

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

جامعة أبي بكر بلقايد - تلمسان -

Université Aboubakr Belkaïd – Tlemcen –

Faculté de TECHNOLOGIE



Mémoire de fin d'étude pour l'obtention de diplôme de master

En : Génie Mécanique

Spécialité : Energétique

Présenté Par :

MENOUAR Hadj Boumediene

NACER Mohammed Riyad

Sujet

Modélisation et simulation numérique d'un mélange de gaz dans un micro-canal par la méthode de Monte Carlo

Soutenu devant le jury composé de :

- Mr. GHERNAOUET	Pr	Univ. Tlemcen	Président.
MOHAMMED EL AMINE			
-Mr. MAFTAH KHOUANE	Pr	Univ. Tlemcen	Examineur.
-Mr. AMEUR DJILALI	MCA	Univ. Tlemcen	Encadreur.
-Mr .SAIM RACHID	Pr	Univ. Tlemcen	Co-encadreur.

Année universitaire : 2020/2021

REMERCIEMENTS

Nous tenons tout d'abord à remercier en premier lieu ALLAH, le Tout Puissant et Miséricordieux qui nous a donné la force, la volonté et le courage pour mener à bonne fin ce travail.

Nous voudrions remercier chaleureusement notre encadreur Mr. DJILLALI AMEUR de nous avoir pris en charge, pour sa disponibilité, son aide et ses précieux conseils ainsi que pour ses explications claires portant sur un domaine complexe comme la microfluidique.

Nous remercions aussi notre co-encadreur Mr. SAIM RACHID d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Nous remercions ainsi Mme DIB JOANNA de nous avoir aidés dans le suivi des calculs numériques ainsi que la rédaction du papier de la conférence et la relecture du mémoire.

Nous remercions le président de jury Mr. GHERNAOUEY Mohammed el amine ainsi que l'examineur Mr. MEFTAH KHOUANE.

Nous tenons à adresser nos sincères remerciements à tous les enseignants du département de génie mécanique qui ont contribué à notre formation d'ingénieur.

Enfin, tous ceux ou celles qui nous ont apportés leur soutien de loin ou de près, trouvent ici, l'expression de nos vives et sincères reconnaissances.

DEDICACES

Grâce à « Dieu » qui m'a tracé le chemin et m'a donné le pouvoir et le courage de continuer jusqu'à la fin, j'ai pu réaliser ce modeste travail que je dédie :

A mes chers parents qui m'ont toujours supporté dans toute ma vie pour atteindre mes objectifs.

A la mémoire de mon père NACER MOHAMMED qui nous a quittés voilà plus de dix ans.

A mon grand-père que Dieu bénisse son âme, et à ma grande famille.

A tous mes amis sans exception, plus particulièrement NAIM ABDELILLAH, BOUKHARI BACHIR, LACEN NACER MOHAMMED et RABHI MOHAMMED.

A mon binôme MENOVAR HADJ BOUMEDIENE et à toute ma promotion 2020/2021.

DEDICACES

A mes parents

A mes frères et sœur

A tous mes amis

Résumé

Dans ce mémoire, nous réalisons une étude numérique d'un écoulement de mélange d'Azote (N_2) et de monoxyde de carbone (CO) traversant un micro-canal de diamètre $d=1\mu m$. La modélisation des écoulements à des échelles trop petites nécessitent l'utilisation de méthodes différentes de celles basées sur le modèle de Navier-Stokes. Afin de surmonter cette difficulté, nous avons fait recours à la Simulation Directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC). La configuration retenue pour les simulations numériques correspond au cas d'un écoulement de Hagen-Poiseuille. Les conditions aux limites de température et de différences de pression sont maintenues constantes. Afin de voir l'effet du coefficient d'accommodation sur l'écoulement du mélange, on a fait varier le σ de 0.25 à 1.00. Les résultats obtenus confirment la présence d'un glissement à la paroi traduit par des valeurs non nulles de la vitesse proches à la paroi. Les résultats numériques montrent aussi que la diminution du coefficient d'accommodation engendre une augmentation régulière de la vitesse. L'effet de cette diminution du coefficient sur le nombre de Mach et sur le libre parcours moyen des molécules est ainsi discuté dans ce mémoire.

Mots clés : DSMC, micro-fluidique, nombre de Knudsen, écoulement raréfié.

Abstract

In this study, we perform a numerical study of the laminar flow of a mixture of two gases of Nitrogen (N₂) and carbon monoxide (CO) through a micro-channel ($d=1\mu\text{m}$), at the boundary conditions on the solid wall. The main results show that the use of a micro-channel plane, to solve the geometry studies and analyze the Navier-Stocks equations (mass, momentum, conservation of energy ...), but at the micro-fluidic scale the Navier-Stocks equations reach their limits of validity. Therefore it is necessary to resort to the Direct Simulation by the Monte Carlo method (DSMC) at least in the part where the flow is rarefied. The objective of this internship is to simulate a mixture of several gases in a micro-channel using the (DSMC) approach. So we use for this calculation the code of DS2V which was realized by Bird (2005).

The results obtained were exploited and discussed in terms of Knudsen number (Kn) and the accommodation coefficient σ and their action on the effects of velocity slip and Mach number variations.

Key words: DSMC, number of Knudsen, rarefied flow.

ملخص

في هذه الأطروحة، نقوم بأجراء دراسة رقمية لتدفق خليط من النتروجين وأول أكسيد الكربون عبر قناة صغيرة قطرها $1\mu\text{m}$. يتطلب تدفق النمذجة على نطاقات صغيرة جدا استخدام أساليب مختلفة عن تلك التي تستند إلى نموذج نافير-ستوكس. من أجل التغلب على هذه الصعوبة، استخدمنا المحاكاة المباشرة من خلال طريقة مونتني - كارلو. وتوافق التشكيل المختار للمحاكاة العددية مع حالة تدفق هاجن-بويزيوي. تكون الشروط إلى أقصى حد من درجة الحرارة والاختلافات في الضغط ثابتة. ومن أجل معرفة أثر معامل الإقامة على تدفق الخليط قمنا بتغيير تأثير معامل الإقامة بين 0.25 و 1.00. تؤكد النتائج التي تم الحصول عليها وجود انزلاق على الجدار ينعكس بقيمة غير صفرية للسرعة القريبة من الجدار. وتبين النتائج العددية أيضا أن الانخفاض في معامل الإقامة يؤدي إلى زيادة منتظمة في السرعة. تمت مناقشة تأثير هذا الانخفاض في المعامل على عدد ماخ وعلى متوسط المسار الحر للجزيئات في هذه الأطروحة.

الكلمات المفتاحية : محاكاة مباشرة مونتني كارلو، الموائع الدقيقة، عدد كنودسن، تدفق غاز مخلل.

Table des matières

Table des matières

Résumé	5
Abstract	6
ملخص	7
Liste des figures	11
Liste des tableaux	13
Nomenclature	14
Introduction Générale.....	16
Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique	19
1.1. Introduction	20
1.2. Développement de composants micro-fluidiques	21
1.3. Micro-fluidique et applications	23
1.4. MEMS et micro-fluidique.....	24
1.5. MEMS (Micro Système Electromécanique)	26
1.5.1. Définition	26
1.5.2. Historique De MEMS	27
1.5.3. Applications des MEMS	28
1.5.4. Domaine d'applications des micro-systèmes	29
1.5.4.1. Les captures MEMS	31
1.5.4.2. Les MEMS optiques	32
1.5.4.3. Les MEMS RF	32
1.5.4.4. Les bio-MEMS	33
1.6. Ecoulement micro-fluidique	34
1.7. Equations de Navier-Stokes	35
1.8. Nombres adimensionnels en micro-fluidique gazeuse	36
1.9. Mélange des flux de gaz dans un micro canal.....	37
1.10. Analyse numérique du mélange de deux gaz dans un micro-canal	38
1.10.1. Introduction	38
1.10.2. Formulation et méthode de solution [26, 37].....	40
1.10.3. Résultats de l'étude de Wang et Li [26] et de Reyhanian et al. [37].....	42
1.10.3.1. Variation de la vitesse d'entrée	43
1.11. Conclusion.....	44

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo	45
2.1. Méthode de Monte Carlo	46
2.1.1. Introduction.....	46
2.1.2. Histoire de la méthode de Monte Carlo.....	46
2.1.3. Domaines d'utilisations.....	47
2.1.3.1. Sciences physiques.....	48
2.1.3.2. Ingénierie.....	48
2.1.3.3. Finances et affaires.....	48
2.1.3.4. Mathématique.....	49
2.1.3.5. Biologie computationnelle	49
2.2. La simulation directe par la méthode de Monte Carlo.....	49
2.2.1. Introduction.....	49
2.2.2. Définition.....	52
2.2.3. Principe de la simulation directe par la méthode de Monte Carlo(DSMC) ..	52
2.2.3.1. Echantillon [2]	53
2.2.3.2. Représentativité [2].....	53
2.2.3.3. Sondage taille de l'échantillon [2].....	53
2.2.4. Procédure de la méthode de DSMC.....	54
2.2.4.1. Phase d'initialisation	54
2.2.4.2. Phase de déplacement.....	54
2.2.4.3. Phase d'indexation	55
2.2.4.4. Phase de collision	55
2.2.4.5. Phase d'évaluation des grandeurs macroscopiques.....	58
2.3. Les codes de DSMC	58
2.4. Gaz dilué	59
2.4.1. Régimes d'écoulement d'un gaz dilué.....	60
2.4.2. Poids statistique des molécules simulées dans DSMC.....	60
2.5. DSMC vs MD et CFD dans les simulations des flux de gaz.....	61
2.6. Conclusion.....	62
Chapitre 3: Modélisation et simulation numérique du problème.....	63
3.1. Introduction	64
3.2. Simulation par la méthode de DSMC d'écoulement dans un micro-canal.....	64
3.2.1. Position du problème.....	64
3.2.2. Nombres adimensionnels	65
3.2.3. Etude de maillage	66

3.2.4. Etude paramétrique.....	66
3.3. Résultats et discussions	67
3.3.1. Vitesse de l'écoulement	67
3.3.2. Variation du nombre de Mach.....	67
3.3.3. Concentration des deux espèces dans le mélange.....	68
3.3.4. Raréfaction du gaz.....	69
3.3.5. Condition à la limite de température.....	69
3.3.6. Vitesse d'écoulement en fonction de σ	71
3.3.7. Vitesse de glissement le long de paroi solide	72
3.4. Conclusion.....	72
Conclusion générale et perspectives.....	73

Liste des figures

Figure 1.1. Dimensions caractéristiques des dispositifs micro-fluidiques (Nguyen and Wereley, 2002)	20
Figure 1.2. Pompe à base de silicium à commande électrique	22
Figure 1.3. Dessin schématique de la section transversale du micro-mixeur	23
Figure 1.4. Fourmi tenant un micro-engrenage en nickel, fabriqué par la technologie LIGA	25
Figure 1.5. Dispositif de détection et de commande de l'activation des coussins gonflables, basé sur la technologie MEMS.	26
Figure 1.6. Visualisation de l'échelle d'un MEMS Image The Auto Channel	27
Figure 1.7. Les domaines d'application des MEMS	30
Figure 1.8. Les quatre secteurs des MEMS.....	31
Figure 1.9. Exemple d'un capteur gyroscopique Contenu dans la puce MPU-6050 au centre du circuit imprimé GY-521	32
Figure 1.10. Vidéo projecteur DLP Light Crafter TM et le contrôleur DMD numérique DLP3000 WvGA.....	32
Figure 1.11. Composants MEMS RF réalisés par XLIM (Unité Mixte de Recherche de l'Université de Limoges): commutateurs de type cantilever (à gauche) et de type pont (à droite)	33
Figure 1.12. Générateur de gradient développé au laboratoire SATIE de l'ENS Cachan.....	33
Figure 1.13. Régimes d'écoulements dans Micro-fluidique	35
Figure 1.14. Schéma du canal étudié	41
Figure 1.15. Evolution du paramètre de mélange le long du canal	42
Figure 1.16. Champ de vitesse et lignes de courant le long du micro-canal.....	43
Figure 1.17. Évolution de la longueur de mélange le long du canal en fonction de (a) la vitesse d'entrée initiale d'entrée initiale (b) vitesse d'entrée du micro-canal.....	44
Figure 2.2. Maillage d'un écoulement bidimensionnel	54
Figure 2.3. Vitesse des molécules avant et après la collision	55
Figure 2.4. La Vitesse relative de la particule 1 par rapport à la particule 2	56
Figure 2.5. Définition de la surface de collision	57
Figure 2.6. Définition du volume de collision	57
Figure 2.7. Nombre de collisions proportionnel au nombre de particules dans le volume de collision.....	58
Figure 2.8. Régimes d'écoulement d'un gaz dilué	60
Figure 2.9. Poids statistique des molécules simulées	61
Figure 3.1. Vue de côté d'un trou de micro-filtre [2].	65
Figure 3.2. Variation de la vitesse dans l'ensemble du domaine de calcul pour $\sigma=1$	67
Figure 3.3. Pourcentage de l'espèce N2 dans le mélange pour $\sigma=1.00$	68
Figure 3.4. Variation du nombre du LPM dans l'ensemble du domaine de calcul pour $\sigma=1.00$. ..	69
Figure 3.5. Température de l'écoulement le long de la paroi pour les 3 valeurs du σ	70

Figure 3.6. Profil de la vitesse dans la section x_0 au centre du canal pour différentes valeurs du σ 71

Figure 3.7. Vitesse de l'écoulement le long de la paroi pour différentes valeurs du σ 72

Liste des tableaux

Tableau 1.1. Domaines d'application des microsystèmes	30
Tableau 1.2. Différents régimes d'écoulements gazeux en fonction de nombre de Knudsen	37
Tableau 2.1. Domaines d'application des trois méthodes de calcul (MD, DSMC, CFD)	62

Nomenclature

Symboles	Unité
• t : Temps	(s)
• ρ : Masse volumique du fluide	(Kg/m ³)
• \vec{v} : Vitesse eulérienne d'une particule fluide	(m/s)
• p : Pression	(Pa)
• $\tau_{i,j}$: Tenseur des contraintes visqueuses	
• \vec{F} : Résultante des forces massiques s'exerçant dans le fluide	(kg .m. s ⁻¹)
• e : Energie totale par unité de masse	(kg. m ² . s ⁻²)
• \dot{q}_i : Flux de chaleur perdu par conduction thermique	(J. s ⁻¹)
• r : Perte de chaleur volumique due au rayonnement	
• Re : Nombre de Reynolds	
• U_{in} : Vitesse de l'écoulement en	(m/s)
• ν : Viscosité cinématique en	(m ² /s)
• D_h : Diamètre hydraulique du canal	(μ m)
• Kn : Le nombre de Knudsen	
• λ : Le libre parcours moyen	
• L_c : Longueur caractéristique du dispositif	(μ m)
• n : Densité numérique	
• u : Diamètre effectif de la molécule	(μ m)
• \vec{C}_r : Vitesse relative	(m/s)
• d : Diamètre des molécules de gaz	(μ m)
• ε : Fraction volumique	
• L : Echelle de longueur d'écoulement	(μ m)
• ζ : Paramètre de mélange	
• ρ : Densité du monoxyde de carbone	(g .m ⁻³)
• \vec{CA} et \vec{CB} : Les vitesses des molécules avant le collision	(m/s)
• \vec{C}_A^* et \vec{C}_B^* : Les vitesses post-collision	(m/s)
• \vec{Cm} : Vitesse du centre de masse	(m/s)
• C_r : Vitesse relative des particules	(m/s)
• ν : Fréquence de collision	

- σ : Coefficient d'accommodation
- Ma : Le nombre de Mach
- He : Hélium
- CO : Monoxyde de Carbone
- H₂ : Hydrogène
- Ar : Argon
- N₂ : Azote

Abréviations

- MD : Dynamique Moléculaire.
- DSMC : Simulation Directe par la méthode de Monte Carlo.
- CFD : Dynamique Des Fluides Computationnelle.
- MEMS : Micro-Electro-Mechanical Systems
- RF : Radio Fréquence
- RGD : Dynamique des Gaz Raréfiés
- VHS : Variable Hard Sphère
- VSS : Variable Soft Sphère
- IPL : Loi de Puissance Inverse
- LOC : Lab On Chip

Introduction Générale

Introduction Générale

Dans le monde de la recherche et après les progressions technologiques ces dernières années, l'ensemble des chercheurs constatent que l'industrie microscopique (puce, mini échangeur...etc.) est très bénéfique pour l'économie en terme de rendement, de rapidité et de frais. Raison pour laquelle, plusieurs disciplines et industries sont apparues telles que la technologie des Micro-Electro-Mechanical Systems (MEMS) ainsi que le domaine de la micro-fluidique. La micro-fluidique est la manipulation des petits volumes à l'échelle micrométrique (10^{-6} m) [1]. C'est un domaine de recherche en pleine expansion depuis des années, dont la vitalité est nourrie par la diversité de ses applications. C'est une science qui étudie le transport des fluides de l'échelle de quelques microns à quelques centaines de microns [2]. Les systèmes micro-fluidiques sont des dispositifs qui comportent un ensemble de composants miniaturisés autorisant l'étude et l'analyse d'échantillons chimiques ou biologiques. Ce sont de véritables « micro-processeurs » pour la biologie. Ils permettent de remplacer des instruments encombrants et très coûteux. Ce processus représente pour la biologie et la chimie une révolution semblable à celle apportée par les microprocesseurs à l'électronique et l'informatique. La micro-fluidique porte sur les écoulements de fluides simples ou complexes mono ou multiphasiques qui sont véhiculés dans des microsystèmes [2], ce qui conduit en général à faire une modélisation qui prend en considération des effets généralement négligés dans les écoulements classiques [1, 2].

Ce mémoire se compose de quatre chapitres :

Le premier chapitre est un chapitre de recherche bibliographique dans lequel nous présenterons la définition de la micro-fluidique, les débuts de son utilisation dans les industries, les applications de la micro-fluidique, les écoulements dans les micro-canaux ainsi que les avantages et les inconvénients de la fabrication des systèmes micro-électro-mécaniques.

Dans le deuxième chapitre qui se divise en deux volets : Dans la première partie, nous présenterons la méthode de Monte Carlo, son histoire et ses applications, et dans la deuxième partie, nous discuterons la simulation directe par la méthode de Monte Carlo : Son principe et ses techniques ainsi que ses étapes de base (phase d'installation, de déplacement, d'indexions et la phase de collision).

Dans le troisième chapitre, nous modéliserons l'écoulement de deux gaz Azote (N_2) et de monoxyde de carbone (CO) dans un micro-canal. L'écoulement de deux gaz est supposé normal avec des conditions constantes de pression et de température à l'entrée et à la sortie du micro-canal. De plus, nous réaliserons une étude théorique en appliquant les équations de Navier-Stokes

Introduction Générale

présentées dans le chapitre 2). Ensuite, nous présenterons une étude numérique en utilisant le code DS2V réalisé par Bird (2005).

Nous finaliserons ce rapport par une conclusion et les perspectives de ce travail de recherche.

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

1.1. Introduction

La micro-fluidique, ou l'art de traiter des petits volumes à l'échelle micrométrique, peut être considérée comme la science disciplinant le transport des fluides de l'échelle de quelques microns à quelques centaines de microns (voir Figure 1.1) [3].

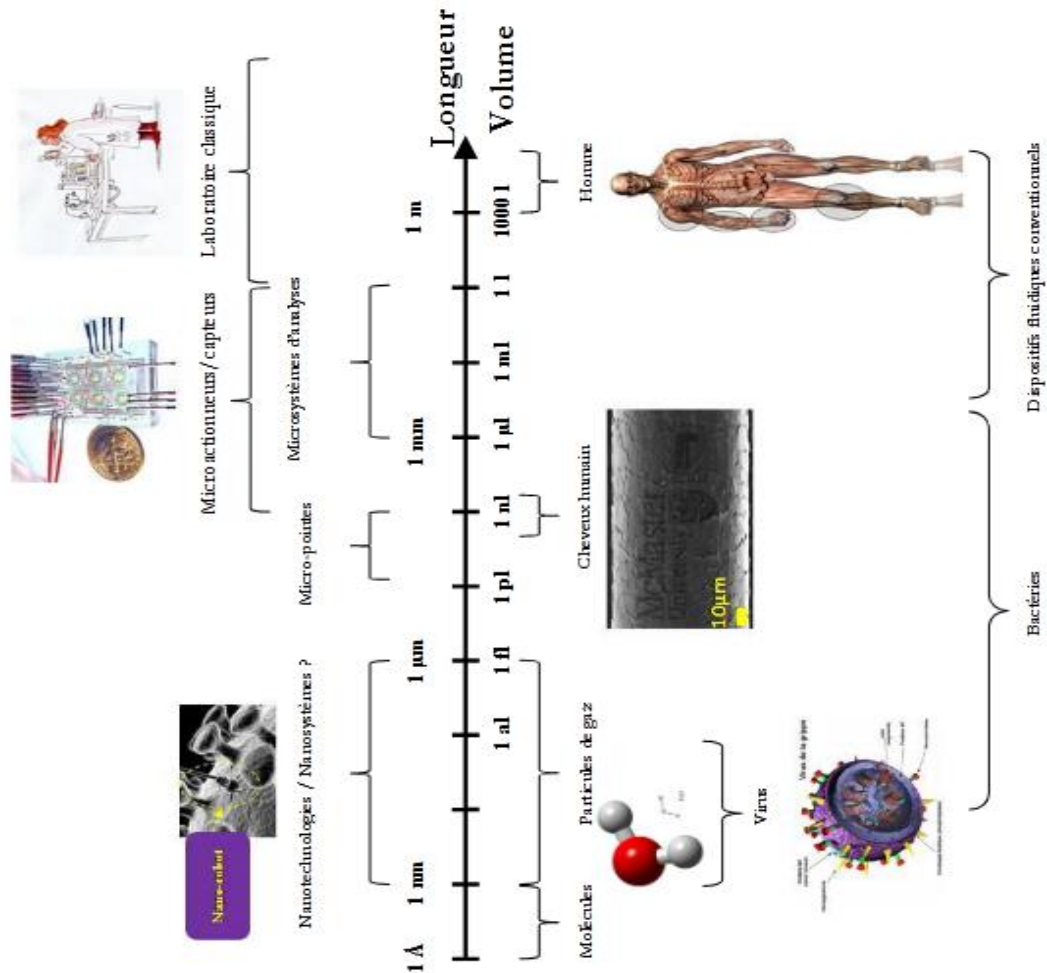


Figure 1.1. Dimensions caractéristiques des dispositifs micro-fluidiques (Nguyen and Wereley, 2002 [3]).

