

République Algérienne Démocratique et Populaire

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي



UNIVERSITE MOHAMED SEDDIK BEN YAHIA -JIJEL

Faculté des Sciences et de Technologie

Département de Génie Mécanique

جامعة جيجل
مكسة كلية العلوم والتكنولوجيا
رقم الخرد: M24.79

Projet de Fin d'Etudes

*Pour l'Obtention du Diplôme
De Master 2 en Génie Mécanique
Option Energetique*

Thème

*Ecoulement Glissant d'un Gaz Dense
dans un Nano-Canal avec prise en Compte
du Potentiel d'Interaction Gaz-Parois*

Les membres du jury :

M. KABAR Y.
M^{me}. GHELLAB A.
M. LAOUIR A.

Président
Examineur
Encadreur

Présenté par :

FEKRACHE Hani

Promotion 2016

Université de Jijel

DÉDICACE

A

MA TRÈS CHÈRE MÈRE QU'ALLAH LA PROTÈGE,

*LA MÉMOIRE DE MON PÈRE QU'ALLAH LUI
ACCORDE SES
MISÉRICORDES ET SON VASTE PARADIS,*

MON FRÈRE ET MES SŒURS,

MES ENSEIGNANTS,

MA FAMILLE,

ET MES AMIS.

FEKRACHE HANI

Remerciement

Tout d'abord, merci **Allah**.

Toute ma gratitude va ensuite au monsieur Ahmed LAOUIR pour son excellent encadrement, ses conseils précieux, son suivi quotidien, la confiance qu'il m'a témoigné et de m'avoir poussé à donner le meilleur de moi-même.

J'adresse mes sincères remerciements à tous mes enseignants, en particulier monsieur Y. KABAR et madame A. GHELLAB de m'avoir fait l'honneur d'accepter d'évaluer mon travail de mémoire. J'ai également été honoré de votre participation à mon jury de soutenance.

Je tiens à remercier ma mère, mon frère Oussama et mes sœurs Hana et Maissa, qui ont toujours été là pour moi.

Je remercie mes tantes Djamila, Aicha, Zelikha, Yamina, Keltoum, Hadjira, Nadia et Hanane pour leur encouragement.

Je remercie mes oncles Smail, Boulaïd et Omar pour leur soutien.

Je remercie particulièrement mes cousins Salim, Karim, Imad, Hynd, Nina et ma sœur Dounia.

Enfin je remercie N. Alkiouk, A. Lahmer, H. Boughedda, S. Djafri et tous mes amis et camarades.

Sommaire

Introduction générale.....	5
CHAPITRE I : Ecoulements capillaires. Particularités et modèle mathématique	
I.1 Introduction.....	7
I.2 Domain de la micro-fluidique.....	7
I.2.1 Evolution de la recherche en micro-fluidique.....	7
I.2.2 Exemples de microsystèmes fluidiques.....	8
I.3 Classification conventionnel.....	10
I.4 Le libre parcours moyen λ	11
I.5 Nombre de Knudsen K_n et différents régimes d'écoulement.....	13
I.5.1 Différents régimes d'écoulement en fonction de K_n	14
I.5.2 Nombre de Knudsen K_n pour un gaz réel.....	16
I.6 Modélisation de l'écoulement glissant.....	17
I.6.1 Equations générales.....	18
I.6.2 Conditions aux limites.....	18
CHAPITRE II : Interactions entre molécules	
II.1 Introduction.....	22
II.2 Potentiel entre une molécule de gaz et une paroi solide.....	26
II.2.1 Expression du potentiel entre une molécule de gaz et un Demi-bloc infini.....	27
II.2.2 Expression du potentiel entre une molécule de gaz et deux Demi-blocs infinis.....	28
II.3 Force exercée au voisinage d'une paroi.....	31
II.4 Distribution de la pression près de la paroi.....	34
II.5 Résumé.....	35

CHAPITRE III : Outils de Simulation

III.1 Introduction.....	37
III.2 Choix du logiciel COMSOL Multiphysique 4.3.....	38
III.3 Utilisation de COMSOL Multiphysique version 4.3.....	41
III.3.1 La méthodes des éléments finis.....	41
III.3.2 Lancement du code. Etapes principales.....	42
III.4 Modélisation de l'écoulement glissant en présence d'interactions gaz-parois.....	42
III.4.1 Création du modèle.....	42
III.4.2 Géométrie.....	43
III.4.3 Propriétés du fluide	44
III.4.4 Ajout des conditions aux limites.....	46
III.4.5 Incorporation de la force d'interaction.....	46
III.4.6 Maillage.....	48
III.5 Résumé.....	48

