatomic gas flows in plane microchannels - comparison with dsmc simulations. *Physics of Fluids*, 29(4) :042001, 2017.
- [10] N.G. Hadjiconstantinou, A.L. Garcia, and G.H. Bazant. Statistical error in particle simulations of hydrodynamic phenomena. *J. Comp. Phys.*, 187 :274–297, 2003.
- [11] S.G. Kandlikar, S. Garimella, D. Li, S. Colin, and M.R. King. *Transfer and fluid flow in minichannels and microchannels*. Elsevier, 2005.
- [12] G. Karniadakis and A. Beskok. *Microflows - Fundamentals and Simulation*. Springer, 2006.
- [13] M. Reyhanian-Mashhadi. *Simulation numérique par la méthode de Monte Carlo (DSMC) et modélisation analytique d'un mélange gazeux dans un micro canal*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, Paris, 2011.
- [14] F. Sharipov and V. Seleznev. Data on internal rarefied gas flows. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 27 :657–706, 1998.
- [15] M. Van Dyke. *Perturbation Methods in Fluid Mechanic*. Academic Press, 1964.