Cette définition exprime difficilement la variété des thèmes d'études couverts par ce cadre qui vont de la chimie analytique aux têtes d'imprimantes à jet d'encre. Dans ce cas de miniaturisation, de réduction de volume, de sécurisation et d'augmentation de la vitesse d'échantillonnage, la micro-fluidique s'avère progressivement importante pour l'implémentation de la majorité des protocoles de bio-analyses. Aux cours des dix dernières années, l'amélioration des techniques de micro-fabrication a aboutit à l'élaboration de microsystèmes fluidiques intégrés dans lesquels la mise en circulation du liquide représente un rôle essentiel.

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

Avant de présenter les dispositifs les plus significatifs, il nous semble important de prendre les théorèmes fondamentaux de la micro-fluidique et les principales techniques pour l'application technologique de ce genre de microsystèmes [3].

La micro-fluidique est la science et la technologie des systèmes qui traitent des fluides à l'échelle micrométrique, et dont au moins l'une des dimensions spécifiques est de l'ordre du micromètre. À petite échelle, le rapport surface sur volume est particulièrement élevé, par ailleurs les écoulements sont généralement laminaires, ce qui aide notamment les conditions de formation des gouttes. Les techniques de génération des gouttes dépendent d'un contrôle d'équilibre des forces s'exerçant sur l'interface, essentiellement par le biais de la géométrie et des caractéristiques d'écoulement [4].

La grande variété de champs d'investigation offerte par la micro-fluidique, représente un atout majeur pour son développement. Elle rentre dans plusieurs applications et domaines différents : En biologie (études des cellules), chimie (médicament) et dans l'industrie (cosmétique et matériaux). Une approche de la micro-fluidique largement utilisée par exemple l'élaboration des laboratoires sur puce, comme les testes de grossesses, de glycémie et d'ADN [4].

Il existe plusieurs avantages des techniques micro-fluidiques tels que la réduction des volumes permettant d'accélérer les réactions chimiques et les phénomènes de diffusions. Ces techniques sont des méthodes reproductibles et contrôlées, qui autorisent d'avoir des gouttes mono disperses et des morphologies variées par exemple des émulsions multiples ou des encapsulations [4].

1.2. Développement de composants micro-fluidiques

Le développement du micro-fluidique est né de la technologie des MEMS, qui a été définie comme un système microscopique s'intégrant dans des composants électroniques et mécaniques. Son objectif est de miniaturiser les dispositifs macroscopiques conventionnels pour mesurer des quantités physiques en dispositifs microscopiques. En raison des fortes promotions du capital de la part du gouvernement et de l'industrie, le développement de la technologie MEMS a été rapide, ce qui a rendu les composants de détection petits et inexpérants. Un exemple typique de MEMS est l'accéléromètre, qui est actuellement intégré dans chaque téléphone portable pour détecter la gravité afin d'identifier l'orientation du téléphone portable.

Parallèlement à ce concept, l'équipement macroscopique conventionnel de traitement en

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

laboratoire humide pourrait être miniaturisé en dispositifs microscopiques. Ces dispositifs microscopiques ont été conçus pour manipuler des fluides et ont donc été appelés dispositifs micro-fluidiques. Au début, la plupart des développements se concentraient sur la miniaturisation des composants fluidiques tels que les pompes [5-7], les mélangeurs [8-10] et les vannes [11, 12]. Ces composants individuels constituaient les éléments fondamentaux des systèmes fluidiques. L'objectif du développement était de démontrer la capacité de manipulation fluide, mais pas pour des applications biomédicales spécifiques. Par exemple, une micro-pompe bidirectionnelle à base de silicium a été signalée et son dessin schématisé est illustré dans la Figure 1.2 [6].

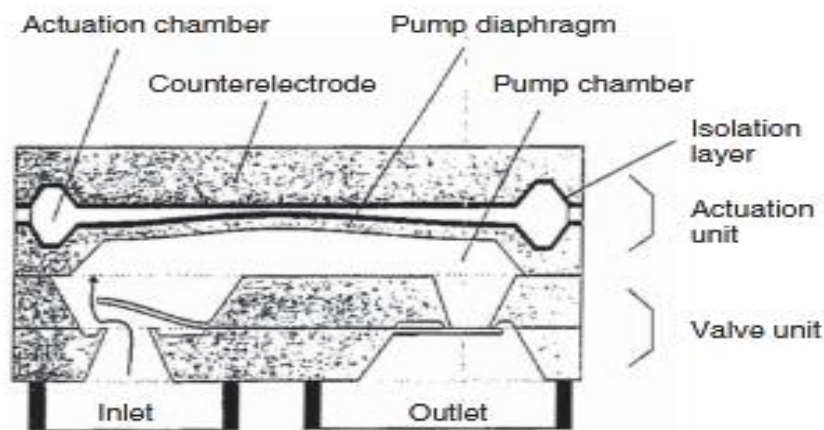


Figure 1.2. Pompe à base de silicium à commande électrique [6].

La micro-pompe a été actionnée par un diaphragme électrostatique et deux clapets anti-retour passifs. Elle a été construite par des substrats multi cristallins et fabriquée par la technologie de micro-usinage en vrac. La vitesse maximale de la pompe pouvait être de $850 \mu\text{l min}^{-1}$ et la contre-pression était de 31000 Pa. Alternativement, le mélange micro-fluidique dans un flux continu a été démontré par des vibrations ultrasonores [9].

L'illustration de la conception du micro-mixeur est illustrée sur la Figure 1.3. Il a été construit avec un substrat en verre et un substrat en silicium. Le substrat en verre a été gravé et lié anodiquement avec le substrat en silicium pour former le canal d'écoulement. Le substrat en silicium a été détecté à l'arrière pour former le diaphragme oscillant. Un piézoélectrique a ensuite été fixé au diaphragme oscillant. Des écoulements laminaires ont été mélangés continuellement et efficacement par la vibration ultrasonore du diaphragme.

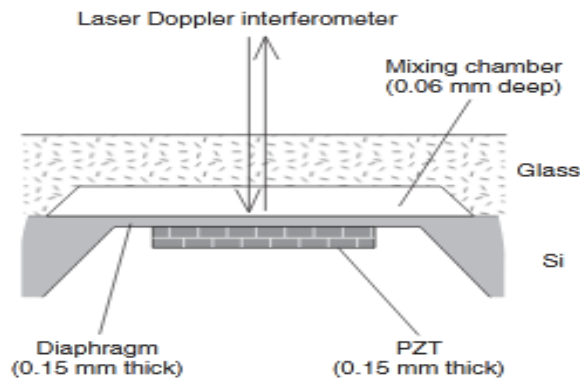


Figure 1.3. Dessin schématique de la section transversale du micro-mixeur [6].

Les exemples ci-dessus ont montré l'accent mis sur le développement précoce de la technologie micro-fluidique dans les années 1990. La manipulation et la manipulation fluidiques dans le micro-environnement étaient la question-clé à résoudre à ce moment-là. En raison de matériaux de substrat limités, c'est-à-dire en silicium et en verre, les composants micro-fluidiques ont été principalement fabriqués par la technologie de micro-usinage vrac. Cependant, le substrat en silicium est relativement coûteux et n'est pas optiquement transparent. Il peut limiter les applications de l'utilisation de la détection optique, en particulier pour les analyses biomédicales et chimiques.

1.3. Micro-fluidique et applications

Les imprimantes à jet d'encre ont été parmi les premières applications réussies de la recherche en micro-fluidique. Les modèles grand public récents offrent maintenant une haute qualité photo. Ils sont capables de fournir des micro-gouttes calibrées avec précision : 2 pL en volume et moins de 15 μm de diamètre, et de les éjecter à haute fréquence (plusieurs dizaines de kHz) d'une matrice avec plus de 3 000 buses. Un grand nombre d'autres applications sont maintenant en voie de modifier notre vie quotidienne [13].

Dans le domaine médical, les micro-pompes performantes sont capables de délivrer régulièrement et précisément de petites quantités de médicaments par injection sous-cutanée, comme l'insuline pour les soins du diabète [14]. Dans un avenir proche, ces micro-pompes devraient être intégrées dans des micro-systèmes autonomes implantés à l'intérieur du corps humain. On s'attend à ce que les micro-systèmes complexes soient largement utilisés pour la fabrication d'organes artificiels, tels que le pancréas. D'autres micro-systèmes seront utiles pour

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

améliorer la détection, le diagnostic et la compréhension de certaines maladies, par exemple en prélevant des échantillons et en les analysant dans des parties du corps difficiles d'accès.

Dans le domaine des biotechnologies, beaucoup de progrès ont été réalisés avec le développement de laboratoires sur puces. Ce sont de véritables micro-laboratoires, capables de :

- mesurer un taux de cholestérol,
- de manipuler une cellule unique,
- d'analyser une biopsie
- ou de reconnaître une séquence d'ADN [15].

Outre les domaines médical, paramédical et biologique, presque tous les domaines économiques concernent aujourd'hui la micro-fluidique : Les transports (notamment aéronautiques et spatiaux, mais aussi l'industrie automobile), l'environnement, le génie chimique et des procédés...etc. Un grand nombre d'applications existantes ou potentielles sont décrites dans les chapitres suivants.

L'un des enjeux de ces différentes applications consiste à déplacer le fluide, en contrôlant précisément son débit, car les volumes à manipuler, passent de quelques nL à quelques pL. Il nécessite une bonne connaissance du comportement physique des fluides à micro-échelle, afin de développer efficacement des outils de modélisation pour une conception et une utilisation optimales des micro-systèmes fluidiques. D'autre part, les technologies qui ont été validées à l'échelle conventionnelle s'avèrent souvent inadaptées à la micro-échelle. Il est alors nécessaire de concevoir de nouveaux composants avec des modes de fonctionnement d'origine. Un nouveau champ d'investigation fertile est en cours d'apparition; sa seule limite semble être notre imagination.

1.4. MEMS et micro-fluidique

La miniaturisation et le MEMS ont donné naissance à la micro-fluidique dans les années 1990 et constituent encore aujourd'hui une grande partie de cette jeune discipline. Les MEMS sont des systèmes électromécaniques dont la taille totale varie entre 1 et 300 micromètres. Bien que ces nombres soient des limites approximatives (il existe en fait des MEMS de taille de sous-micromètres et des MEMS de plus de 300 micromètres), la majorité des dispositifs MEMS fabriqués aujourd'hui ont des dimensions typiques de cet ordre. Un exemple célèbre d'un MEMS est représenté dans la Figure 1.4. Ce MEMS est un micro-engrenage dont la taille est de l'ordre d'une centaine de micromètres. Il est tenu par une fourmi réelle qui semble remettre en question

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

l'utilité d'un tel objet. Cette photo, prise par un groupe de recherche allemand, est assez frappante car elle représente l'intrusion d'une machine artificielle dans le monde micro-métrique. L'entrée dans les échelles micrométriques n'est cependant clairement pas une nouveauté. Depuis l'invention du microscope optique [16].



Figure 1.4. Fourmi tenant un micro-engrenage en nickel fabriqué par la technologie LIGA [16].

Cette fourmi a été métallisée et placée dans le vide afin d'être photographiée par microscopie électronique. Cette image a été fournie par le groupe de Karlsruhe (Allemagne).

Au 16^e siècle, le monde micrométrique a été examiné en détail. Le microscope a permis de faire de nombreuses découvertes scientifiques, y compris les découvertes de protozoaires, de mouvements browniens et de chromosomes, pour ne citer que quelques exemples. Cependant, il est beaucoup plus difficile d'agir réellement à une échelle micrométrique, ce qui est précisément ce que la technologie MEMS nous permet de faire. Il n'est donc pas exagéré d'imaginer que la technologie MEMS conduira à de nombreuses découvertes techniques et scientifiques. Quelques exemples incluent la preuve de la nature quantique des phonons [17], la mesure de la cinétique chimique en phase fluide [18] et la caractérisation du phénomène de glissement dans les gaz [19]. Ce sont autant de découvertes et d'inventions techniques qui avaient été rendues possibles par MEMS. Dans certains cas, ces avancées sont devenues de grands succès industriels tels que l'utilisation de MEMS dans l'activation des coussins gonflables (voir Figure 1.5).

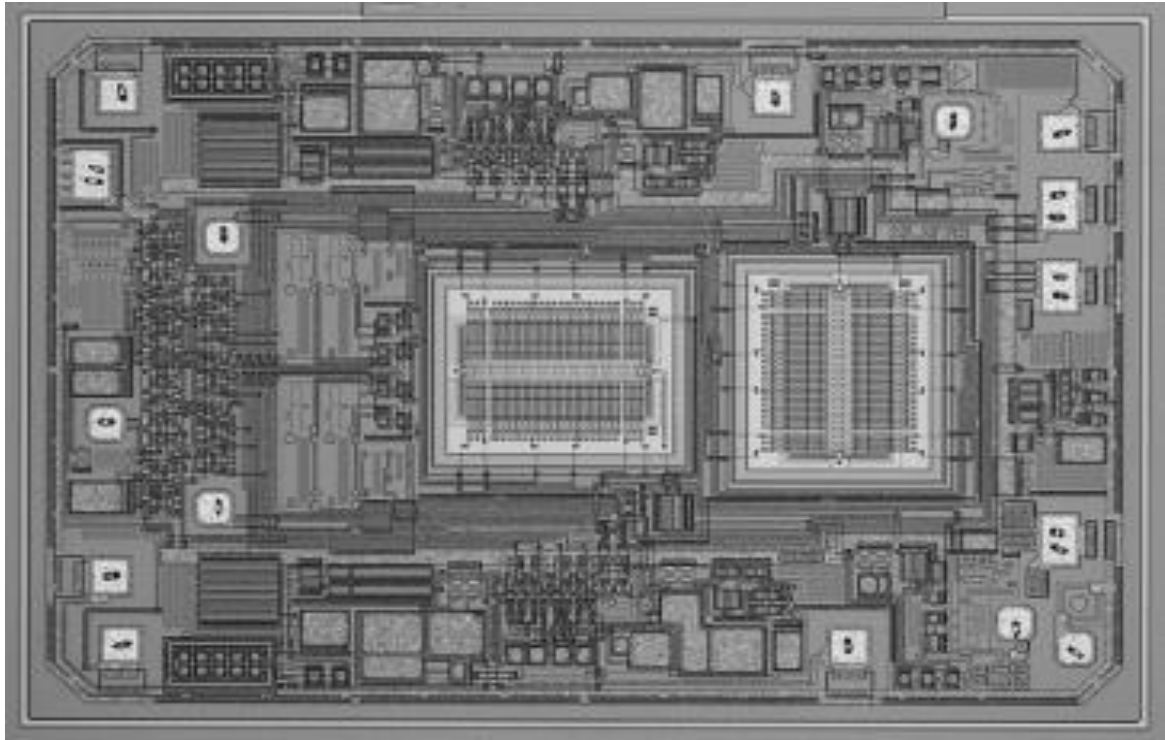


Figure 1.5. Dispositif de détection et de commande de l'activation des coussins gonflables, basé sur la technologie MEMS [16].

1.5. MEMS (Micro Système Electromécanique)

1.5.1. Définition

Micro Electro Mechanical Systems (MEMS) sont des dispositifs miniaturisés réunissant plusieurs principes physiques. Ils intègrent généralement des éléments mécaniques connectés à de l'électronique et sont réalisés par des procédés de fabrication issus de la micro-électronique. Les MEMS exploitent, entre autres, des effets liés à l'électromagnétisme, la thermique et la fluidique. Ils sont dans notre quotidien, au cœur de la téléphonie, du médical, de l'automobile, des manettes de consoles de jeux ou des chaînes de production [20].

Leur taille est de l'ordre du millimètre carré (Figure 1.6) : Les éléments de leurs structures (mécaniques) sont à l'échelle du micron, à titre de comparaison, le diamètre moyen d'un cheveu est $75\ \mu\text{m}$ et un globule rouge à une taille de $7\ \mu\text{m}$. Utilisé comme capteur, un MEMS compte une partie mobile sensible à la variation d'une grandeur physique (pression, vitesse, direction ...). Cette variation est alors représentée en une grandeur électrique, analysée ensuite par la partie électronique du MEMS. Parfois, il possède un micro-actionneur intégré qui, à partir d'un signe électrique, va agir sur la partie mécanique [20].



Figure 1.6. Visualisation de l'échelle d'un MEMS [20].

1.5.2. Historique De MEMS

Les étapes clés des MEMS (Micro-Système-Electromécanique) :

-1750 : Premier moteur électrostatique (Franklin, Gordon).

-1824 : La découverte du Silicium (Berzelius).

-1939 : Première jonction (Schottky) 1947 : Le premier transistor en Ge (Shockley).

-1949 : Le Silicium mono-cristallin.

-1954 : La découverte de la forte piézorésistivité du Silicium et du Germanium conduit au développement des jauges de forces de forte sensibilité basée sur le pont de Wheatstone. « Smith C.S. « Piezoresistive effect in Germanium and Silicon » Physical Review, 94.1 (1954) ».

-1955 : Commercialisation de ces jauges.

-En 1959, lors d'une présentation durant le meeting annuel de la société américaine de physique, Richard Feynman (1918-1988) a dit : « There 's Plenty of Room at the Bottom ».

-1960 : La démonstration du premier capteur de pression en Si (Kulite).

-1967 : La découverte du micro usinage en surface (H. Nathanson).

- En 1969, Westinghouse crée le premier « FET à grille résonante ». Curiosité mécanique basée sur des nouvelles techniques de fabrication. Le premier dispositif microsysteme était une structure MOS à grille résonante en or.

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

- En 1970 apparaissent les premiers accéléromètres sur silicium micro-usiné en volume (Kulite).
- 1974 : Le mot « nanotechnologie » est inventé.
- 1976 : Première imprimante à jets d'encre.
- 1977 : Premier capteur de pression capacitif (Stanford), IBM-HP : Tête d'impression micro-usinée.
- 1980 : Premières expériences en silicium poly-cristallin micro-usiné en surface (réalisation des premiers micros-miroirs).
- 1981 : Le microscope à effet tunnel est inventé.
- 1982 : Premier capteur de tension sanguine (Honeywell/Foxboro).
- 1984 : Premiers microsystèmes en poly-silicium.
- 1986 : Microscope à force atomique est inventé.
- 1988 : Premier micro-moteur électrostatique (Muller, UC-Berkeley).
- 1990 : Premier chromatographe liquide et concept de μ TAS, Manz et al. (1990).
- 1990 -1998 : Premiers systèmes élémentaires en micro-fluidique (micro mixeurs, microréacteurs, système de séparation...).
- 1998-2004 : Apparition de la « soft lithographie technologie ».
- 2022 : La limite physique de la technologie Silicium.

Donc, un nouveau concept est né : MEMS (Micro Electro Mechanical Systems) aux États-Unis, Micromachines au Japon et MST (Microsystèmes Technologies) en Europe [21].

1.5.3. Applications des MEMS

Les dispositifs MEMS ont déjà trouvé des applications significatives dans de nombreux secteurs. Ils sont utilisés pour contrôler les micro-manipulateurs, les micro-équipements de manutention, les micro-grippers et les micro-robots. De nombreux périphériques MEMS se trouvent dans l'horloge, la tête d'imprimante à jet d'encre, les systèmes de projection et d'affichage couleur et les équipements de sonde de numérisation. La technologie MEMS conçoit

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

également de nombreux types de capteurs, notamment des capteurs de pression, de température, de produits chimiques et de vibrations. Les réflecteurs de lumière à base de MEMS, le séparateur de faisceau, les commutateurs RF et optiques sont courants. En gros, les secteurs d'application sont les suivants :

- Industries aéronautiques.
- Environnement.
- Automobile.
- Les jeux.
- Communications.
- Industrie chimique, clinique et pharmaceutique et médicale.
- Sciences de la santé (stimulateurs cardiaques).
- Automatisation de l'industrie et des secteurs manufacturiers.
- Informatique (périphériques de stockage de données, affichage).
- Tête d'impression des applications de défense et spatiales.
- Produits de consommation.
- Fluidique.