CHAPITRE IV : Résultats et discussion

IV.1 Introduction.....	50
IV.2 Effet des forces d'interaction sur l'écoulement.....	51
IV.3 Ecoulement avec interaction gaz-paroi à différents débits (pertes de charges).....	57
IV.4 Comparaison des pertes de charges. Ecoulement sans et avec interaction gaz-parois.....	59
IV.5 Profondeur de l'influence de l'interaction gaz-parois.....	60
IV.6 Conclusion.....	62
Conclusion générale.....	63
Bibliographie.....	64

Symboles

<i>Grandeurs</i>	<i>Désignations</i>	<i>Unités</i>
a	Célérité du son	m/s
A	Section de passage fluide	m ²
d	Diamètre moléculaire	m
F	Force volumique	N/m ³
F_c	Force de canal	N
F_p	Force de paroi	N
G_p	Force massique	N/kg
g	Accélération de la pesanteur	m/s ²
h	Ouverture du canal	m
k_B	Constante de Boltzmann	J/K
K_n	Nombre de Knudsen	-
L_c	Longueur caractéristique	m
\dot{m}	Débit massique	kg/s
$\dot{m}_{L.G.P}$	Débit massique avec interaction	kg/s
M_a	Nombre de Mach	-
M	Masse molaire	g/mol
M_s	Masse molaire du solide	g/mol
M_g	Masse molaire du gaz	g/mol
N	Nombre de mol	mol
N_A	Nombre d'Avogadro	mol ⁻¹
n_V	Atomes par unité de volume	atome/m ³
P	Pression	Pa
P_m	Périmètre mouille	m
r	Distance entre molécules	m
R	Constante des gaz parfait	J/mol/K
R_e	Nombre de Reynolds	-
T	Température	K
U	Potentiel	J
U_c	Potentiel canal	J
U_p	Potentiel paroi	J
V	Volume	m ³
W	Vitesse longitudinale	m/s
w	Composante longitudinale selon x	m/s
Z	Facteur de compressibilité	-
z	Distance entre la molécule de gaz et la paroi (perpendiculairement)	m
P_e	Pression à l'entrée	Pa
ΔP	Perte de charge	bar

SYMBOLE GREQUES

<i>Grandeurs</i>	<i>Désignations</i>	<i>Unités</i>
μ	Viscosité dynamique	Pa.s
δ	Section de collision	m ²
σ	Diamètre de collision	m
σ_v	Coefficient d'accommodation	-
γ	Rapport des chaleurs spécifiques	-
ρ	Masse volumique	kg/m ³
ρ_s	Masse volumique du solide	kg/m ³
ρ_g	Masse volumique du gaz	kg/m ³
λ	Libre parcours moyen	m
λ^*	Libre parcours moyen-gaz parfait	m
ϕ	Potentiel Lennard-Jones	J
η	La densité en atomes	atomes/m ³

Abréviation

I.G.P.	Interaction Gaz-Paroi
L.J.	Lennard-Jones

Introduction générale

Ce travail a pour objectif de simuler des écoulements de gaz dans des nano-canaux. L'écoulement des gaz dans des canaux de petites tailles est gouverné par des lois qui diffèrent sur certains points du cas macroscopique. Dans la bibliographie cette différence est expliquée par les distances qui existent entre les molécules de gaz, le libre parcours moyen.

Il existe une situation où la validité des équations de Navier-stokes reste valable à condition de considérer qu'il y a glissement du gaz au voisinage de la paroi. Dans ce cas on dit que l'écoulement est en régime de glissement.

Dans ce travail, il s'agit d'étudier un écoulement en régime de glissement mais dans un canal suffisamment petit pour que l'effet des forces intermoléculaires, liées à la paroi, produise un effet sur l'écoulement. Pour cela la présence de ces forces doit être prise en compte dans les équations de mouvement. Dans la bibliographie il n'est pas rapporté des travaux dans ce sens.

Le mémoire est organisé en quatre chapitres : dans le chapitre 1 nous exposons les notions générales sur la micro-fluidique et les micro-écoulements de fluides gazeux, dans le chapitre 2 on introduit les notions liées aux interactions intermoléculaires, dans le chapitre 3 on aborde l'outil de simulation que nous avons utilisé, enfin dans le chapitre 4 on présente les résultats obtenus.