1.5.4. Domaine d'applications des micro-systèmes

On trouve plusieurs applications couvertes par les dispositifs micro-systèmes telles que :

1. Micro-actionneurs.
2. Bio-MEMS.
3. MEMS RF.
4. MEMS Optiques.
5. Micro-fluidique.
6. MEMS acoustiques.
7. Micro-TAS (chimiques).
8. MEMS Magnétiques.

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

9. Lab On Chip.

Les différents domaines d'application des MEMS (Figure 1.7) :

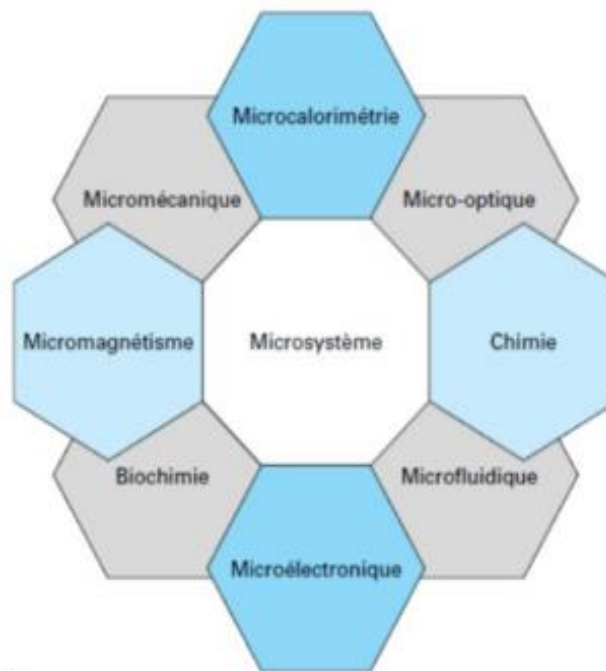


Figure 1.7. Les domaines d'application des MEMS [21].

Les microsystèmes sont présents dans de nombreux domaines et outils que nous utilisons dans notre vie de tous les jours. Le tableau qui suit permet de donner des exemples non exhaustifs de quelques domaines d'applications :

Tableau 1.1. Domaines d'application des micro-systèmes [21].

Domaines d'application	Applications
Médical	Administration de substances. Accéléromètre pour pacemakers, Monitoring (capteur de gaz du sang etc...). Analyse biologiques. Chirurgie à invasion minimale.
Aéronautique et Défense	Instrumentation : Gyromètre, altimètre etc ... Systèmes de guidage, missiles et munitions.
Electro/ Domotique	Sécurité intrusion, fuite de gaz, capteur d'ambiance etc...

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

Instrumentation	Mesures de grandeurs physiques : Ph, humidité, maintenance préventive.
Automobile	Airbag, détection crevaison, système anticollision, pression d'injection, anti patinage, suspensions actives, climatisation, antivols, etc...
Environnement	Capteurs physico-chimiques, contrôle des eaux etc...
Équipement multimédia	Cartouches jets d'encre, mobiles, stabilisation de caméscope etc...

Les avancées autour de la micro-technologie de réalisation des MEMS ont engendré une explosion des applications et une segmentation du domaine. On trouve quatre familles associées à leurs cadres applicatifs (Figure 1.8).

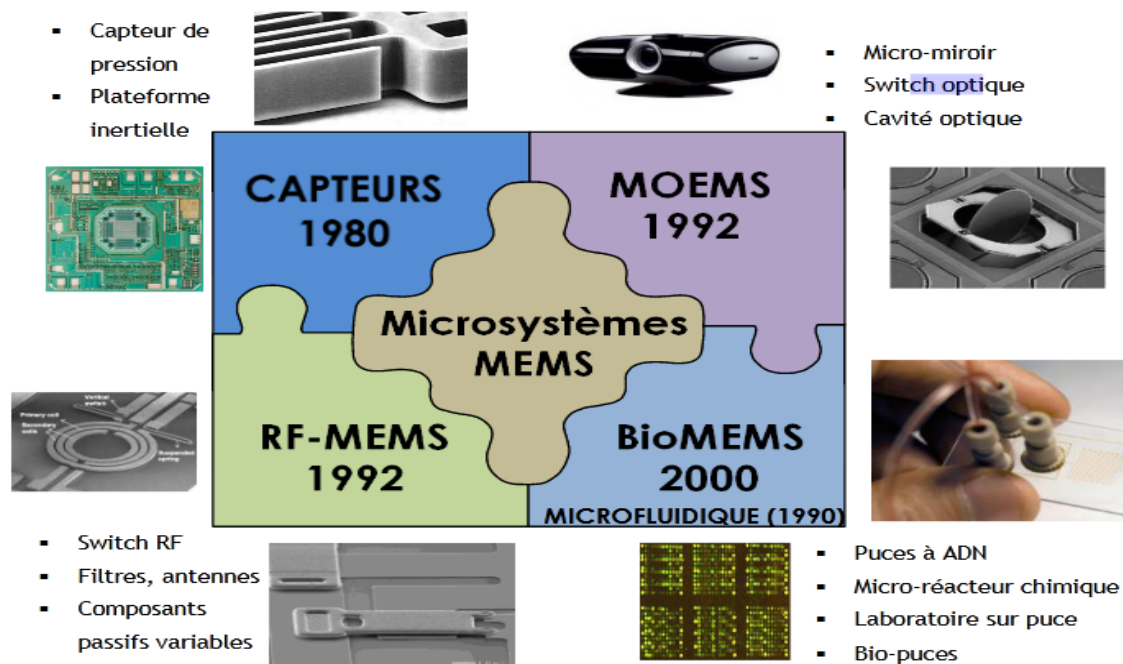


Figure 1.8. Les quatre secteurs des MEMS [20].

1.5.4.1. Les captures MEMS

Les captures MEMS connectent directement une déformation mécanique avec une variation électrique. Par exemple, on trouve des capteurs de pression de type résistif, pour la surveillance de pneumatiques ou encore des chauffe-eaux, des capteurs d'accélération de type

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

capacitif dans les airbags, la téléphonie portable, ou les manettes de consoles de jeux (voir ressource « Les MEMS : Réalisation de capteurs résonnants »)

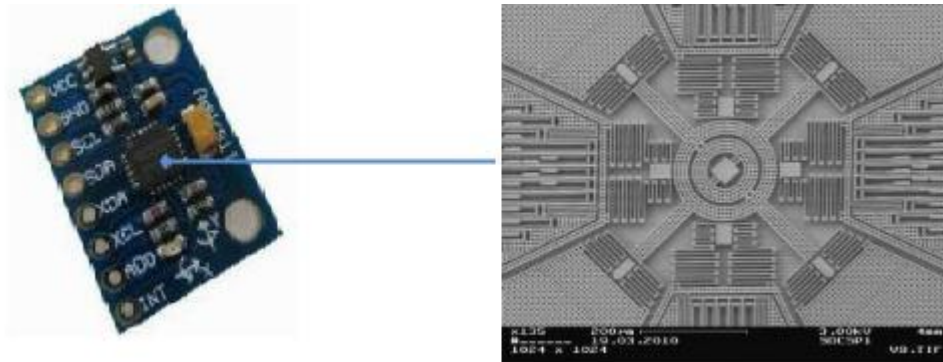


Figure 1.9. Exemple d'un capteur gyroscopique contenu dans la puce MPU-6050 au centre du circuit imprimé GY-521 [20].

1.5.4.2. Les MEMS optiques

Micro-Opto-Electro-Mechanical Systems permettent le traitement d'information lumineuse ou électromagnétique. Les MOEMS sont désormais omniprésents dans les vidéo-projecteurs où des millions de miroirs (de quelques microns chacun) qui définissent chaque pixel de l'image (technologie DLP : Digital Light Processor ou encore DMD : Digital Micro mirror Device).

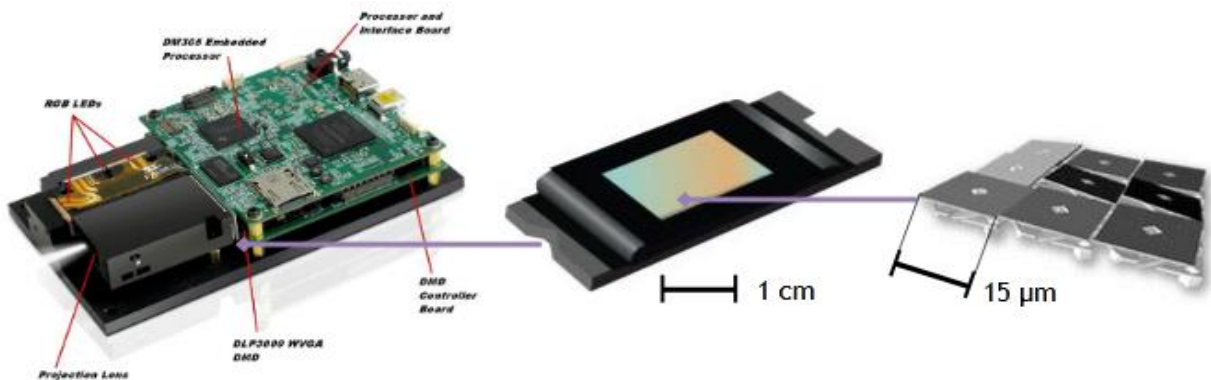


Figure 1.10. Vidéo-projecteur DLP Light Crafter TM et le contrôleur DMD numérique DLP3000 WvGA [20].

1.5.4.3. Les MEMS RF

Ils retrouvent leurs applications dans toute la chaîne d'émission-réception d'un signal informatif. Les systèmes de communication sans fils utilisent des technologies MEMS RF et des dispositifs micro-ondes avec une capacité importante à consommation faible pour des performances RF sur une bande vaste.

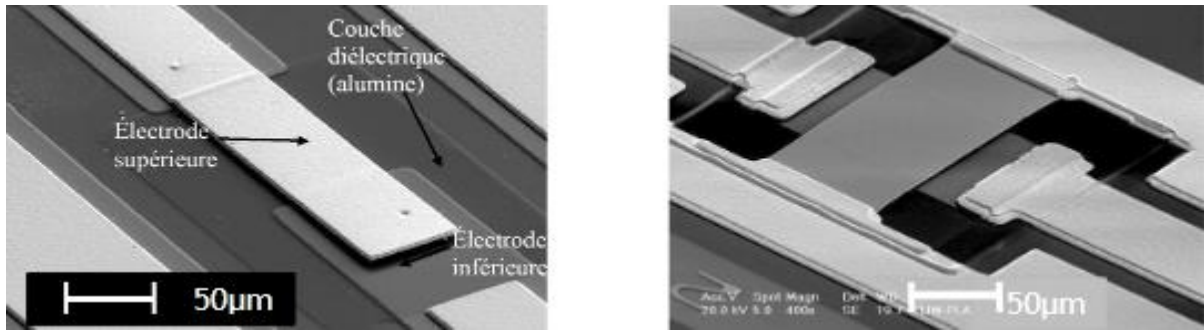


Figure 1.11. Composants MEMS RF réalisés par XLIM (Unité Mixte de Recherche de l'Université de Limoges): commutateurs de type cantilever (à gauche) et de type pont (à droite) [20].

1.5.4.4. Les bio-MEMS

Associés au laboratoire sur puce (LOC : Lab On Chip), les bio-MEMS sont des applications permettant d'interagir avec le vivant que ce soit à l'échelle des protéines (quelques nanomètres), à l'échelle cellulaire (quelques dizaines de microns) ou encore à l'échelle d'un tissu (quelques millimètres). Les bio-MEMS réunissent des réseaux de micro-canaux où sont gérés les écoulements micro-fluidiques. Ils visent l'intégration de toutes les étapes d'un protocole biologique sur un système miniaturisé de la taille typique d'une carte de paiement. On les trouve sous l'application bio-puce [20].

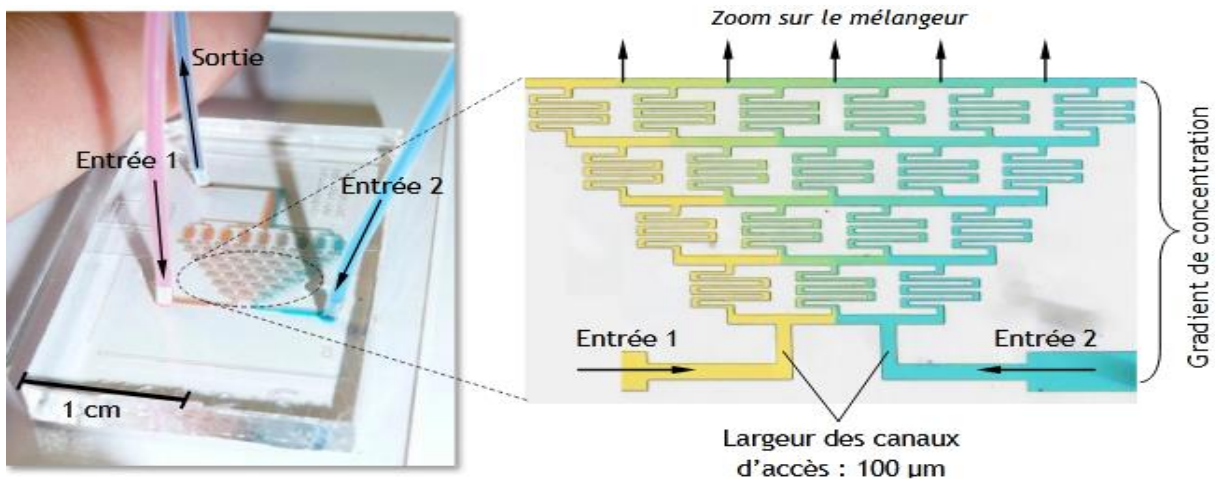


Figure 1.12. Générateur de gradient développé au laboratoire SATIE de l'ENS Cachan [20].

1.6. Écoulement micro-fluidique

A l'échelle micrométrique, les lois d'écoulement micro-fluidiques restent celles de la fluidique classique et peuvent être étudiées avec l'équation de Navier-Stokes dans le cas de liquide incompressible dont les termes inertiels peuvent être ici négligés.

Le régime d'écoulement est majoritairement laminaire [22], représenté par le nombre de Reynolds

$$Re = \frac{U_{in} D_h}{\nu} \quad (1.1)$$

où :

Re : Nombre de Reynolds.

U_{in} : Vitesse de l'écoulement en m/s.

ν : Viscosité cinématique en m²/s.

D_h : Diamètre hydraulique du canal est définie par :

$$D = \frac{4A}{P} \quad (1.2)$$

où A est la surface traversée par le fluide et p est le périmètre mouillé.

Le passage d'un régime d'écoulement à un autre est assez imprécis, mais on adaptera les limites suivantes :

- Régime laminaire : $Re \leq 2000$.
- Régime transitoire : $Re = 2000$.
- Régime turbulent $Re \geq 2000$ (Voir figure 1.13).

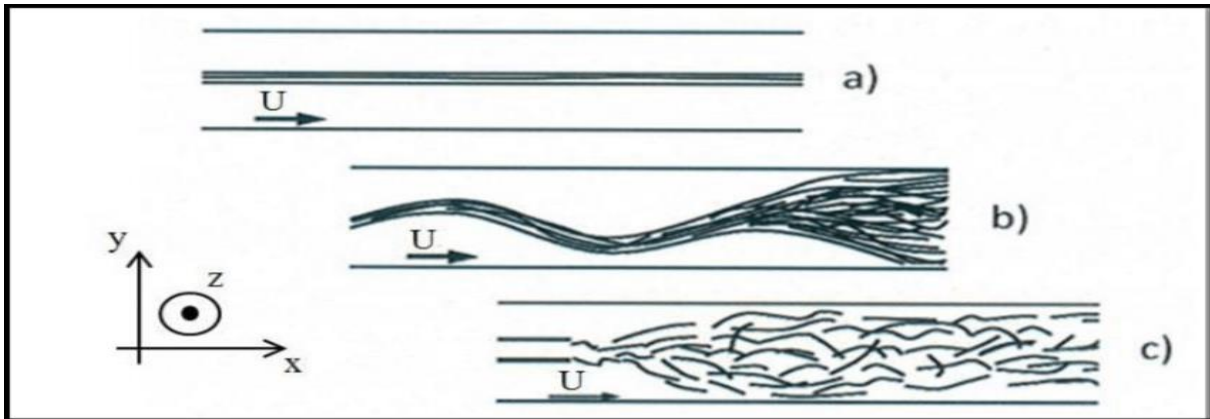


Figure 1.13. Régimes d'écoulements dans Micro-fluidique [22].

1.7. Equations de Navier-Stokes

En mécanique des fluides, les équations de Navier-Stokes sont des équations aux dérivées partielles non-linéaires qui décrivent le mouvement des fluides dans l'approximation des milieux continus. Il existe plusieurs façons pour écrire les équations de Navier-Stokes. Il est à noter que ces formes dépendent aussi des notations utilisées. Ainsi, il existe plusieurs manières équivalentes d'exprimer les opérateurs différentiels.

Ces équations sont celles de la conservation de masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie [23].

Equation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \bar{\nabla}(\rho \vec{v}) = 0. \quad (1.3)$$

Equation de bilan de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial(\rho v_i)}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho v_i v_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \tau_{i,j}}{\partial x_i} + \rho f_i. \quad (1.4)$$

Equation de bilan de l'énergie :

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} [(\rho e + p)v_i] = \sum_{i=1}^3 \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (\tau_{i,j} v_j) + \sum_{i=1}^3 \rho f_i v_i - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial x_i} + r \quad (1.5)$$

où :

t : Temps

ρ : Masse volumique du fluide.

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

\vec{v} : Vitesse eulérienne d'une particule fluide.

p : Pression.

$\tau_{i,j}$: Tenseur des contraintes visqueuses.

\vec{F} : Résultante des forces massiques s'exerçant dans le fluide.

e : Energie totale par unité de masse.

\dot{q}_i : Flux de chaleur perdu par conduction thermique.

r : Perte de chaleur volumique due au rayonnement.

1.8. Nombres adimensionnels en micro-fluidique gazeuse

Les nombres de Mach et de Reynolds sont les deux nombres adimensionnels les plus employés pour classifier les écoulements gazeux. Le niveau de raréfaction quant à lui est caractérisé par le rapport du libre parcours moyen à une longueur caractéristique de l'écoulement. Introduit en 1909 par Knudsen, ce rapport est actuellement connu sous le nom du nombre de Knudsen [1]

$$Kn = \frac{\lambda}{L_c} \quad (1.6)$$

Où λ est le libre parcours moyen (la distance moyenne parcourue par une molécule entre deux collisions intermoléculaires dans un référentiel local lié au mouvement macroscopique) et L_c est une longueur caractéristique du dispositif.

Les différents régimes d'écoulements classifiés par ce nombre adimensionnel sont cités dans le Tableau 1.2. Les modèles basés sur l'approche continue, employant généralement les équations de conservation de Navier-Stokes et l'équation de Fourier, sont efficaces jusqu'à des nombres de Knudsen de l'ordre de 0,1 et l'approche cinétique, employant par exemple l'équation de Boltzmann, est nécessaire pour des valeurs supérieures à 10. Par contre, les valeurs limites des différents domaines doivent être interprétées comme des ordres de grandeur car la transition d'un régime à un autre (par exemple d'un régime de glissement à un régime de transition) n'est pas brutale mais progressive [2]. Ainsi le traitement théorique à la limite des régimes de glissement et de transition peut se faire par une approche continue ou par une approche cinétique.

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

Tableau 1.2. Différents régimes d'écoulements gazeux en fonction de nombre de Knudsen [2].

$K_n = 10$	$K_n = 0.1$	$K_n = 0.01$	$K_n = 0$	
Régime moléculaire libre	Régime de transition	Régime de glissement	Régime de continu	
			Visqueux	Non-Visqueux
Equation de Boltzman sans collisions	Equation de Boltzman	Navier-Stokes +CL de glissement	Navier-Stokes	Euler

1.9. Mélange des flux de gaz dans un micro canal

Les phénomènes de flux de gaz à micro-échelle sont très différents de leurs homologues dans des situations à méso et à grande échelle et posent des défis uniques dans leur étude. Malheureusement, les techniques traditionnelles de CFD (computationnel-fluide dynamique) du continuum sont souvent invalides pour analyser les flux dans les micro-canaux. Cette imprécision provient du calcul des effets de transport moléculaire tels que la dissipation visqueuse et la conduction thermique. Les approximations pour l'analyse des flux continus échouent pour les écoulements à micro-échelle, car la longueur caractéristique des gradients d'écoulement (L_c) se rapproche de la distance moyenne parcourue par les molécules entre les collisions (libre parcours moyen λ).

Le rapport de ces quantités est connu sous le nom de Nombre de Knudsen ($Kn = \lambda / L_c$) et est utilisé pour indiquer le degré de raréfaction de l'écoulement. Les équations de Navier-Stokes ignorent les effets de raréfaction ou de micro-échelle et ne sont donc strictement précises qu'à un Kn d'une taille de disparition. Différentes méthodes (Barron et coll., 1997; Oran et coll., 1998) peuvent être utilisés pour modéliser les flux pour différents régimes pour les flux de gaz raréfiés.

La méthode de Monte Carlo par simulation directe (DSMC) est une alternative bien établie (Bird, 1994) à la technique CFD traditionnelle qui conserve sa validité à un nombre de Knudsen élevé car aucune hypothèse de continuum n'est invoquée dans la DSMC. Dans une méthode DSMC conventionnelle, chaque particule simulée représente un très grand nombre de molécules physiques. De cette façon, le nombre de trajectoires moléculaires et de collisions moléculaires qui doivent être calculées est considérablement réduit, tandis que les vitesses physiques, la taille

moléculaire et les énergies internes sont préservées dans la simulation [24].

1.10. Analyse numérique du mélange de deux gaz dans un micro-canal

1.10.1. Introduction

Le processus de mélange de deux composants peut intervenir dans diverses applications. Par exemple, il est utilisé en biologie pour identifier les protéines dans un échantillon inconnu : Les protéines sont fragmentées en les mélangeant avec des enzymes [16]. En ingénierie médicale, les micro-mélangeurs sont utilisés avec d'autres dispositifs ou puces de systèmes micro-électromécaniques (MEMS) pour préparer des échantillons en vue d'une analyse ou pour transférer des médicaments (transfert de substances médicinales telles que l'insuline). Dans les dispositifs MEMS utilisés pour la production d'énergie, le mélange de gaz est un processus fondamental pour la conception des dispositifs de propulsion car il détermine l'efficacité de l'ensemble du système [26,27].

Pour toutes ces raisons, les micro-mélangeurs sont des composants essentiels des micro-systèmes fluidiques, et ont un intérêt croissant de la recherche est l'analyse des processus de mélange et d'identification des principaux facteurs susceptibles d'améliorer l'efficacité du mélange [16, 26, 27, 28]. Les micro-mélangeurs existants sont basés sur différents principes et peuvent être classés en deux grandes catégories : Actifs et passifs. Chacune de ces catégories est basée sur des principes de fonctionnement différents et possède sa propre capacité et sa propre vitesse de mélange. Pour le mélange de deux gaz dans des micro-canaux, l'hypothèse du continuum n'est pas valable car le libre parcours moyen (la distance moyenne parcourue par une molécule en mouvement entre deux impacts successifs) n'est pas suffisamment petit par rapport à la longueur caractéristique du dispositif microscopique [16,29]. Par conséquent, ces écoulements sont généralement analysés avec des méthodes basées sur la théorie cinétique des gaz comme, par exemple, la méthode de l'arbre à cames ou la théorie cinétique des gaz comme, par exemple, la méthode DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) [25].

Dans le présent travail, nous considérons le mélange de deux gaz, l'azote (N_2) et le monoxyde de carbone (CO), et nous étudions l'évolution des gaz dans la géométrie étudiée. Parmi les recherches précédentes, nous pouvons citer Yan et Farouk [5], qui ont simulé le mélange de gaz dans des micro-canaux avec la méthode DSMC. Dans la seconde référence, les deux

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

écoulements gazeux sont parallèles et séparés par une plaque séparatrice située à l'entrée du canal. Les flux des deux gaz, l'hydrogène (H_2) et l'oxygène (O_2), étaient entraînés par différence de pression entrée-sortie. Dans les travaux cités, les gaz ont été considérés comme mélangés lorsque les contours de la densité de masse moyenne deviennent symétriques par rapport à la ligne centrale du canal. Il a été démontré que la longueur du mélange des gaz augmente avec l'augmentation de la différence de pression entrée-sortie. De plus, le processus de mélange semble être sensible aux conditions limites de la paroi. En particulier, les résultats discutés ont indiqué que la longueur de mélange était plus courte dans le cas d'une réflexion entièrement diffuse que dans le cas d'une réflexion spéculaire [2, 26, 27, 28].

Wang et Li [26] ont simulé le processus de mélange du monoxyde de carbone (CO) et de l'azote (N_2) dans le même type de micro-canal [28]. Dans ce cas, les gaz ont été considérés comme mélangés lorsque les densités du mélange gazeux près des parois supérieure et inférieure deviennent égales. Il a été souligné que la vitesse d'écoulement et la température étaient les deux facteurs les plus importants affectant la performance du mélange des gaz. Le et Hassan [27] ont étudié le mélange des mêmes gaz, mais dans un micro-mélangeur en forme de T avec des conditions limites de pression entrée-sortie. Ils ont considéré le cas d'un flux entraîné par un gradient de pression. Le nombre de Knudsen est défini comme le rapport entre le libre parcours moyen et la longueur caractéristique de l'écoulement libre moyen et la longueur caractéristique du canal. Ils ont montré que l'augmentation du nombre de Knudsen, conduit à une diminution de la vitesse d'écoulement. Conduisant à la diminution de la longueur de mélange des gaz et à l'amélioration du processus de mélange.

Szalmas et ses co-auteurs [30] ont réalisé une étude numérique et expérimentale comparative détaillée de mélanges gazeux binaires, dans laquelle un gradient de pression dirige l'écoulement. Leur formulation théorique était basée sur le modèle cinétique de McCormack [31], et les résultats étaient valables pour toutes les valeurs du nombre de Knudsen. Des travaux expérimentaux ont été réalisés sur le mélange d'Argon (Ar) et d'hélium (He) dans un micro-canal de section rectangulaire. Les conditions expérimentales correspondaient à une large gamme de valeurs de chute de pression entre les réservoirs amont et aval, ainsi à une gamme de mélange de concentration allant de l'hélium pur à l'argon pur. Dans tous les cas, compte tenu des incertitudes de mesure, un très bon accord a été trouvé avec les prédictions théoriques.

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

Szalmas et Valougeorgis [32] ont étudié le même problème d'un mélange de gaz binaire dans un long cylindre. L'étude du mélange gazeux binaire a été réalisée dans un long micro-canal cylindrique avec une section transversale triangulaire ou trapézoïdale, où l'écoulement est entraîné par des gradients de pression et de concentration. Les équations cinétiques de McCormack ont été résolues par l'algorithme des vitesses discrètes [33]. La densité du mélange gazeux circulant dans le canal a été obtenue. L'étude a inclus l'effet de la séparation, et a été montré que la séparation des gaz peut modifier considérablement le débit massique.

L'objectif de notre étude est d'obtenir des résultats numériques qui pourraient être comparées aux résultats analytiques dans le cas d'un régime légèrement raréfié en utilisant la simulation directe par la méthode de Monte Carlo. Le même mélange est utilisé durant toutes les simulations numériques composé équitablement de deux gaz : L'azote (N_2) et le monoxyde de carbone (CO). Des études précédentes ont essayé de se focalisé sur la longueur de mélange [26, 37]. Dans le paragraphe suivant nous vous exposant un travail de modélisation et de simulation numérique utilisant la simulation directe par la méthode de Monte Carlo [37].

1.10.2. Formulation et méthode de solution [26, 37]

Dans un micro-canal de hauteur $h = 1 \mu\text{m}$ et de longueur $L = 10 \mu\text{m}$, nous considérons le mélange de deux gaz, l'azote (N_2) et le monoxyde de carbone (CO), qui ont presque la même masse moléculaire m . Les deux gaz sont séparés en amont par une plaque séparatrice épaisse de longueur $3 \mu\text{m}$ et d'épaisseur $0.1 \mu\text{m}$, située dans le plan médian du canal ; Le monoxyde de carbone s'écoule au-dessus de cette plaque (Figure 1.14). Le micro-canal est supposé suffisamment long pour assurer un mélange complet des gaz. A l'entrée du canal, les débits massiques des gaz sont égaux. L'écoulement dans le canal est entraîné par un gradient de pression entre l'entrée et la sortie. A l'entrée du canal, des conditions initiales identiques sont introduites dans le code DSMC pour les deux gaz. La densité numérique et la vitesse d'entrée sont fixées à $1,207 \times 10^{25}$ et à 300 ms^{-1} , respectivement, tandis que la pression d'entrée est de 50 kPa. Nous considérons un écoulement isotherme ($T = 300 \text{ K}$) de gaz idéaux. Aux parois du canal, la condition limite classique de réflexion diffuse [25,34] et une condition limite de vide à la sortie est appliqué [34]. L'écoulement évolue à partir de l'état initial spécifié ci-dessus, vers un état stable. Les valeurs stables des vitesses et des pressions à l'entrée et à la sortie du micro-canal sont fournies par le calcul DSMC. Il est important de distinguer, aux deux extrémités du micro-canal, les valeurs initiales de la vitesse et de la pression. Les vitesses et les pressions initiales qui seront

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

appelées "vitesses initiales d'entrée (de sortie)", et les valeurs stables produites par le code qui sont appelées "vitesses d'entrée (de sortie)" et "pressions d'entrée (de sortie)". Les premiers calculs ont été effectués pour le cas du micro-canal sans les bosses. Les résultats pour ce cas d'écoulement sont qualitativement comparables aux résultats de Wang et Li [26], mais différents quantitativement en raison de petites différences géométriques dans la longueur et l'épaisseur de la plaque séparatrice.

Afin d'améliorer l'efficacité du processus de mélange, Ils ont ajouté deux bosses sur les parois intérieure et supérieure du canal, placées symétriquement par rapport au plan de la plaque séparatrice (Figure 1.14). Les valeurs de la hauteur b et de la largeur c , sont situées à la position $x_p = 1.7 \mu\text{m}$ (c'est-à-dire à $0,3 \mu\text{m}$ de l'extrémité de la plaque). Dans toutes les simulations effectuées, la largeur c de la bosse est fixée à $0,1 \mu\text{m}$, ce qui est presque trois fois plus grand que le libre parcours moyen dans cette étude.

La vitesse thermique des gaz, égale à $(2kT/m)^{1/2}$, où k est la constante de Boltzmann et m la masse d'une molécule, la vitesse est d'environ 400 ms^{-1} et le pas de temps dans les simulations DSMC est d'environ $2 \times 10^{-11} \text{ s}$. Par conséquent, la distance parcourue par une particule d'essai au cours d'un temps est proche de $8 \times 10^{-3} \mu\text{m}$, ce qui est très faible par rapport à la taille des bosses attendues qui sont censées avoir une influence significative sur l'écoulement du gaz. Les gaz commencent à se mélanger au-delà de l'extrémité sous le vent de la plaque et sont considérés comme complètement mélangés (la condition de mélange complet est précisée dans le paragraphe suivant) sur une longueur, que nous appelons la longueur de mélange.

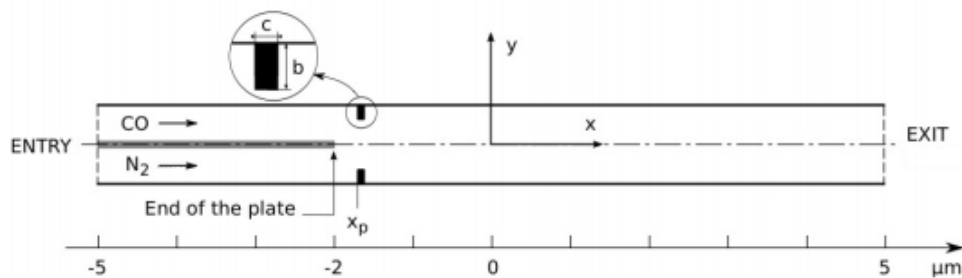


Figure 1.14. Schéma du canal étudié [37].

Nous décrivons maintenant les paramètres caractéristiques du mélange. Tout d'abord, pour une détermination quantitative de la longueur de mélange, ils ont introduit le paramètre de mélange [26, 27, 37] :

$$\zeta = 1 - \frac{\rho_{min}}{\rho_{max}}$$

où ρ_{min} et ρ_{max} désignent les densités minimale et maximale de CO, calculées dans chaque section transversale le long du canal. Ils ont considéré que les gaz sont complètement mélangés lorsque $\zeta < 2\%$. Les mêmes estimations ont été obtenues pour le cas de N₂. Ils définissent alors le point de mélange comme le premier point le long de l'axe x, où les deux gaz sont complètement mélangés. La longueur de mélange est la distance entre l'extrémité de la plaque de séparation, où le mélange commence et le point de mélange.

1.10.3. Résultats de l'étude de Wang et Li [26] et de Reyhanian et al. [37]

Dans la Figure 1.15, nous montrons les résultats de Reyhanian et al. [37] par simulation DSMC obtenus pour l'évolution axiale du paramètre de mélange dans les configurations avec et sans bosses. Un algorithme de lissage basé sur une moyenne mobile centrale a été utilisé pour réduire le bruit des ensembles de données. La plaque séparatrice se termine à $x = 2\ \mu\text{m}$. Les points de mélange sont également indiqués sur la (figure 1.15).

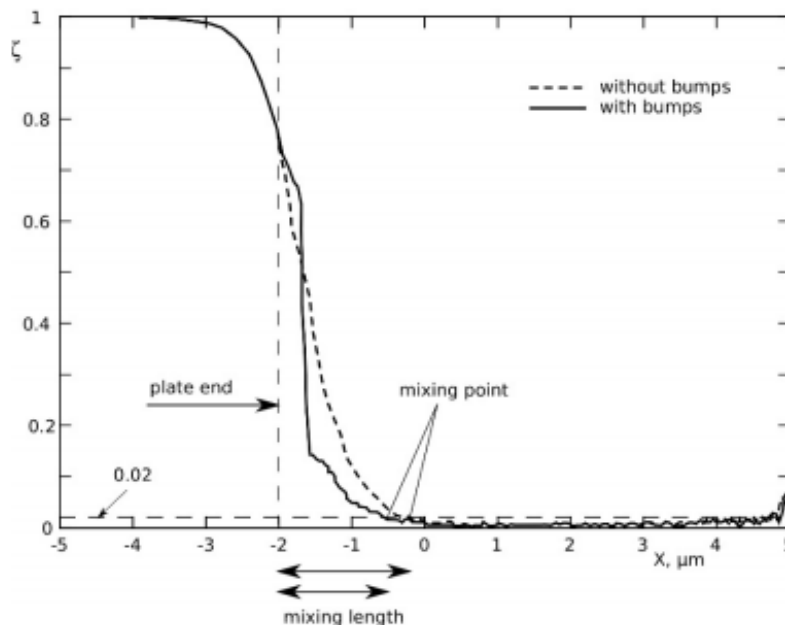


Figure 1. 15. Evolution du paramètre de mélange le long du canal [37].

Comme prévu, le paramètre de mélange varie le long du canal dans une fourchette de 0 à 1. Dans le cas des bosses, nous observons la discontinuité autour de l'emplacement de la bosse à $x_p = 1.7\ \mu\text{m}$. Nous remarquons également que les bosses causent une diminution de la longueur de mélange à environ $1,5\ \mu\text{m}$ par rapport au cas sans bosses, qui présente une longueur de mélange

Chapitre 1: Introduction à la micro-fluidique

d'environ $1,8 \mu\text{m}$. Ces résultats sont en accord qualitatif avec ceux de Wang et Li [26]. Il convient de noter qu'aucune comparaison quantitative n'a pu être faite entre les deux études en raison des différences de géométrie (Wang et Li ont considéré une plaque d'épaisseur nulle d'une longueur d'un tiers de la longueur totale de la plaque). La Figure 1.16 illustre les lignes de courant le long du micro-canal et le champ de vitesse du mélange gazeux, fourni par le code DS2V [37]. Nous observons que l'écoulement près des parois, au voisinage des bosses, est presque au repos. On peut également noter l'influence des bosses sur le champ de vitesse, clairement mise en évidence par l'augmentation locale de la vitesse entre les bosses.

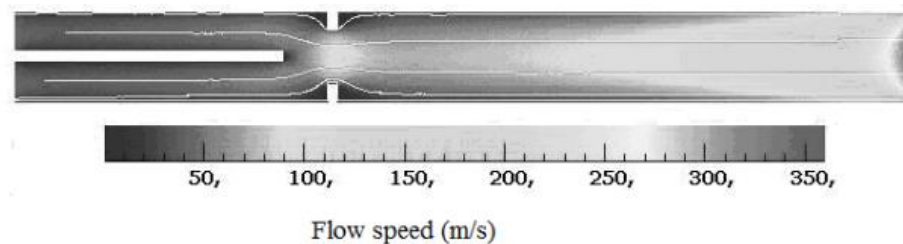


Figure 1.16. Champ de vitesse et lignes de courant le long du micro-canal [37].

1.10.3.1. Variation de la vitesse d'entrée

Pour étudier les effets des conditions limites initiales sur le processus de mélange, les vitesses initiales d'entrée des deux gaz ont été portées à 200 ms^{-1} , 300 ms^{-1} et 400 ms^{-1} ce qui correspondent, respectivement, à des vitesses d'entrée moyennes de 25 ms^{-1} , 35 ms^{-1} et 50 ms^{-1} .

Les deux gaz ont la même vitesse initiale à l'entrée du canal. La hauteur des bosses est égale à $0,3 \mu\text{m}$ et les bosses sont situées à $x_p = 1,7 \mu\text{m}$. Les résultats illustrés dans la Figure 1.17, indiquent une augmentation de la longueur du mélange avec l'augmentation de la vitesse d'entrée initiale, alors que les autres paramètres de configuration sont fixes. Ces calculs montrent que la vitesse d'entrée est l'un des facteurs les plus importants affectant le processus du mélange. La longueur du mélange est réduite de 71 % lorsque la vitesse moyenne d'entrée passe de 50 ms^{-1} à 25 ms^{-1} .

Suivant les auteurs [37], d'autres simulations numériques sont nécessaires pour confirmer si la longueur du mélange augmente lorsque la vitesse d'entrée augmente. Il convient de noter que dans ces simulations numériques, les gaz se trouvent dans le régime de transition, les nombres de Knudsen se situent entre 0,1 et 0,4, et les interactions moléculaires sont moins prépondérantes que dans le cas de la vitesse d'entrée [25]. En d'autres termes, les effets de raréfaction sont importants.

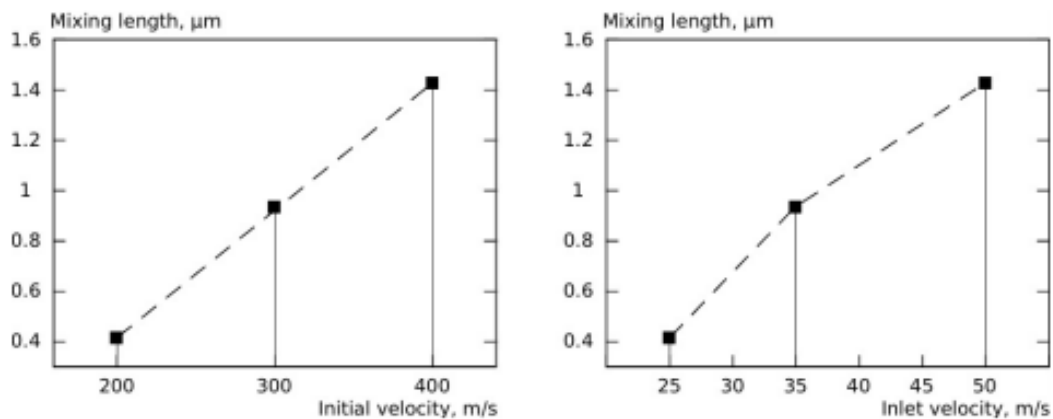


Figure 1.17. Évolution de la longueur du mélange le long du canal en fonction de (a) la vitesse d'entrée initiale (b) vitesse d'entrée du micro-canal [37].

1.11. Conclusion

Dans ce chapitre, nous a exposé et défini la microfluidique et ses applications. Par la suite, un point particulier à été réservé aux MEMS vu leur grande importance. Ces micro-systèmes sont devenus des dispositifs incontournables dans notre vie de tous les jours. Nous avons discuté aussi les deux types de microfluidique liquide et gazeuse. Dans cette dernière catégorie qui a une relation directe avec notre projet de fin d'étude, nous avons détaillé par une étude bibliographique et donné des exemples de la littérature, les techniques de modélisation analytique et numérique ainsi que l'essentiel des résultats obtenus dans ces études antérieures.

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

2.1. Méthode de Monte Carlo

2.1.1. Introduction

Monte Carlo, du nom d'un casino à Monaco, simule des événements probabilistes complexes en utilisant des événements aléatoires simples, tels que le lancer d'une paire de dés pour simuler le modèle économique du casino. Dans l'informatique de Monte Carlo, un générateur de nombres pseudo-aléatoires est appelé à plusieurs reprises qui renvoie un nombre réel dans $[0,1]$ et les résultats sont utilisés pour générer une distribution d'échantillons qui est une représentation équitable de la distribution de probabilité.