CHAPITRE I :

*ÉCOULEMENTS CAPILLAIRES.
PARTICULARITÉS ET MODÈLE
MATHÉMATIQUE*

I.1 Introduction

La description du mouvement des fluides (gaz et liquides) constitue un des plus importants secteurs scientifiques. Les deux approches fondamentales qui peuvent être utilisées pour décrire le fluide sont l'approche microscopique et l'approche macroscopique. Le macroscopique traditionnel considère le fluide comme un milieu continu, cela en utilisant des fonctions continues dans l'espace et dans le temps pour décrire la densité, la vitesse, la pression et la température. Le microscopique se concentre sur ce qui se passe au niveau moléculaire. Il est venu résoudre avec succès certains problèmes fondamentaux et technologiques.

I.2 Domaine de la micro-fluidique

La Micro-fluidique désigne l'ensemble des techniques qui ont pour but de maîtriser et contrôler les fluides à des échelles beaucoup plus petites que celles rencontrées classiquement dans l'industrie.

On peut rencontrer dans ce domaine des systèmes fluidiques dont les sections de passage sont de l'ordre de quelques dizaines de microns, et peuvent atteindre des dimensions aussi faibles que quelques nanomètres.

L'avantage principal de ces systèmes est leur rapport surface sur volume qui est très élevé ce qui nous permet d'obtenir des systèmes compacts, améliorer le transfert de chaleur et aussi plusieurs avantages économiques et technologiques. La micro-fluidique peut concerner des systèmes naturels ou artificiels, quelques exemples seront indiqués dans les pages qui suivent.

I.2.1 Evolution de la recherche en micro-fluidique

Durant les 25 dernières années, le développement considérable qu'a connu la micro-fluidique stimule la recherche scientifique dans ce domaine, de ce fait le nombre de publications a considérablement augmenté, ce que nous montre la figure I.1.

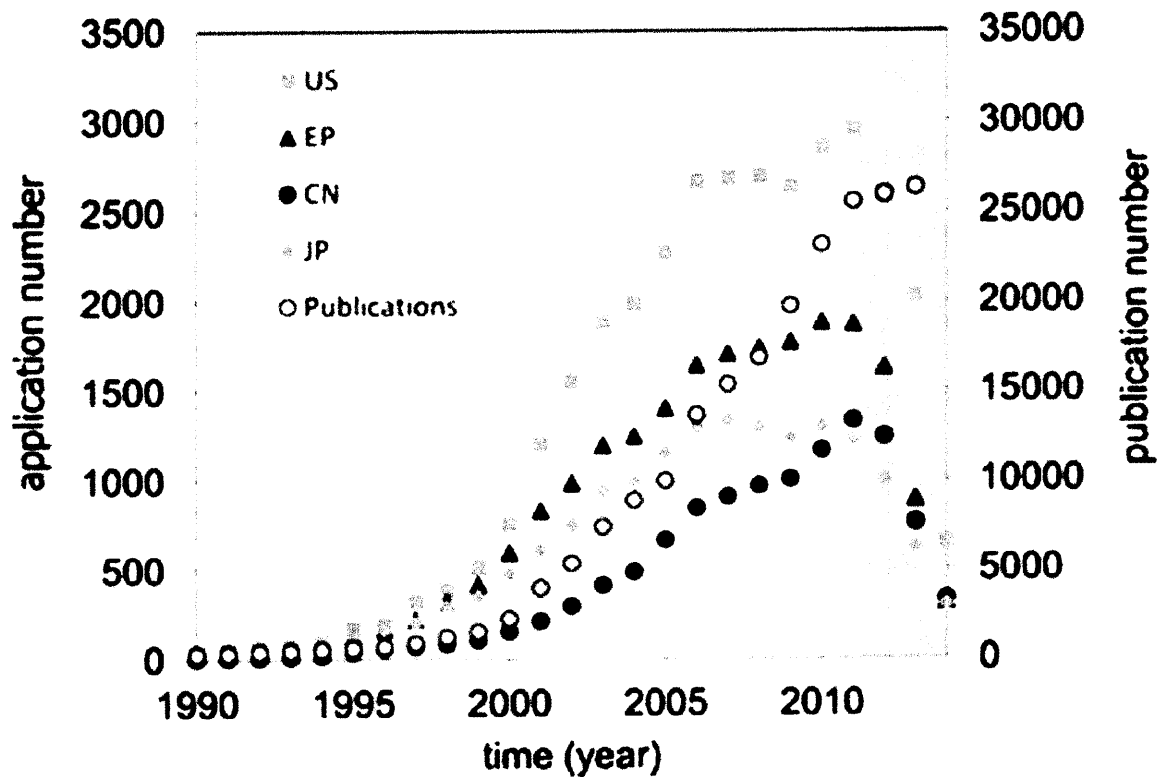


Figure I.1 Evolution de la recherche en micro-fluidique [1].