Le nom Monte Carlo a été appliqué à une classe de méthodes mathématiques utilisées pour la première fois par des scientifiques travaillant sur le développement d'armes nucléaires à Los Alamos dans les années 1940. L'essentiel de la méthode est l'invention de jeux de hasard dont le comportement et le résultat peuvent être utilisés pour étudier certains phénomènes intéressants. Bien qu'il n'y ait pas de lien essentiel avec les ordinateurs, l'efficacité du jeu numérique ou simulé en tant que poursuite scientifique sérieuse est considérablement renforcée par la disponibilité d'ordinateurs numériques modernes [2, 38]. Il est intéressant, et peut sembler remarquable à certains, que la réalisation de jeux de hasard ou d'échantillonnage aléatoire produira quelque chose de valable. En effet, certains auteurs ont affirmé que Monte Carlo ne sera jamais une méthode de choix pour d'autres estimations approximatives de quantités numériques.

2.1.2. Histoire de la méthode de Monte Carlo

La première utilisation documentée de l'échantillonnage aléatoire pour trouver la solution à une intégrale est peut-être celle du comte de Buffon [39]. En 1777, il décrit l'expérience qui suit : Une aiguille de longueur L est lancée au hasard sur un plan horizontal gouverné avec des lignes droites à une distance ($d > L$). Quelle est alors la probabilité P que l'aiguille va croiser l'une de ces lignes ? Comte de Buffon a fait l'expérience de lancer l'aiguille plusieurs fois pour déterminer P . Il a également effectué l'analyse mathématique du problème et a montré que

$$P = 2L/\pi d$$

Quelques années plus tard, Laplace [40] a suggéré que cette idée pouvait être utilisée pour évaluer un nombre mathématique à partir de l'idée des lancers de l'aiguille. Il s'agit bien d'une détermination de Monte Carlo de π . Cependant, comme dans le premier exemple de ce chapitre, le

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

taux de convergence est lent. Lord Kelvin [41, 42] semble avoir utilisé l'échantillonnage aléatoire pour aider à évaluer certaines intégrales temporelles de l'énergie cinétique qui apparaissent dans la théorie cinétique des gaz. Son échantillonnage aléatoire consistait à dessiner des morceaux de papier numérotés dans un bol. Il s'inquiétait du biais introduit par le mélange insuffisant des papiers et par l'électricité statique. Gossett (sous le nom de « Student » [43]) a utilisé un échantillonnage aléatoire similaire pour l'aider à découvrir la distribution du coefficient de corrélation.

Dans les années 1930, Enrico Fermi a fait quelques expériences numériques qui seraient maintenant appelées calculs de Carlo. En étudiant le comportement du neutron nouvellement découvert, il a effectué des expériences d'échantillonnage sur la façon dont une particule neutre pourrait interagir avec la matière condensée. Ces études ont conduit à un aperçu physique substantiel et à l'analyse théorique de la diffusion et du transport des neutrons.

Pendant la seconde Guerre mondiale, le rassemblement de personnes telles que von Neumann, Fermi, Ulam et Metropolis et les débuts des ordinateurs numériques modernes ont donné une forte impulsion à l'avancement de Monte Carlo. Dans les années 1940 et au début des années 1950, il y a eu un regain d'intérêt. Des articles sont apparus qui délaient la nouvelle méthode et comment elle pourrait être utilisée pour résoudre des problèmes en mécanique statistique, en transport des rayonnements, en modélisation économique et dans d'autres domaines [44-45]. Malheureusement, les ordinateurs de l'époque n'étaient pas vraiment suffisants pour réaliser des études pilotes dans de nombreux domaines. La croissance ultérieure de la puissance informatique a permis de réaliser des calculs de plus en plus ambitieux et d'apprendre des échecs.

En même temps, les progrès théoriques et la mise en pratique de puissantes méthodes de réduction des erreurs signifiaient que les applications avançaient beaucoup plus rapidement que la vitesse de calcul et la taille de la mémoire impliquées. Les deux développements les plus influents de ce type ont été l'amélioration des méthodes de l'équation de transport, en particulier les méthodes fiables d'«échantillonnage d'importance » [46] et l'invention de l'algorithme de Métropolités [46]. Les succès qui en ont résulté ont confirmé les attentes optimistes des pionniers des années 1940.

2.1.3. Domaines d'utilisations

Les méthodes de Monte Carlo sont particulièrement utiles pour simuler des phénomènes présentant une incertitude importante au niveau des entrées et des systèmes comportant de nombreux degrés de liberté couplés. Les domaines d'application comprennent :

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

2.1.3.1. Sciences physiques

Les méthodes de Monte Carlo sont très importantes en physique computationnelle, en chimie physique et dans les domaines appliqués connexes, et ont des applications diverses allant des calculs complexes de chromodynamique quantique à la conception de boucliers thermiques et de formes aérodynamiques, ainsi qu'à la modélisation du transport des rayonnements pour les calculs de dosimétrie des rayonnements. En physique statistique, la modélisation moléculaire de Monte Carlo est une alternative à la dynamique moléculaire computationnelle, et les méthodes de Monte Carlo sont utilisées pour calculer les théories statistiques des champs de systèmes simples de particules et de polymères [47]. Les méthodes de Monte Carlo quantiques résolvent le problème des corps multiples pour les systèmes quantiques. En science des matériaux de rayonnement, l'approximation de collision binaire pour simuler l'implantation d'ions est généralement basée sur une approche de Monte Carlo pour sélectionner le prochain atome en collision [48]. En physique expérimentale des particules, les méthodes de Monte Carlo sont utilisées pour concevoir des détecteurs, comprendre leur comportement et comparer les données expérimentales à la théorie. En astrophysique, elles sont utilisées de manière aussi diverses que pour modéliser à la fois l'évolution des galaxies [49] et la transmission du rayonnement micro-onde à travers une surface planétaire rugueuse [50]. Les méthodes de Monte Carlo sont également utilisées dans les modèles d'ensemble qui constituent la base des prévisions météorologiques modernes.

2.1.3.2. Ingénierie

Les méthodes de Monte Carlo sont largement utilisées en ingénierie pour l'analyse de sensibilité et l'analyse probabiliste quantitative dans la conception des processus. Le besoin se fait sentir en raison du comportement interactif, colinéaire et non linéaire des simulations de processus typiques. Par exemple : l'ingénierie microélectronique, la géostatistique et la géométallurgie, l'énergie éolienne, la dynamique des fluides, la robotique autonome, télécommunications, ingénierie de la fiabilité et filtres particuliers.

2.1.3.3. Finances et affaires

La simulation de Monte Carlo est couramment utilisée pour évaluer le risque et l'incertitude qui affecterait le résultat des différentes options de décision. La simulation de Monte Carlo permet à l'analyste du risque commercial d'incorporer les effets de l'incertitude dans des variables telles que le volume des ventes, les prix des matières premières et de la main-d'œuvre, les taux d'intérêt et de change, ainsi que l'effet d'événements de risque distincts tels que l'annulation d'un contrat ou la modification d'une loi fiscale.

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

Les méthodes de Monte Carlo en finance sont souvent utilisées pour évaluer les investissements dans des projets au niveau d'une unité commerciale ou d'une entreprise, ou d'autres évaluations financières. Elles peuvent être utilisées pour modéliser les calendriers de projets, où les simulations regroupent les estimations des durées les plus défavorables, les plus favorables et les plus probables pour chaque tâche afin de déterminer les résultats pour l'ensemble du projet [51]. Les méthodes de Monte Carlo sont également utilisées dans l'évaluation des options, l'analyse du risque de défaut, en outre, elles peuvent être utilisées pour estimer l'impact financier des interventions médicales [52].

2.1.3.4. Mathématique

En général, les méthodes de Monte Carlo sont utilisées en mathématiques pour résoudre divers problèmes en générant des nombres aléatoires appropriés (voir également génération de nombres aléatoires) et en observant la fraction des nombres qui obéit à une ou plusieurs propriétés. La méthode est utile pour obtenir des solutions numériques à des problèmes trop compliqués pour être résolus analytiquement. L'application la plus courante de la méthode de Monte Carlo est l'intégration de Monte Carlo.

2.1.3.5. Biologie computationnelle

Les méthodes de Monte Carlo sont utilisées dans divers domaines de la biologie computationnelle, par exemple pour l'étude de systèmes biologiques tels que les génomes, les protéines [52] ou les membranes. Les systèmes peuvent être étudiés dans des cadres à gros grains ou abinitio, selon la précision souhaitée. Les simulations par ordinateur nous permettent de surveiller l'environnement local d'une molécule particulière pour voir si une réaction chimique se produit par exemple. Dans les cas où il n'est pas possible de réaliser une expérience physique, des expériences par méthodes de Monte Carlo peuvent être menées.

2.2. La simulation directe par la méthode de Monte Carlo

2.2.1. Introduction

La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC) est une méthode de simulation basée sur les particules pour la dynamique des gaz. La méthode peut être considérée soit comme une dynamique moléculaire simplifiée (DSMC étant plusieurs ordres de grandeur plus rapide), soit comme une méthode de Monte Carlo pour résoudre l'équation de Boltzmann non linéaire

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

dépendant du temps. La méthode DSMC a été utilisée avec succès dans l'étude des écoulements de gaz raréfiés pendant plusieurs décennies, mais elle a récemment trouvé de nouvelles applications en chimie et en physique. Après avoir présenté la méthode, les nouvelles applications (études de la dynamique des micro-canaux et des surfaces, fluctuations hydrodynamiques et chimiques) et les récentes extensions (dynamique des gaz denses et des liquides-vapeurs).

La principale préoccupation de la dynamique des fluides computationnelle est le développement et l'application de méthodes numériques pour résoudre les équations aux dérivées partielles de l'hydrodynamique. Ces équations, plus particulièrement les équations de Navier Stokes et d'Euler, décrivent les fluides newtoniens, c'est-à-dire les gaz et les liquides simples, dans une large gamme de conditions. Bien que très utile, la description continue d'un fluide à ses limites. Par exemple, l'écoulement d'un gaz dilué nécessite une description en théorie cinétique. Par conséquent, diverses méthodes spécialisées pour simuler de tels écoulements ont été développées. Cette chronique présente l'une de ces méthodes, la simulation directe Monte Carlo (DSMC), développée par Bird dans les années 1960 [54].

Les écoulements sont caractérisés par une variété de quantités sans dimension. La plus utile pour notre propos est le nombre de Knudsen Kn . Cette quantité sans dimension est définie comme $Kn = \lambda / L$, où L est l'échelle de longueur caractéristique du système physique, et λ représente le libre parcours moyen moléculaire. En général, une description du continuum n'est pas précise lorsque $Kn > 1/10$.

Le libre parcours moyen d'une molécule dans un gaz dilué est donné par

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi d^2 n} \quad (2.1)$$

où n est la densité numérique et d le diamètre effectif de la molécule. Par exemple, dans l'air à la pression atmosphérique, $\lambda \approx 50$ nm (environ la longueur d'onde de la lumière visible), alors que dans la haute atmosphère raréfiée à une altitude de 120 km, le libre parcours moyen est de plusieurs mètres. Le nombre de Knudsen pour l'écoulement de l'air dans l'espace pendant le choc d'arc sur le nez de la navette spatiale est également d'ordre unitaire ($Kn \approx 1$), car la taille caractéristique du nez est de plusieurs mètres [55].

Un critère plus général qui indique la rupture de la description du continuum est l'apparition d'effets de pression anisotropes. Pour quantifier ce critère, nous définissons un nombre de

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

Knudsen local. Des études approfondies réalisées par Boyd [58], Chen [58], et Candler [58], indiquent que le critère approprié pour l'échec de la description du continuum est $Kn > 0,05$. Pour les cas tels que ceux évoqués ci-dessus, la description du continuum basée sur les équations aux dérivées partielles est inadéquate et une approche basée sur les particules est nécessaire. Pour les physiciens, l'algorithme à base de particules le plus connu est la dynamique moléculaire. Dans la dynamique moléculaire, la trajectoire de chaque particule dans le fluide est calculée à partir des équations de Newton, compte tenu d'un potentiel inter particulaire déterminé empiriquement. Bien que la dynamique moléculaire soit une technique utile en mécanique statistique, son application est limitée aux écoulements hydrodynamiques simples en raison de son énorme surcharge de calcul. Les simulations de dynamique moléculaire d'un gaz dilué sont extrêmement longues, même lorsqu'elles sont exécutées sur les ordinateurs les plus puissants. Pour simuler un millimètre cube d'air, il faudrait 10^{16} molécules et de l'ordre de 10^{23} opérations en virgule flottante pour faire évoluer le système pendant un temps libre moyen de 10^{-10} s. Ce calcul prendrait environ 10^2 ans, même sur une machine téraflopique [56].

Heureusement, la méthode DSMC est une alternative efficace pour simuler un gaz dilué. Cette méthode peut être considérée comme une méthode de dynamique moléculaire simplifiée (la méthode DSMC est plus rapide de plusieurs ordres de grandeur). Pour résoudre l'équation de Boltzmann non linéaire la méthode de Monte Carlo dépend du temps qui décrit l'évolution d'un gaz dilué au niveau de la fonction de distribution d'une seule particule. Plutôt que de calculer exactement les collisions comme dans la dynamique moléculaire, la méthode DSMC génère des collisions de manière stochastique avec des taux de diffusion et des distributions de vitesse post-collision déterminés à partir de la théorie cinétique d'un gaz dilué. Bien que les simulations DSMC ne soient pas correctes à une échelle de longueur aussi courte que celle d'un diamètre atomique, elles sont précises à des échelles plus petites que celle d'un libre parcours moyen [58]. La méthode a été testée de manière approfondie dans des écoulements à nombre de Knudsen élevé au cours des 25 dernières années et s'est révélée en excellent accord avec les données expérimentales et les calculs de dynamique moléculaire. La méthode DSMC est également utilisée avec succès depuis plusieurs décennies dans l'étude des écoulements de gaz raréfiés et a récemment trouvé de nouvelles applications passionnantes en chimie et en physique. Malgré cette histoire, la méthode n'est pas encore très connue (comparée, par exemple, à la dynamique moléculaire), même parmi les physiciens informaticiens [57].

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

2.2.2. Définition

La méthode de simulation directe Monte Carlo (ou DSMC) est largement utilisée pour la modélisation des écoulements gazeux par le calcul du mouvement et des collisions de molécules représentatives. Le calcul au niveau moléculaire est nécessaire pour les études de la dynamique des gaz raréfiés (ou RGD) car les termes de transport dans les équations de Navier-Stokes ne sont pas valides dans ce régime d'écoulement. La caractéristique essentielle d'un écoulement "raréfié" est que le libre parcours moyen moléculaire n'est pas négligeable. À une densité suffisamment élevée, les fluctuations DSMC peuvent être physiquement réelles et la méthode va alors au-delà du modèle mathématique fourni par l'équation de Boltzmann. En outre, la méthode DSMC est employée pour l'étude des réactions chimiques pour lesquelles les collisions inverses ne peuvent être définies et le modèle de Boltzmann est inapplicable [59].

2.2.3. Principe de la simulation directe par la méthode de Monte Carlo(DSMC)

La méthode DSMC est une méthode statistique qui se compose d'expériences numériques qui simulent un nombre limité de molécules test, chaque molécule test étant représentative d'un grand nombre de molécules réelles. Au cours de chaque pas de temps, le code effectue deux étapes découplées [2] : l'une de déplacement et l'autre de collisions. Ce découplage exige que le pas de temps soit plus petit que la durée moyenne de vol des molécules. Au cours de la première étape, les molécules subissent un déplacement sans collision, les molécules qui quittent le domaine de calcul sont éliminées et les collisions avec les parois sont traitées. Pour l'interaction des molécules avec les parois, le modèle de réflexion diffuse avec accommodation parfaite est utilisé. Dans la deuxième étape, les collisions entre les molécules sont traitées de manière probabiliste (méthode NTC [11]). Le champ d'écoulement est subdivisé en plusieurs cellules dont la dimension caractéristique est inférieure ou égale au libre parcours moyen des molécules et où sont évaluées les quantités macroscopiques. Au niveau microscopique, on décrit un gaz comme un ensemble de molécules faiblement liées et quasi indépendantes en état de vol libre ou de collision. Le principe de la méthode DSMC consiste à faire une expérience numérique dans la quelle on simule un nombre limité de molécules test, chacune d'elles étant représentative d'un grand nombre de molécules réelles.

Cette méthode repose sur un découplage des phénomènes mis en jeu: déplacement, collision. Ainsi numériquement ces deux phases sont traitées séparément (scission) l'une après l'autre. Pour la phase de collision on distingue deux cas: collision molécule-molécule et collision molécule-

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

paroi. Pendant ces deux phases, les grandeurs microscopiques associées à chaque molécule simulée changent de valeurs. Par conséquent ces changements seront mis à jour au cours de chacune de ces deux phases,

Pour chaque molécule simulée, on stocke les coordonnées de sa position, les composantes de vitesse, et son énergie interne. Nous allons commencer par définir quelques termes techniques qui seront utilisés durant ce travail :

2.2.3.1. Echantillon [2]

Un échantillon, en général, est un ensemble de données provenant d'un certain nombre de variables aléatoires observées dans un phénomène quelconque. Dans la méthode de Monte Carlo, cet échantillon représente l'ensemble des molécules test qui se trouvent au niveau de chaque cellule du champ d'écoulement simulé (Figure 2.2). A chacune de ces molécules simulées, on associe un certain nombre de variables aléatoires (par exemple la position de la molécule et sa vitesse). Donc à chaque instant, l'échantillon constitue un état microscopique représentatif de l'état macroscopique, c'est-à-dire de l'état réel du gaz.

2.2.3.2. Représentativité [2]

On l'appelle aussi le facteur de pondération. La représentativité est le nombre des molécules réelles représentées par une molécule simulée.

2.2.3.3. Sondage taille de l'échantillon [2]

Au cours du calcul, dans chaque cellule, à un instant donné, on fait un sondage (on l'appelle aussi observation), et on relève les valeurs microscopiques (position, vitesse,...) des molécules test puis on évalue les grandeurs de l'état macroscopique correspondant (vitesse moyenne du gaz, densité numérique,...). La taille de l'échantillon est le nombre des sondages faits périodiquement pendant le calcul multiplié par le nombre de particules simulées pour chaque sondage. Dans un écoulement stationnaire, ces sondages correspondent à différents états microscopiques représentatif de la solution de l'état macroscopique cherchée.

Les problèmes posés seront traités différemment selon que l'écoulement est stationnaire ou instationnaire. Dans le cas d'un écoulement instationnaire on part d'un état initial représentatif de l'état initial réel ou les grandeurs microscopiques sont tirées aléatoirement à partir des fonctions de distribution qui caractérisent cet état réel, Nous nous limitons dans ce qui suit à la description des étapes et des techniques de calcul de la DSMC dans le traitement des problèmes stationnaires.

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

Dans ce genre de problèmes on part d'un état initial arbitraire. Après un certain temps de calcul, le système évolue vers un état stationnaire avec certaines fluctuations statistiques. Ensuite on effectue périodiquement des sondages dans le champ d'écoulement (voir ci-dessous). Ces sondages successifs ou bien ces observations dans le temps, correspondent tous à des états microscopiques représentatifs de la solution cherchée. On augmente ainsi la taille de l'échantillon jusqu'à l'obtention d'une solution satisfaisante. Quand on parle d'une solution satisfaisante, on aborde un point assez délicat de cette simulation à savoir la précision du calcul. En effet, la DSMC représente des expériences numériques qui simulent la réalité physique, les résultats présentent en particulier, une dispersion autour de la valeur exacte avec une certaine erreur [2].

2.2.4. Procédure de la méthode de DSMC

2.2.4.1. Phase d'initialisation

C'est la modélisation géométrique de problème, et aussi l'espace physique où a lieu de l'écoulement. Il y a un découpage en cellule dans cet espace, la frontière extérieure coïncidant avec des bords des cellules (figure 2.2). Les cellules peuvent être identiques et aussi peuvent être divisées en plusieurs sous cellules [2].

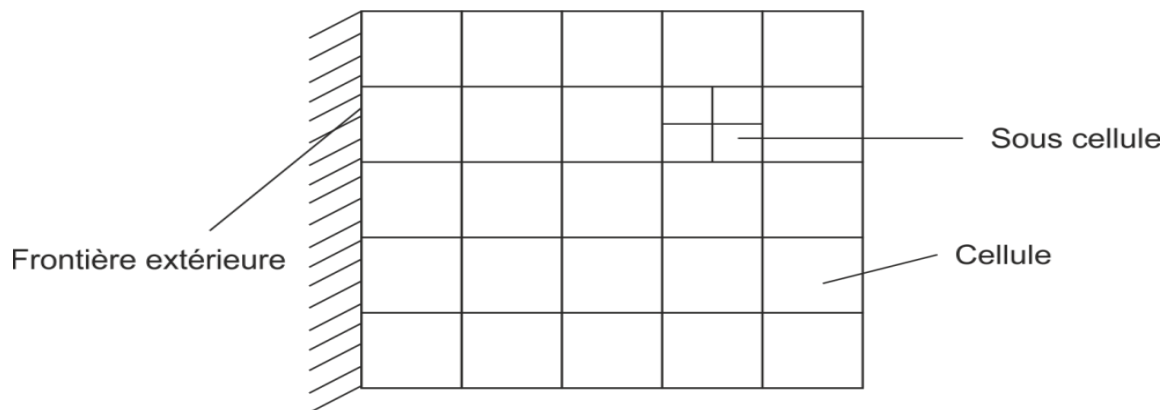


Figure 2.1. Maillage d'un écoulement bidimensionnel [2].

2.2.4.2. Phase de déplacement

Toute molécule subit un déplacement spatial par un transport libre sans aucune collision, il est dû à sa vitesse propre durant un intervalle de temps Δt donné appelé « pas de temps » [2].

La molécule peut rencontrer 4 situations :

- Collision avec les parois.
- Collision avec une autre molécule.

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

- La molécule sort du domaine de calcul : elle sera éliminée.
- La molécule change uniquement de position pendant son déplacement.

2.2.4.3. Phase d'indexation

Le mouvement des molécules peut les amener dans une autre cellule : ce changement est enregistré en adoptant une nouvelle numérotation (on change que le numéro de cellule d'accueil). L'interaction gaz-paroi engendre une modification (vitesse et énergie interne) car les particules entrent en collision avec les parois [2].

Cette étape déterminante dans l'efficacité de la simulation de Monte Carlo qui exige une maîtrise du nombre de molécules simulées.

2.2.4.4. Phase de collision

Le déroulement de la phase de collision dans une méthode DSMC fait partie du cœur de la physique modélisée [2]. C'est également dans la phase de collision que les réactions chimiques vont se dérouler. On considère deux particules notées 1 et 2 entrant en collision comme représenté sur le (figure 2.3). Elles sont supposées être sans structure, c'est à dire qu'elles ont une masse et uniquement de l'énergie translationnelle. Notons \vec{C}_A et \vec{C}_B les vitesses des molécules 1 et 2 avant la collision.

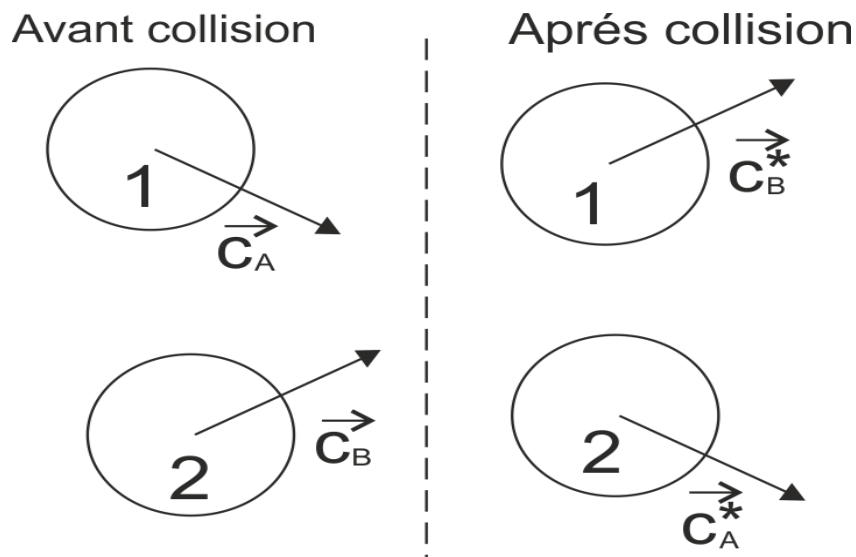


Figure 2.2. Vitesse des molécules avant et après la collision [2].

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

On cherche à calculer \vec{C}_A^* et \vec{C}_B^* les vitesses post-collision en respectant la conservation d'énergie et de la quantité de mouvement. La conservation de la quantité de mouvement conduit à :

$$m_1\vec{C}_A + m_2\vec{C}_B = m_2\vec{C}_A^* + m_2\vec{C}_B^* = (m_1 + m_2)\vec{C}_m \quad (2.2)$$

où \vec{C}_m est la vitesse du centre de masse :

$$\vec{C}_m = \frac{m_1\vec{C}_A + m_2\vec{C}_B}{m_1 + m_2} = \frac{m_1\vec{C}_A^* + m_2\vec{C}_B^*}{m_1 + m_2} \quad (2.3)$$

et la conservation de l'énergie impose :

$$m_1\vec{C}_A^2 + m_2\vec{C}_B^2 = m_1\vec{C}_A^{*2} + m_2\vec{C}_B^{*2} \quad (2.4)$$

On définit alors la vitesse relative avant et après le choc : $\vec{C}_r = \vec{C}_A - \vec{C}_B$ et $\vec{C}_r^* = \vec{C}_A^* - \vec{C}_B^*$

En pratique dans le DSMC, on se place plutôt dans le référentiel d'une particule et de sa vitesse relative par rapport aux autres particules comme représenté sur la (figure 2.4).

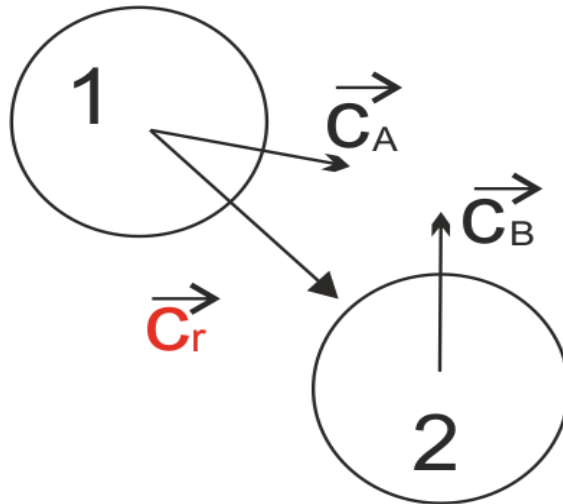


Figure 2.3. La vitesse relative de la particule 1 par rapport à la particule 2 [2].

La surface de collision, ou section efficace de collision, l'espace relatif à une molécule, dans lequel les particules sont susceptibles d'entrer en collision. Par exemple, sur la (figure 2-5), les deux particules entrent en collision dès lors que leur distance relative est inférieure ou égale à la somme

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

de leur rayons, c'est à dire lorsque elles se trouvent dans le disque d'aire $\sigma_T = \pi(r_1 + r_2)^2$. En pratique dans une simulation avec la méthode DSMC, la surface de collision est une fonction de la vitesse relative des particules $\sigma_T(C_r)$.

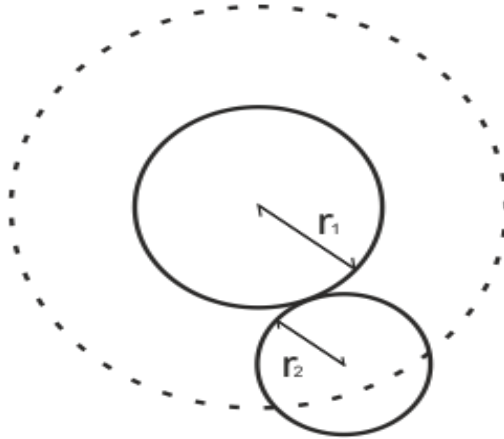


Figure 2.4. Définition de la surface de collision [2].

En se plaçant toujours dans le référentiel de la particule 1 se déplaçant à la vitesse relative \vec{C}_r par rapport à la particule 2, on peut également calculer le volume balayé par la surface de collision σ_T pendant le temps dt . La surface σ_T aura parcouru une distance égale à $C_r dt$ définissant le volume de collision correspondant $\sigma_T C_r dt$ comme représenté sur la (figure 2.6).

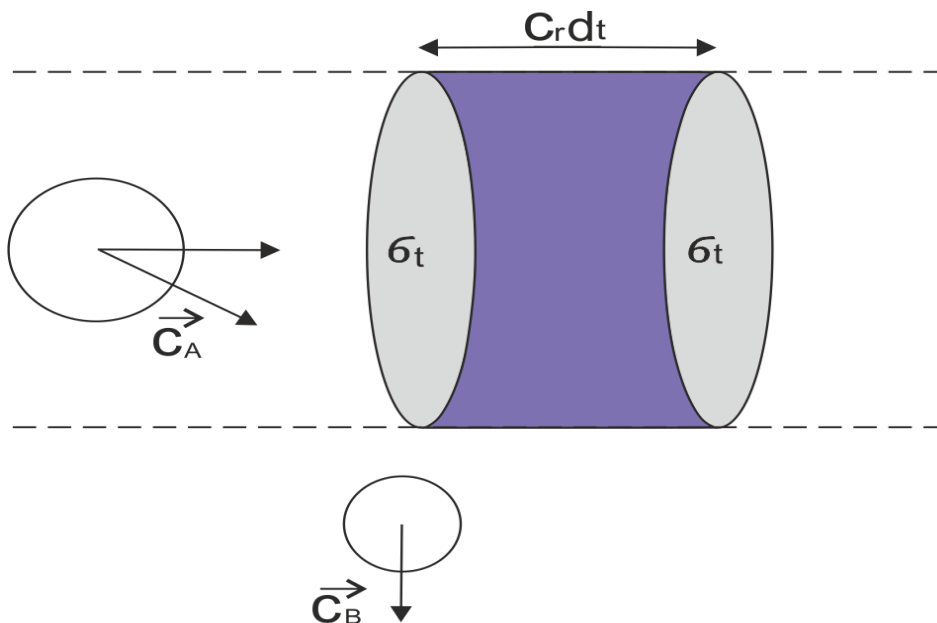


Figure 2.5. Définition du volume de collision [2].

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

Comme illustré dans la Figure 2.7, la probabilité que la molécule 1 de vitesse relative \vec{C}_r subisse une collision pendant le temps dt , est proportionnelle au nombre de particules se trouvant dans le volume de collision, et la densité de probabilité de collision par unité de temps est donnée par :

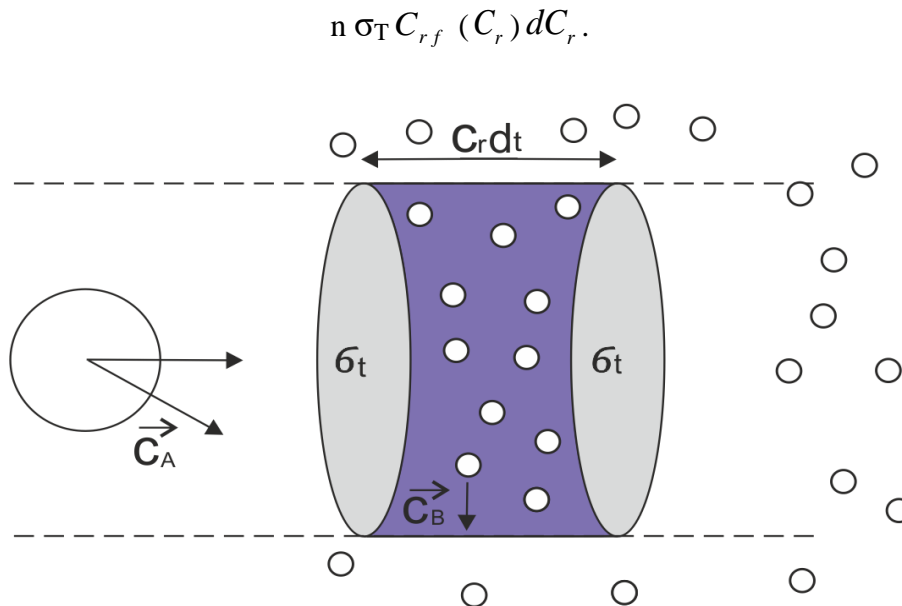


Figure 2.6. Nombre de collisions proportionnel au nombre de particules dans le volume de collision [2].

2.2.4.5. Phase d'évaluation des grandeurs macroscopiques

L'évaluation des grandeurs macroscopiques se fait au niveau de chaque cellule.

2.3. Les codes de DSMC

Contrairement à CFD, il existe un nombre relativement faible d'implémentations différentes des idées fondamentales de DSMC. Parmi les codes DSMC les plus utilisés pour l'analyse d'entrée hypersonique figurent DS2V/3V, DAC, SMILE et MONACO. Ces codes varient principalement dans le traitement des méthodes de sélection de collision et de la topologie de maillage (des cellules coupées orthogonales aux cellules non structurées ajustées au corps). La plupart des codes sont parallélisés et tridimensionnels. Une petite description de tous ces codes qui analyse les flux d'entrée hypersoniques est décrite ci-dessous :

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

Le DS2V/3V continue de faire l'objet d'un développement par Bird. Le code utilise une sous-structure de cellules orthogonales pour localiser les particules dans le domaine d'écoulement. Un traitement à cellules coupées est utilisé pour la définition des éléments de surface généraux. La technique (No Time Counter) est utilisée pour les collisions. Le code n'est pas parallélisé mais s'exécute sur les ordinateurs de bureau. De nouveaux algorithmes DSMC visant à améliorer l'efficacité et la qualité de la solution ont récemment été mis en œuvre. Les codes ont été largement utilisés au centre de recherche Languissant de la NASA pour analyser les entrées de la Terre et de Mars. Dac a été développé à la NASA par Johnson Space Flight Center par Lebeau [61]. En 3D, DAC utilise un meshof de surface des éléments triangulaires intégrés dans un maillage cartésien pour le champ d'écoulement. Le code est efficacement parallélisé avec la décomposition dynamique du domaine. Dac a été largement utilisé à la NASA Languissant Recherche Center en particulier pour les analyses de flux 3D des flux d'entrée de la Terre et de Mars. SMILE a été développé en Russie pendant de nombreuses années par Ivanov et ses collègues. Le code a une interface utilisateur général, est parallélisé, et utilise à nouveau un maillage de fond de cellules orthogonales avec un traitement spécial des surfaces. Pour simuler les taux de collision, il utilise le schéma de fréquence majoran. SMILE a été utilisé pour analyser l'entrée dans la terre de plusieurs capsules ainsi que de la station spatiale Mir.

MONACO est en cours de développement depuis 1996 par Boyd et ses collègues [61]. Le code utilise des maillages non structurés et près du corps et la méthode No Time Counter. Cette approche est moins efficace que la méthode des cellules coupées théorthogonales, mais donne au code plus de généralité. Par exemple, l'utilisation d'une approche cellulaire généralisée a grandement facilité la fusion de MONACO avec la technique particule-en-cell (PIC) simulant des plasmas collisionnels, et avec la dynamique des fluides computationnelle (CFD) résolvant les équations Navier-Stokes pour simuler des flux hypersoniques constitués de régions mixtes d'écoulement raréfié et continu. MONACO est très efficacement parallélisé et a été appliqué à l'analyse d'un certain nombre de flux d'entrée de terre.

2.4. Gaz dilué

La méthode de simulation directe de Monte Carlo (DSMC) est la méthode de simulation des écoulements de gaz dilués au niveau moléculaire, c'est-à-dire sur le niveau des molécules

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

individuelles. À ce jour, DSMC est la base méthode numérique dans la théorie cinétique des gaz et dynamiques des gaz raréfiés.

DSMC est appliqué pour les simulations d'écoulements d'un gaz dilué, le gaz dilué est un gaz dont le paramètre de densité ε (fraction volumique) est petit $\varepsilon = n d^3 \ll 1$, où n est la concentration numérique du gaz et d est le diamètre des molécules de gaz [62].

2.4.1. Régimes d'écoulement d'un gaz dilué

La fréquence de collision ν d'une molécule de diamètre d est le nombre moyen de collisions de cette molécule par unité de temps (figure 2.8).

Nombre de Knudsen $Kn = \lambda / L = 1 / (n \sigma L)$, L est l'échelle de longueur d'écoulement.

Le nombre de Knudsen est une mesure de l'importance des collisions dans un flux de gaz.

$Kn \ll 1$ ($Kn < 0.01$)

$Kn \sim 1$

$Kn \gg 1$ ($Kn > 10$)

Régime continu

Flux de transition

Écoulement libre

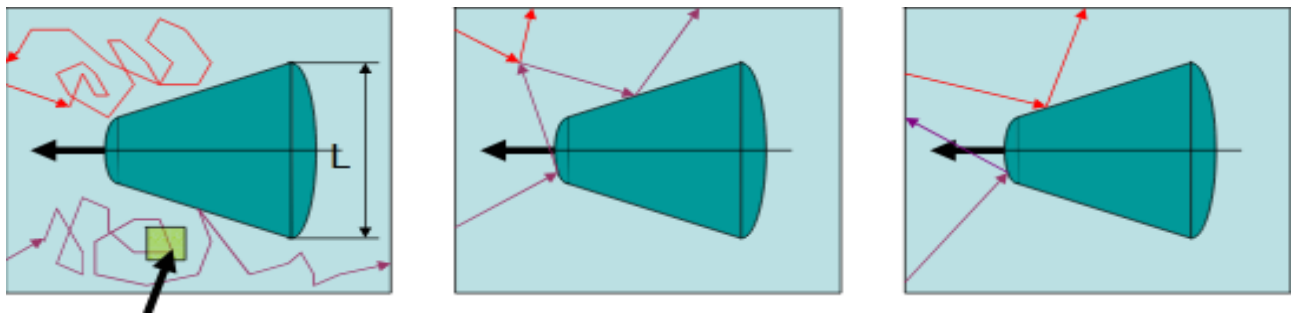


Figure 2.7. Régimes d'écoulement d'un gaz dilué [62].

2.4.2. Poids statistique des molécules simulées dans DSMC

Le nombre de collisions entre molécules est défini par la fréquence de collision $\nu = n \sigma g$.

ν : La fréquence de collision.

n : Le nombre de collisions.

σ : Vitesse de molécules de gaz.

g : La gravité.

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

Pour les mêmes vitesses de molécules de gaz, le nombre de collisions dépend de n et de σ comme illustré sur la figure 2.8) :

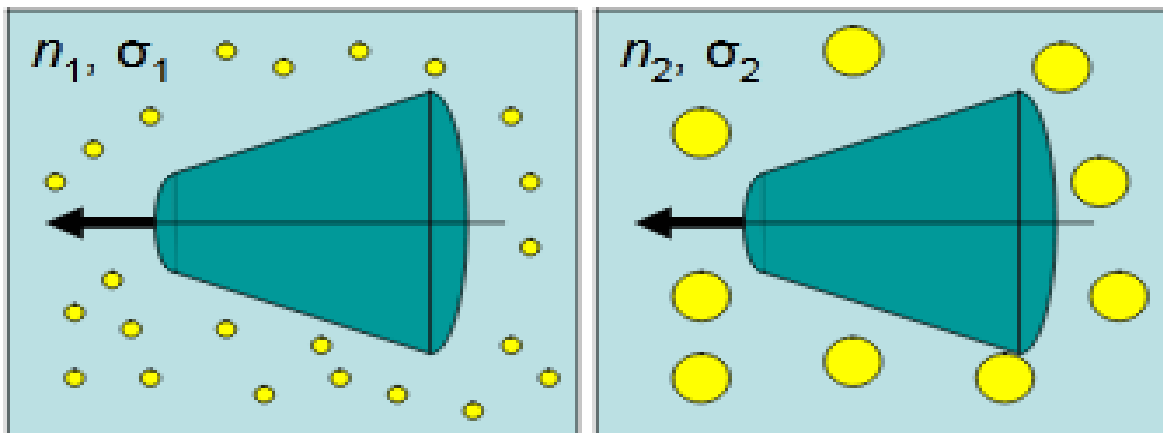


Figure 2.8. Poids statistique des molécules simulées [62].

Si $n_1 \sigma_1 = n_2 \sigma_2$, alors les fréquences de collision sont les mêmes dans les deux flux.

Si les autres conditions dans les deux flux sont les mêmes, alors ces deux flux sont équivalents l'un à l'autre. Ainsi, dans les simulations DSMC, le nombre de molécules simulées ne peut pas être égal au nombre de molécules en flux réel. Cela diffère de DSMC de MD, où chaque particule simulée représente une molécule du système réel [62].

2.5. DSMC vs MD et CFD dans les simulations des flux de gaz

Le tableau 2.1 donne les domaines d'applications des trois méthodes de calcul numérique suivantes :

- MD : Simulations par Dynamiques Moléculaires.
- DSMC : Simulation Directe par la méthode de Monte Carlo.
- CFD: Dynamique des Fluides Computationnelle.

Chapitre 2 : Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

Modèle théorique	Equations classiques du mouvement pour les particules	Équation cinétique de Boltzmann	Équations de Navier-Stokes
État du gaz	Gaz dilué, gaz dense, amas, etc.	Gaz dilué	Gaz dilué
Où appliqué	Flux de gaz denses, changements de phase, molécules complexes	Flux de déséquilibre moléculaire transitoire et libre	Flux de rééquilibrage du continuum
Échelle de longueur d'écoulement typique L	Moins de 1 micromètre	Aucune limitation, généralement, $\lambda / L > 0,01$	Aucune limitation, généralement, $\lambda / L < 0,1$
Coût de calcul relatif	Haute	Modérer	Faible

Tableau 2.1. Domaines d'application des trois méthodes de calcul (MD; DSMC; CFD) [62].