Cette courbe révèle un détail important, en effet on peut relever un certain ralentissement à partir de l'année 2010. Cela s'explique peut être par le peu d'évolution des connaissances à la suite de recherches soutenues pendant deux décennies.

I.2.2 Exemples de microsystèmes fluidiques

La micro-fluidique concerne plusieurs disciplines à savoir la biologie, la chimie, la physique...etc. Les premiers systèmes micro-fluidiques sont des systèmes naturelles ils existent depuis la création de la terre comme les végétaux. L'arbre par exemple constitue un système micro-fluidique étonnant, la sève est pompée vers des milliers de feuilles à des différentes hauteurs. L'araignée est un petit animal qui "pratique" beaucoup la micro-fluidique. Elle gère couramment des micro-écoulements de protéines à fin de tisser sa toile.

De nos jours la micro-fluidique est en plein essor elle occupe tous les secteurs industriels comme l'industrie pétrolière (extraction de gaz de schiste) et aussi dans le secteur médical qui est un secteur clé. Elle Contribue au développement de moyens beaucoup plus pratiques pour faire des analyses rapides et sans douleurs ainsi qu'à l'injection précise des médicaments au moment voulu dans les organismes malades.

Ci-dessous sont montrés quelques exemples technologiques de systèmes micro-fluidique :

▲ *Lab-on-chip* : c'est une abréviation anglaise de laboratoire sur puce, un laboratoire avec tous ses équipements sont remplacés par une puce.

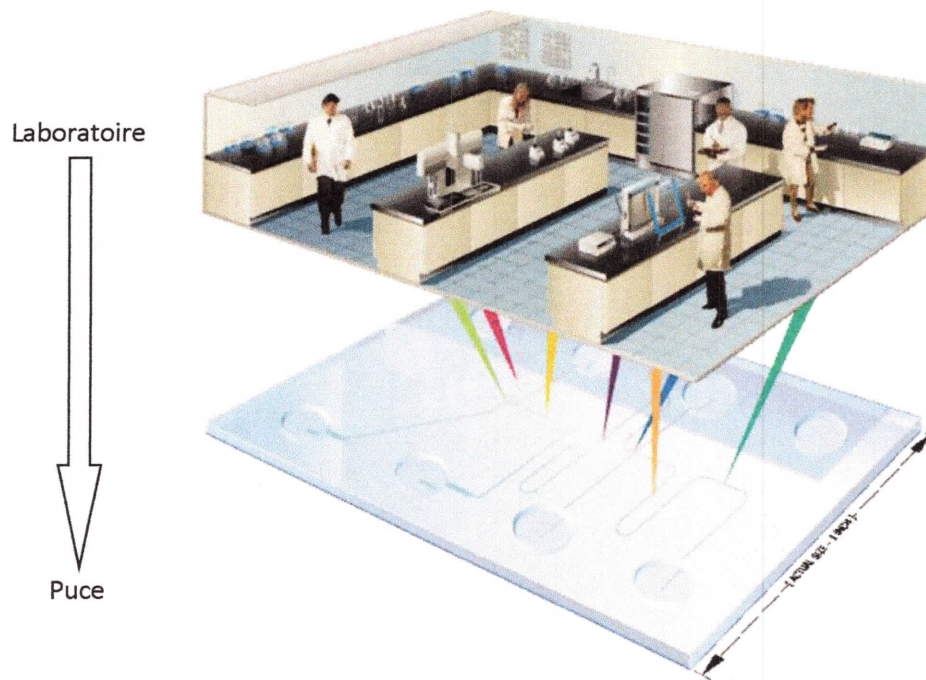


Figure I.2 *Lab-On-Chip* [2].

Cette miniaturisation permet de :

- ▶ Réduire le temps d'analyse.
- ▶ Réduire les volumes mis en jeu.
- ▶ Réduire les coûts.

^ *Tête d'imprimante à jet d'encre* : les gouttes formées par ce système miniaturisé font quelques dizaines de micromètres à partir d'un jet laminaire et sont parfaitement contrôlées (position, taille... etc.) pour se déposer sur le papier.

^ *Les micro-Echangeurs de chaleur* : ils ont un fort coefficient de transfert avec une grande compacité sont compacts cela permet de refroidir (ou de récupérer la chaleur) les parties difficiles d'accès comme dans les circuits électroniques.