2.6. Conclusion

Nous avons exposé dans ce chapitre, la méthode de Monte Carlo (histoire et domaine d'utilisation) et la simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC) (définition, principe et procédure). Nous avons aussi cité les différents codes de calcul basés sur des calculs de simulation directe par la méthode de Monte Carlo. Cette dernière méthode de Monte Carlo est très utile pour simuler des phénomènes présentant une incertitude importante. Afin d'initier le lecteur à la terminologie du troisième chapitre qui représente le cœur de cette étude, nous avons introduit quelques notions et définitions sur laquelle est basée les simulations numériques.

Chapitre 3: Modélisation et simulation numérique du problème

3.1. Introduction

Il existe différents modèles de potentiels de collision, mais les plus utilisés dans les simulations DSMC, sont les modèles VHS (Variable Hardware Sphère) et VSS (Variable Software Sphère) [57], basés sur le modèle «Inverse Power Low (IPL)». Dans ces modèles, la section de collision ne dépend que de la vitesse relative des deux molécules entrant en collision.

En outre, ils permettent d'obtenir des modèles qui conduisent à une loi de viscosité en puissance assez réaliste et un calcul de collision assez simple [63]. Pour étudier un mélange, il est préférable d'utiliser le modèle VSS [57].

3.2. Simulation par la méthode de DSMC d'écoulement dans un micro-canal

On considère un écoulement laminaire, stationnaire et isotherme d'un mélange de deux gaz à travers un micro-canal plan (Figure 3.1). Deux chambres identiques (longueur $l = 7 \mu\text{m}$, largeur $h = 5 \mu\text{m}$) sont reliées l'une à l'autre par le micro-canal (longueur $l = 10 \mu\text{m}$, largeur $2b = 1 \mu\text{m}$). On introduit un repère orthonormé (O, x, y) , l'origine O étant au centre de la section gauche du micro-canal et l'axe (O, x) étant un axe de symétrie.

Les gaz s'écoulent d'une chambre à l'autre. Les simulations DSMC sont réalisées avec la version stationnaire du code DS2V de Bird [60]. Les gaz considérés sont l'azote et le monoxyde de carbone. Pour la pression et la température, les valeurs d'initialisation du calcul, sont notées P_{in} et T_{in} dans la partie gauche du canal ($x < -5 \mu\text{m}$) et P_{out} et T_{out} dans la partie droite ($x > 5 \mu\text{m}$). Les conditions aux limites de « pression constante » définies par Bird [16] sont introduites aux deux extrémités gauche et droite des deux chambres. Le modèle VHS (Variable Hard Sphère) est choisi pour les collisions intermoléculaires. La température T est considérée constante sur les parois.

3.2.1. Position du problème

Les deux gaz, l'azote (N_2) et le monoxyde de carbone (CO) ne sont pas introduits séparés. L'axe longitudinal du canal est noté Ox et l'axe transversal Oy (Figure 3.1), l'origine O étant placée au milieu du canal. Les deux gaz sont injectés dans le canal avec le même débit et ils traversent le micro canal sous l'effet d'un gradient de pression entre l'entrée et la sortie (Figure 3.1).

Chapitre 3: Modélisation et simulation numérique du problème

Les conditions aux limites pour les deux gaz à l'entrée sont identiques avec une pression égale à $1,3 \times 10^5$ Pa. Le problème est isotherme à la température 300 K. Le calcul évolue à partir de l'état d'initialisation ci-dessus précisé, vers un état stationnaire.

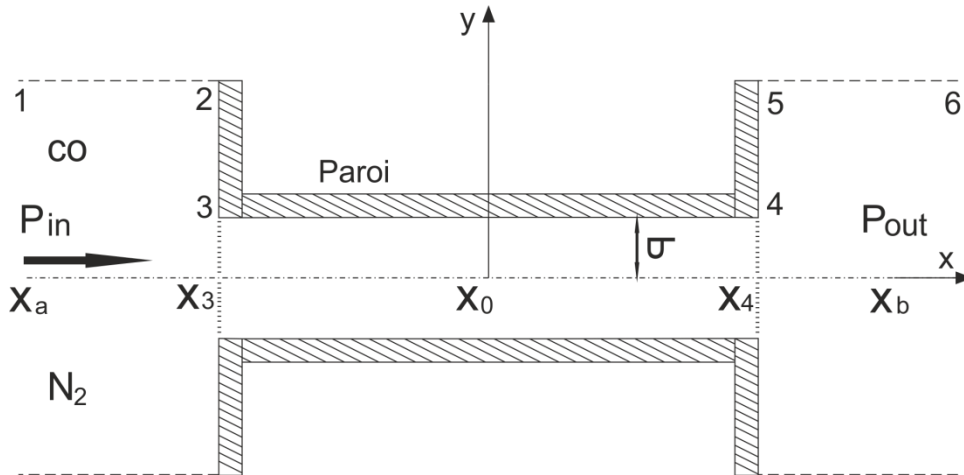


Figure 3.1. Vue de côté d'un trou de micro-filtre [2].

Comme évoqué ci-dessus l'objectif est de modéliser l'écoulement d'un mélange de gaz qui est constitué d'azote et de monoxyde de carbone à travers un micro-canal.

Les hypothèses de ce calcul sont :

- ✚ L'écoulement est isotherme ($T=\text{constant}$).
- ✚ L'écoulement est stationnaire (ne dépend pas de temps).
- ✚ L'écoulement est plan.

Avec les conditions aux limites suivantes :

- ✚ Les conditions à l'entrée et à la sortie du micro-canal sont des conditions de pression constante
- ✚ Sur la paroi solide, des conditions de réflexions variables (σ varie de 0.25 à 1).
- ✚ Sur l'axe et les frontières parallèles, des conditions de symétrie sont appliquées.

3.2.2. Nombres adimensionnels

Dans notre étude les différentes suppositions sont les suivantes :

Le régime d'écoulement est identifié sur la base des valeurs du nombre de Reynolds qui est fonction de la vitesse d'entrée du fluide et du diamètre hydraulique du canal :

$$Re = \frac{U_m \cdot 2b}{\mu} \quad (3.2)$$

Chapitre 3: Modélisation et simulation numérique du problème

On définit le nombre de Mach comme :

$$Ma = \frac{Um}{\sqrt{\gamma RT}} \quad (3.3)$$

Le nombre de Mach en fonction de vitesse, pression et le rapport de chaleur massique est :

$$Ma = \frac{Um}{\sqrt{\gamma \frac{P}{\rho}}} \quad (3.4)$$

La relation entre les trois nombres adimensionnels Re, Ma et Kn [2] :

$$\frac{Ma}{Re} = \sqrt{\frac{2}{\gamma \pi}} Kn \quad (3.5)$$

Dans le cas d'un gaz monoatomique :

$$\frac{Ma}{Re} = \sqrt{\frac{2}{\pi \rho}} \frac{1}{Kn} \quad (3.6)$$

3.2.3. Etude de maillage

Nous avons choisi un maillage pour analyser des solutions dans le micro-canal qui ont une forme unifiée afin d'étudier l'écoulement d'un mélange des gaz. Nous numérotions chaque case pour connaître la position de chaque particule (la première particule, la deuxième particule,...) pour que chaque particule ait de la vitesse, du mouvement et de l'énergie, puis on déplace toutes les particules, puis nous faisons une mise à jour de champ de particules (voir le deuxième chapitre). Donc à n'importe quel moment, après plusieurs déplacements, on passera de l'état microscopique à l'état macroscopique afin de pouvoir étudier et extraire les propriétés du gaz, de l'énergie cinétique, puis on déduit la vitesse puis la température du mélange de gaz.

3.2.4. Etude paramétrique

Les paramètres de calcul de notre problème physique sont les suivants :

- La zone du réservoir 1 : $P=P_{in}= 1,3 \cdot 10^5$ Pa et $T=300$ K.
- La longueur de micro-canal est : $L= 10$ μ m.
- La hauteur de micro-canal est : $h= 1$ μ m.
- Le mélange est homogène, contenant de 50% d'azote(N_2) et 50% de monoxyde de carbone (CO).

Chapitre 3: Modélisation et simulation numérique du problème

- Sur la paroi solide de micro-canal le coefficient d'accommodation varie entre 0.25 et 1.
- La zone du réservoir 2 : $P=P_{out}=1$ bar et $T=300K$.

3.3. Résultats et discussions

Dans cette partie, nous avons examiné la concentration des deux espèces du gaz dans la géométrie étudiée. La variation de la vitesse, du nombre de Mach ainsi que la raréfaction du mélange est discutée. De plus, nous étudions la variation du profil de Poiseuille-Hagen en fonction de la variation du coefficient d'accommodation. Finalement, la vitesse de glissement au niveau de la paroi est donnée quantitativement pour chaque cas de calcul.

3.3.1. Vitesse de l'écoulement

La Figure 3.2 montre la variation de la vitesse dans l'ensemble du domaine de calcul pour un coefficient d'accommodation égale à 1. Cette variation prend la forme d'un profil de Poiseuille-Hagen et plus en s'approche de la sortie du micro-canal plus la vitesse s'intensifie.

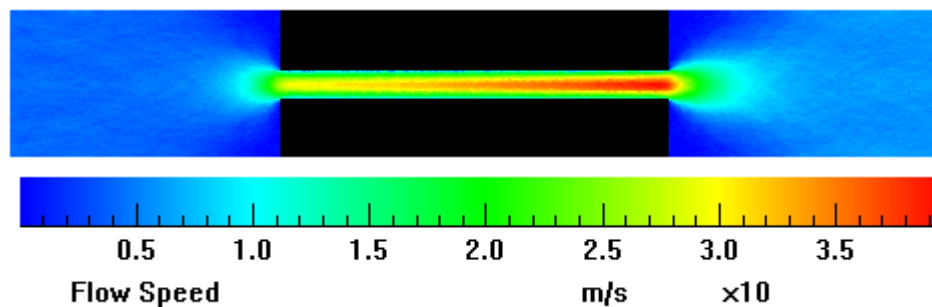


Figure 3.2. Variation de la vitesse dans l'ensemble du domaine de calcul pour $\sigma=1$.

3.3.2. Variation du nombre de Mach

Dans la même condition de coefficient d'accommodation, nous regardons la variation du nombre de Mach, on obtient la Figure 3.3 ci-dessous :

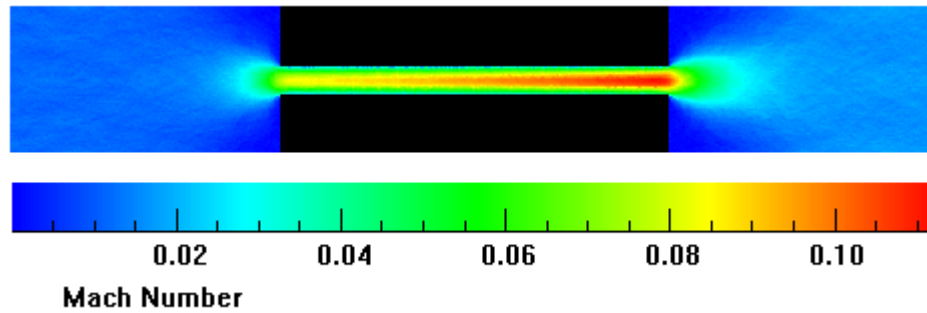


Figure 3.3. Variation du nombre de Mach dans l'ensemble du domaine de calcul pour $\sigma=1$.

Afin de voir dans quel régime se situe l'écoulement qui traverse notre micro-canal, nous présentons sur la Figure 3.3, la variation du nombre de Mach. Nous remarquons que les plus grandes valeurs du nombre de Mach sont atteintes à l'intérieur du micro-canal mais restent relativement faibles et ne dépassent pas l'unité ($\text{Mach} < 0.12$), ce qui nous laisse dire qu'on a un écoulement subsonique ne dépassant pas l'unité.

3.3.3. Concentration des deux espèces dans le mélange

Sur la Figure 3.4, nous avons présenté la composition de l'espèce 1 (N_2) dans le mélange afin de vérifier la répartition de chaque espèce dans le micro-canal et voir si on a une homogénéité du mélange.

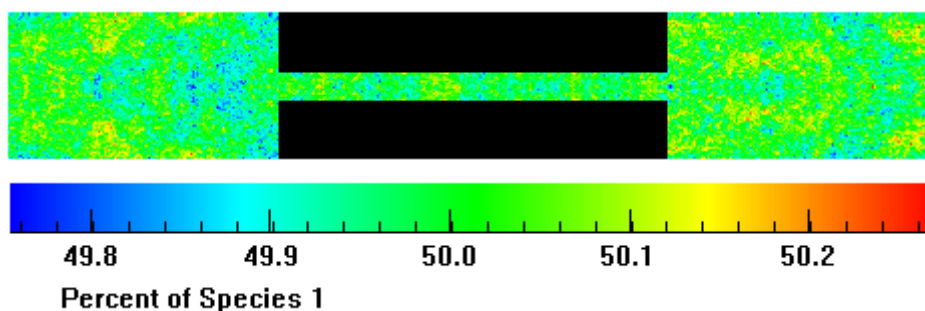


Figure 3.4. Pourcentage de l'espèce N_2 dans le mélange pour $\sigma=1$.

Nous remarquons que le pourcentage de l'espèce 1 qui présente le N_2 entre 49.9% et 50.1%. Cette petite différence est due aux fluctuations statistiques. On peut déduire que le pourcentage de chaque gaz dans le mélange est le même et que notre hypothèse défini préalablement est vérifiée.

3.3.4. Raréfaction du gaz

En physique, le libre parcours moyen est la distance moyenne parcourue par une particule se déplaçant (telle qu'un atome, une molécule, un photon) entre deux impacts successifs (collisions) modifiant sa direction, son énergie ou d'autres propriétés. La figure suivante représente la variation de ce nombre clé dans les problèmes liés aux gaz raréfiés.

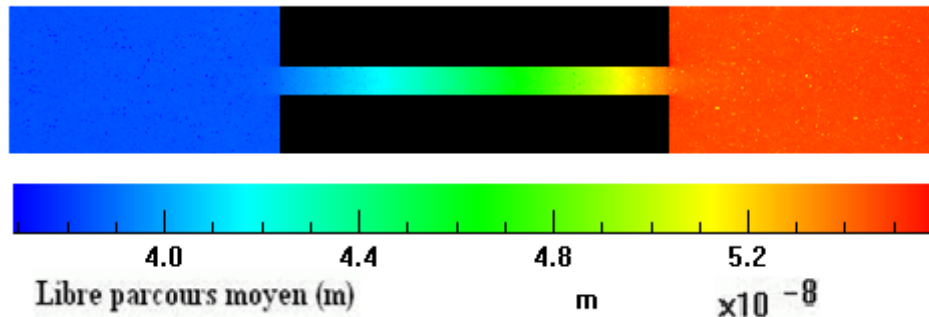


Figure 3.5. Variation du nombre du LPM dans l'ensemble du domaine de calcul pour $\sigma=1$.

La Figure 3.5 représente une variation du libre parcours moyen et qui donne une idée sur les valeurs du nombre de Knudsen, définie par la loi $Kn = \lambda / L$. Ce nombre varie progressivement dans la direction positive (sens d'écoulement). Dans la chambre d'entrée et de sortie et dans la direction transversale cette variation est négligeable. On peut constater aisément que l'ordre de grandeur du nombre de Knudsen est de 10^{-2} ($3.8 \cdot 10^{-2} < Kn < 5.4 \cdot 10^{-2}$). Les plus grandes valeurs sont atteintes à la sortie du micro-canal.

3.3.5. Condition à la limite de température

Dans cette section, nous nous plaçons au niveau de la paroi solide et nous regardons la variation de la température pour les différentes valeurs du coefficient d'accommodation ($\sigma=1$, $\sigma=0.5$ et $\sigma=0.25$).

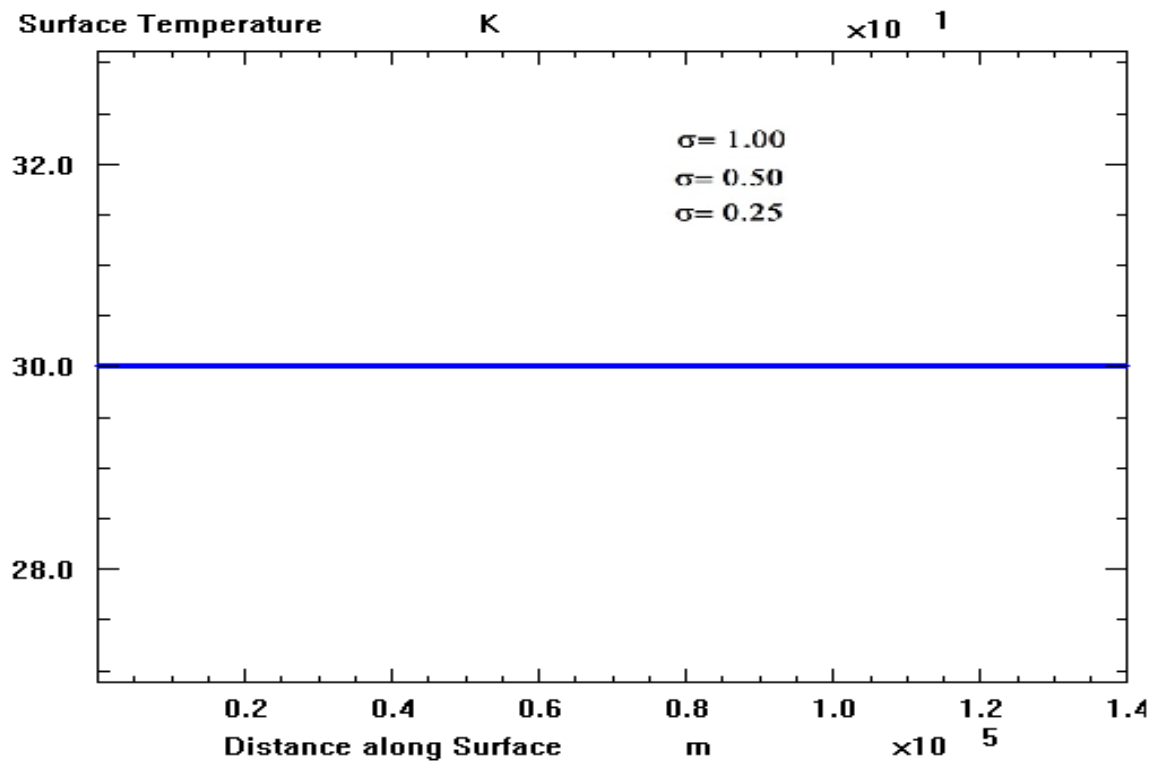


Figure 3.6. Température de l'écoulement le long de la paroi pour les 3 valeurs du σ .

Nous présentons le profil de température dans le but de vérifier les conditions aux limites isothermes imposées sur la surface solide du micro-canal. Ce profil indique que la température demeure constante tout au long de la surface solide et elle est égale à 300 K.

3.3.6. Vitesse d'écoulement en fonction de σ

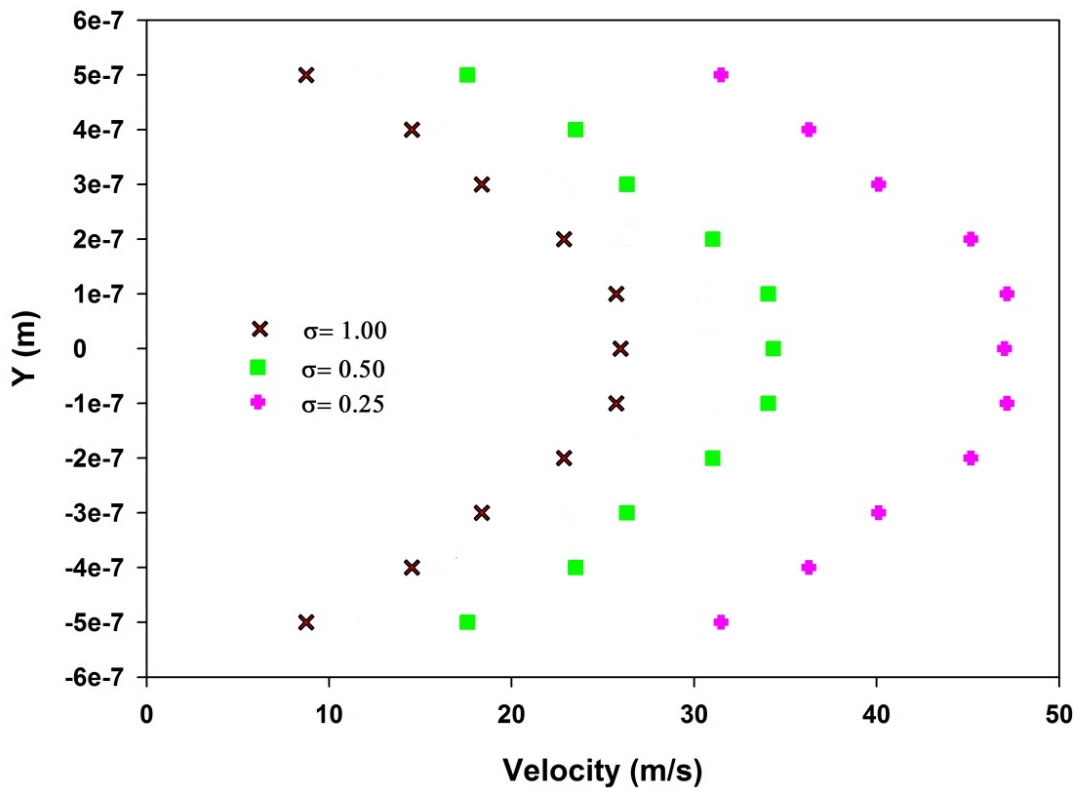


Figure 3.7. Profil de la vitesse dans la section x_0 au centre du canal pour différentes valeurs du σ .

La Figure 3.7 représente les trois profils de vitesse correspondants aux coefficients d'accommodation respectivement $\sigma = 1$, $\sigma = 0.5$ et $\sigma = 0.25$.

- Pour $\sigma = 1$: La valeur de la vitesse du gaz sur la paroi est $V = 9$ m/s.
- Pour $\sigma = 0.5$: La valeur de la vitesse du gaz sur la paroi est $V = 18$ m/s.
- Pour $\sigma = 0.25$: La valeur de la vitesse du gaz sur la paroi est $V = 31$ m/s.

Nous constatons que la variation de la vitesse dans une section transversale du micro-canal d'après les calculs de DSMC, prend la forme d'un profil de Poiseuille-Hagen. La comparaison entre les différents profils indique que plus le coefficient d'accommodation diminue, plus la vitesse augmente. Le profil subit donc un glissement par bloc, et ce glissement est traduit par des valeurs positives non nulles sur la paroi.

3.3.7. Vitesse de glissement le long de paroi solide

La Figure 3.8 représente la variation de la différence entre la vitesse de la paroi considérée nulle (V_p) et la vitesse de d'écoulement le long de la paroi solide pour différentes valeur du coefficient d'accommodation.

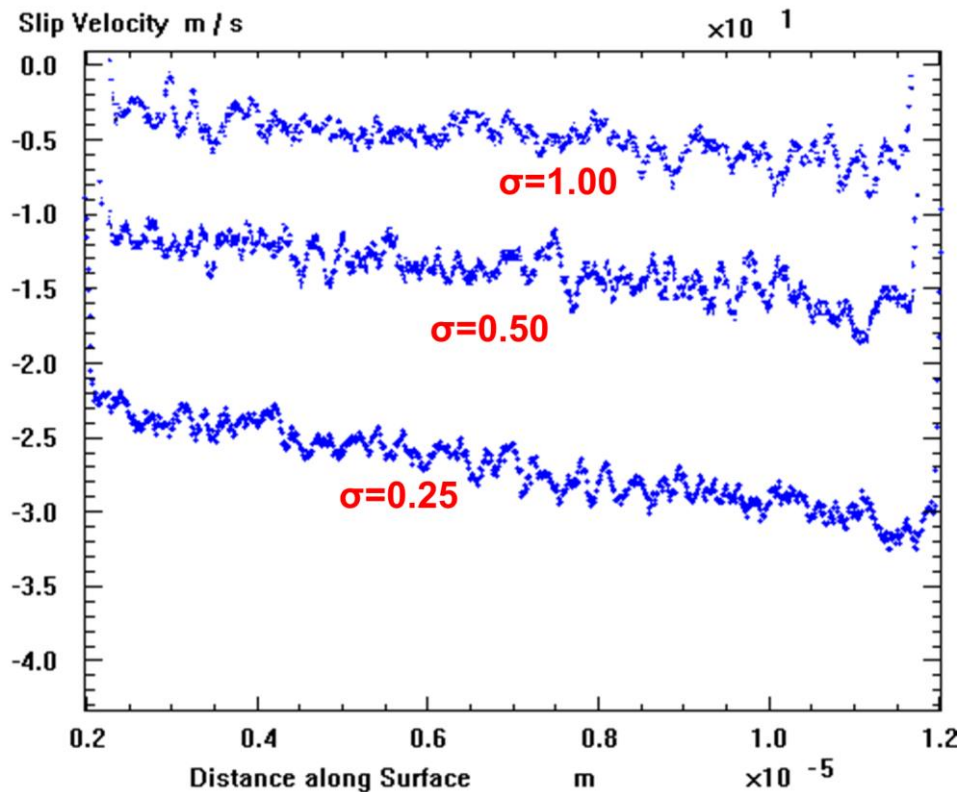


Figure 3.8. Vitesse de glissement le long de la paroi pour différentes valeurs du σ .

Nous remarquons que plus la valeur du coefficient d'accommodation est faible plus les valeurs de la vitesse augmente. Cette variation est quasi-linéaire et augmente progressivement le long du micro-canal confirmant ainsi les résultats illustrés sur les Figures 3.2, 3.3 et 3.7.

3.4. Conclusion

On note que le coefficient d'accommodation joue un rôle important et pivot dans l'étude des écoulements des gaz dans des géométries micro-métriques, bien qu'il s'agit d'un coefficient difficile à calculer théoriquement. Les résultats numériques ont montré que lorsque le coefficient d'accommodation diminue, la vitesse de l'écoulement augmente. Ces résultats montrent aussi qu'on a atteint la limite du modèle classique de Naviers-Stokes avec des conditions d'adhérence à la paroi.

Conclusion générale et perspectives

Conclusion générale et perspectives

Dans ce travail nous avons étudié numériquement la dynamique de l'écoulement d'un mélange de deux gaz homogènes constitué d'azote (N_2) et de monoxyde de carbone (CO) à travers un micro-canal. L'écoulement traverse le micro-canal plan suite à une différence de pression entre l'entrée et la sortie. Après une étude bibliographique en premier chapitre nous avons exposé dans le chapitre deux, les techniques de base de la simulation directe par la méthode de Monte Carlo. Les résultats obtenus durant cette étude montrent l'effet du coefficient d'accommodation sur les propriétés dynamiques de l'écoulement. En premier temps, nous avons discuté la variation de la vitesse, du nombre de Mach ainsi que la température sur la paroi solide pour une condition de réflexion complètement diffuse. Par la suite, nous avons calculé les vitesses de glissement correspondantes à chaque valeur du coefficient d'accommodation. Les résultats montrent que notre étude se situe dans un régime de glissement validés par une raréfaction du mélange dans le micro-canal. Nous remarquons aussi que plus le coefficient d'accommodation diminue, plus la vitesse d'écoulement augmente. Concernant les perspectives de cette étude, nous pouvons valider les résultats numériques réalisés par la méthode DSMC avec la solution théorique de Poiseuille-Hagen en changeant les conditions aux limites. Afin de confirmer ou améliorer les résultats obtenus nous pouvons utiliser d'autres mélanges de gaz ou d'autres géométries plus compliquées telles que les cylindres ou les formes 3D.

PEOPLE'S DEMOCRATIC REPUBLIC OF ALGERIA
MINISTRY OF HIGHER EDUCATION AND SCIENTIFIC RESEARCH
UNIVERSITY OF KASDI MERBAH OUARGLA
FACULTY OF MATHEMATICS AND MATTER SCIENCES

N° : TAM62/2021 **1st International Conference on Sustainable Energy and Advanced Materials**
IC-SEAM'21 April 21-22, 2021, Ouargla, ALGERIA (Virtual conference)

CERTIFICATE OF PARTICIPATION

The organizing committee of the first International Conference on Sustainable Energy and Advanced Materials
IC-SEAM'21 April 21-22, 2021, Ouargla, ALGERIA, certifies that:

Djilali Ameur

presented an Oral communication entitled:

Study of a Gas Mixture in a Micro-channel by Numerical Statistical Approach

Co-author (s): Joanna Dib, Rachid Saim, Hadj Boumediene Menouar and Riyad Mohammed

 **Dean of the Faculty**
Pr/ Djamel BECHKI

 **IC-Coordinator of IC-SEAM'21**
Dr. Ezzhar BENMEBROUK

 **Chairman of the IC-SEAM'21**
Dr. Ezzhar MOHAMMEDI

Bibliographiques

- [1] **K.Abdelaziz** (2015). Contribution A L'étude D'écoulements Traversant Les Micro-Canaux Thèse De Doctorat Université Des Sciences Et De La Technologie d'Oran Mohamed Boudiaf.
- [2] **D.Ameur** (2008). Modélisation Analytique Et Simulation Numérique Par La Méthode De Monte Carlo D'un Ecoulement De Gaz Dans Des Micro-Canaux, Thèse De Doctorat. Paris 6.
- [3] **R.Fulcrand** (2009). Etude Et Développement D'une Plateforme Microfluidique Dédiée A Des Applications Biologiques, Intégration D'un Actionneur Magnétique Sur Substrat Souple. Thèse De Doctorat. Université Paul Sabatier-Toulouse III.
- [4] **A.Antoniotti, J.Koubi** (2014). Calibration D'un Système Micro-fluidique Pour La Fabrication De Gouttes Mono Disperses. Laboratoire Physique de la Matière Condensée CNRS - UMR7336 - Université Nice Sophia-Antipolis Nice.
- [5] **A.Farid, Z.Yu, J.Tom** (2009). Current Micro-pump Technologies And Their Biomedical Applications. *Microsystems Technologies*, Vol. 15, No 5, P. 647-666.
- [6] **R.Zengerle, J.Ulrich, S.Kluge** (1995). A Bidirectional Silicon Micro-pump. *Sensors And Actuators A: Physical*, , Vol. 50, No 1-2, P. 81-86.
- [7] **J.L.Sheng, K.W.Hong** (2007). Peristaltic Piezoelectric Micro-pump System For Biomedical Applications. *Biomedical Micro-devices*, 2007, Vol. 9, No 4, P. 619-626.
- [8] **J.G.Seok, C.S.Kim, C.Beom**, (2010). Applications Of Micro-mixing Technology. *Analyst*, vol. 135, No 3, P. 460-473.
- [9] **Y.Z.MATSUMOTO, S.G.Hiroshi** (2001). Ultrasonic Micro-mixer For Micro-fluidic Systems. *Sensors And Actuators A: Physical*, Vol. 93, No 3, P. 266-272.
- [10] **L.K.Fong , L.J.Wen** (2008). A Novel In-Plane Micro-fluidic Mixer Using Vortex Pumps For Fluidic Discretization. *JALA: Journal Of The Association For Laboratory Automation*, Vol. 13, No 4, P. 227-236.
- [11] **K.W.OH ,C.H AHN** (2006). A Review Of Micro-valves. *Journal Of Micromechanics And Micro-engineering*, Vol. 16, No 5, P. R13.
- [12] **S.L.ZENG, B.J.QIN** (2009). Micro-valve-Actuated Precise Control Of Individual Droplets In Micro-fluidic Devices. *Lab On A Chip*, Vol. 9, No 10, P. 1340-1343.
- [13] **C.Stéphane** (2013). *Micro-fluidics*. John Wiley & Sons.
- [14] **M.Didier, G.Stephan, F.Béatrice** (2001). A High-Performance Silicon Micro-pump For Disposable Drug Delivery Systems. In : *Technical Digest. MEMS 2001. 14th IEEE International Conference On Micro Electro Mechanical Systems (Cat. No. 01CH37090)*. IEEE,P. 413-417.

- [15] **T.F.Eh** (2002). *Micro-fluidics And Bio-mems Applications*. Boston : Kluwer Academic Publishers.
- [16] **T.Patrick** (2005). *Introduction To Micro-fluidics*. OUP Oxford.P 5.
- [17] **K. Schwab, J. Arlett, J. Worlock, M. Roukes** (2001). *Physica E9*, 60 K. Schwabe, E. Henriksen, J. Worlock, M. Roukes, *Lett.Nature*.
- [18] **C.K.Chen** (2015). *Impacts Of Bioinformatics To Medicinal Chemistry*. *Medicinal Chemistry*, Vol. 11, No 3, P. 218-234.
- [19] **G.E.M.KARNIADAKIS, B.Ali, M.GAD-EL-HAK** (2002). *Micro Flows: Fundamentals And Simulation*. *Applied Mechanics Reviews*, Vol. 55, No 4, P. B76.
- [20] **H.H.Molinaro** (2014). *Les Technologies MEMS*. Editier.
- [21] **B.Nigassa ,M.E.Amine** (2019). *Introduction Aux Micro-Système (MEMS)*.
- [22] **V.Romain** (2010). *Dispositifs Fluidiques De Contrôle Actif D'écoulements A Base De Microsystèmes Magnéto-Electro-Mécanique (MMEMS):(Conception, Réalisation, Tests)*. Thèse De Doctorat. Ecole Centrale De Lille.
- [23] **L.James, B.Alain** (1989). *Aérodynamique: Théories De La Dynamique Des Fluides*. Cépaduès-Éditions.
- [24] **Y.Fang** (2003). *Numerical Simulations Of High Knudsen Number Gas Flows And Micro-channel Electrokinetic Liquid Flows*. Drexel University.
- [25] **B.Graeme** (1994). *A Molecular Gas Dynamics And The Direct Simulation Of Gas Flows*. *Molecular Gas Dynamics And The Direct Simulation Of Gas Flows*.
- [26] **W.Moran, L.Zhixin** (2006). *Gas Mixing In Micro-channels Using The Direct Simulation Monte Carlo Method*. *International Journal Of Heat And Mass Transfer*, Vol. 49, No 9-10, P. 1696-1702.
- [27] **M.LE, I.Hassan** (2007). *DSMC Simulation Of Gas Mixing In T-Shape Micro-mixer*. *Applied Thermal Engineering*, Vol. 27, No 14-15, P. 2370-2377.
- [28] **F.Yan, B.Farouk** (2002). *Numerical Simulation Of Gas Flow And Mixing In A Micro-channel Using The Direct Simulation Monte Carlo Method*, *Micro-scale Therm. Eng.* 6 235- 251.
- [29] **B.Ali, K.George** (2005). *Micro-flows And Nano-flows: Fundamentals And Simulation*. *Interdisciplinary Applied Mathematics*. Springer.
- [30] **S.Lajos, P.Jeerarak, G.Sandrine** (2010). *Micro-fluidics And Nano-fluidics . Comparative Study Between Computational And Experimental Results For Binary Rarefied Gas Flows Through Long Micro-channels*, Vol. 9, No 6, P. 1103-1114.
- [31] **M.J.Francis** (1973). *Construction Of Linearized Kinetic Models For Gaseous Mixtures And Molecular Gases*. *The Physics Of Fluids*, Vol. 16, No 12, P. 2095-2105.

- [32] **S.Lajos, V.Dimitris** (2010). Rarefied Gas Flow Of Binary Mixtures Through Long Channels With Triangular And Trapezoidal Cross Sections. *Micro-fluidics And Nano-fluidics*, Vol. 9, No 2-3, P. 471-487.
- [33] **C.BUET** (1996). A Discrete-Velocity Scheme For The Boltzmann Operator Of Rarefied Gas Dynamics. *Transport Theory And Statistical Physics*, Vol. 25, No 1, P. 33-60.
- [34] **W.E.Daniel, S.L.Ross** (2009). CALCULATING THE SAMPLING CONE GAS FLOW IN AN INDUCTIVELY COUPLED PLASMA MASS SPECTROMETER. Thèse De Doctorat. Brigham Young University.
- [35] **H.constantinou, N.Garcia**(2003). Statistical error in particle simulations of hydrodynamic phenomena. *Journal of computational physics* 187.1 P.274-297.
- [36] **R.M.Mehrnaz** (2011). Simulation Numérique Par La Méthode Monte Carlo (DSMC) Et Modélisation Analytique D'un Mélange Gazeux Dans Un Micro Canal. These De Doctorat. Paris 6.
- [37] **M.Reyhanian, C.Cédric, R.GATIGNOL** (2013). Numerical Analysis Of The Mixing Of Two Gases In A Micro-channel. *Mechanics & Industry*, Vol. 14, No 6, P. 453-460.
- [38] **B.Adrian, Z.S.Chun** (2020). Monte Carlo Methods. Springer Nature.
- [39] **G.L.Buffon** (1904). Essai d'Arithmétique Morale. Supplement A l'Historie Naturelle, Vol. 4, P. 1777.
- [40] **D.Laplace** (1886). Marquise Pierre-Simon. Théorie Analytique Des Probabilistes, Oeuvres Completes De Laplace.
- [41] **K.M.George, M.P.Alfred** (1963). Geometrical Probability.
- [42] **I.K.Lord** (1901). Nineteenth Century Clouds Over The Dynamical Theory Of Heat And Light. The London, Edinburgh, And Dublin Philosophical Magazine And Journal Of Science, Vol. 2, No 7, P. 1-40.
- [43] **S. L. Zabell** (1908). On student's. Probable Error Of A Correlation Coefficient. *Biometrika*, P. 302-310.
- [44] **H.A.Scott, F.G.Elmer, G.H.Hunt** (1949). Monte Carlo Method: Proceedings Of A Symposium, June 29 [To] July 1, 1949 In Los Angeles, California, Under The Sponsorship Of The Rand Corporation, And The National Bureau Of Standards, With The Cooperation Of The Oak Ridge National Laboratory. US Government Printing Office.
- [45] **G.Gerald, H.KAHN** (1951). Monte Carlo Methods For Shield Computation. US Atomic Energy Commission, Technical Information Division.
- [46] **M.Nicholas, R.W.Arianna, R.N.Marshall** (1953). Equation Of State Calculations By Fast Computing Machines. *The Journal Of Chemical Physics*, Vol. 21, No 6, P. 1087-1092.

- [47] **R.N.Marshall, R.W.Arianna** (1955). Monte Carlo Calculation Of The Average Extension Of Molecular Chains. *The Journal Of Chemical Physics*, Vol. 23, No 2, P. 356-359.
- [48] **D.M.Pierre** (2013). Mean Field Simulation For Monte Carlo Integration. *Monographs On Statistics And Applied Probability*, Vol. 126, P. 26.
- [49] **D.M.Pierre, F.F.Kac** (2004). Genealogical And Interacting Particle Approximations. *Springer Series: Probability And Applications*, Vol. 37, P. 1515-1528.
- [50] **W.Möller, M.Eckstein** (1984). Tridyn-ATRIM simulation code including dynamic composition changes. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2(1-3), 814-818.
- [51] **C.René, D.M.Pierre, H.Peng** (2012). An Introduction To Particle Methods With Financial Applications. In: *Numerical Methods In Finance*. Springer, Berlin, Heidelberg, P. 3-49.
- [52] **K.P.Dirk, T.Thomas, B.I.Zdravko** (2013). *Handbook Of Monte Carlo Methods*. John Wiley & Sons.
- [53] **G.L.Alejandro, B.Florence** (1997). Direct Simulation Monte Carlo: Novel Applications And New Extensions. In : *Proceedings Of The 3rd Workshop On Modelling Of Chemical Reaction Systems*, Heidelberg.
- [54] **J.H.Ferziger, M.Peric** (1996). *Computational Methods For Fluid Dynamics* Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York.
- [55] **C.Sydney** (1970). *Cowling The Mathematical Theory Of Non-Uniform Gases*. Univ. Press, Cambridge.
- [56] **B.Graeme** (1994). *A. Molecular Gas Dynamics And The Direct Simulation Of Gas Flows*. Molecular Gas Dynamics And The Direct Simulation Of Gas Flows.
- [57] **B.D.Iain, C.Gang, C.V.Graham** (1995). Predicting Failure Of The Continuum Fluid Equations In Transitional Hypersonic Flows. *Physics Of Fluids*, Vol. 7, No 1, P. 210-219.
- [58] **A.J.Francis, G.L.Alejandro** (1997). The Direct Simulation Monte Carlo Method. *Computers In Physics*, Vol. 11, No 6, P. 588-593.
- [59] **B.Graeme** (2005). The DS2V/3V Program Suite For DSMC Calculations. In: *AIP Conference Proceedings*. American Institute Of Physics, P. 541-546.
- [60] **G.J.Lebeau** (1999). A Parallel Implementation Of The Direct Simulation Monte Carlo Method. *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, Vol. 174, No 3-4, P. 319-337.
- [61] **D.Stefan B.D.Iain** (1996). Scalar And Parallel Optimized Implementation Of The Direct Simulation Monte Carlo Method. *Journal Of Computational Physics*, Vol. 126, No 2, P. 328-342.
- [62] **B.Graeme** (1994). *Molecular Gas Dynamics And The Direct Simulation Of Gas Flows*. Molecular Gas Dynamics And The Direct Simulation Of Gas Flows.

[63] **K.Satish, G.Srinivas, L.D.qing** (2005). Heat Transfer And Fluid Flow In Mini-channels And Micro-channels. Elsevier.

[64] **C.Stéphane, L.Pierre, C.Robert** (2004). Validation Of A Second-Order Slip Flow Model In Rectangular Micro-channels. Heat Transfer Engineering, Vol. 25, No 3, P. 23-30.