Il existe aussi divers autres exemples comme : les micro-vannes, les micro-pompes, les micro-turbines, sondes pour les analyses chimiques... etc.

I.3 Classification conventionnel

Il existe une classification des canaux de petite taille rencontrés en micro-fluidique, cette classification est en fonction de la longueur caractéristique L_c , comme le montre le tableau I.1.

Canal conventionnel	$L_c > 3\text{mm}$
Mini-canal	$200\mu\text{m} < L_c < 3\text{mm}$
Micro-canal	$10\mu\text{m} < L_c < 200\mu\text{m}$
Nano-canal	$L_c < 0.1\mu\text{m}$

Tableau I.1 Classification des canaux [3].

La longueur caractéristique L_c est donnée par le diamètre hydraulique. C'est un paramètre important lors l'étude d'un écoulement, il est défini par la relation suivante ,

$$L_c = \frac{4 \cdot A}{P_m} \quad [I.1]$$

avec, A l'aire de la section de passage de fluide et P_m le périmètre mouillé.

La figure I.3 représente quelques géométries rencontrées dans l'étude des micro-écoulements et l'expression de la longueur caractéristique correspondante.

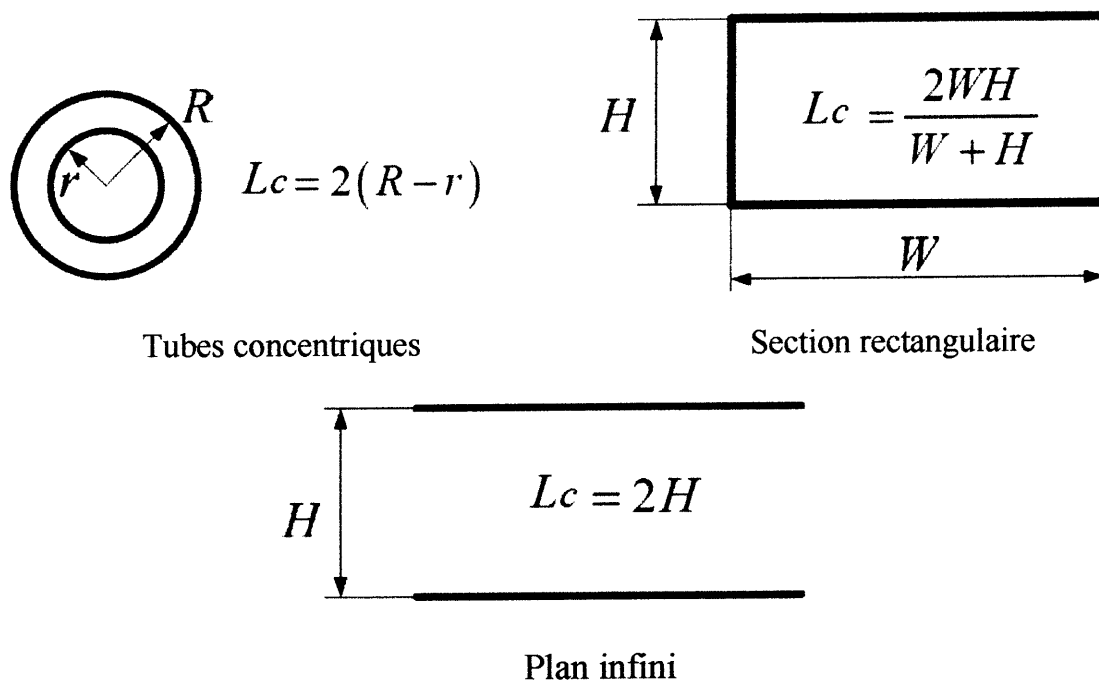


Figure I.3 Longueurs caractéristiques pour différentes géométries [4].

I.4 Le libre parcours moyen

Les gaz sont constitués d'un très grand nombre de particules discrètes appelées molécules, chaque molécule de gaz se déplace le long d'une trajectoire aléatoire, lors de ce déplacement elle frappe une autre molécule, par conséquent, nous pouvons imaginer le mouvement d'une molécule comme une succession de trajectoires libres de longueurs $\lambda_i (i = 1, k)$ dont la longueur de ces trajectoires n'est pas la même, alors on introduit le libre parcours moyen (mean free path) qui est la moyenne des longueurs de ces trajectoires.

On peut définir le libre parcours moyen λ comme la distance moyenne qu'une molécule parcourt avant qu'elle ne heurte une autre molécule comme représenté dans La figure 1.4.

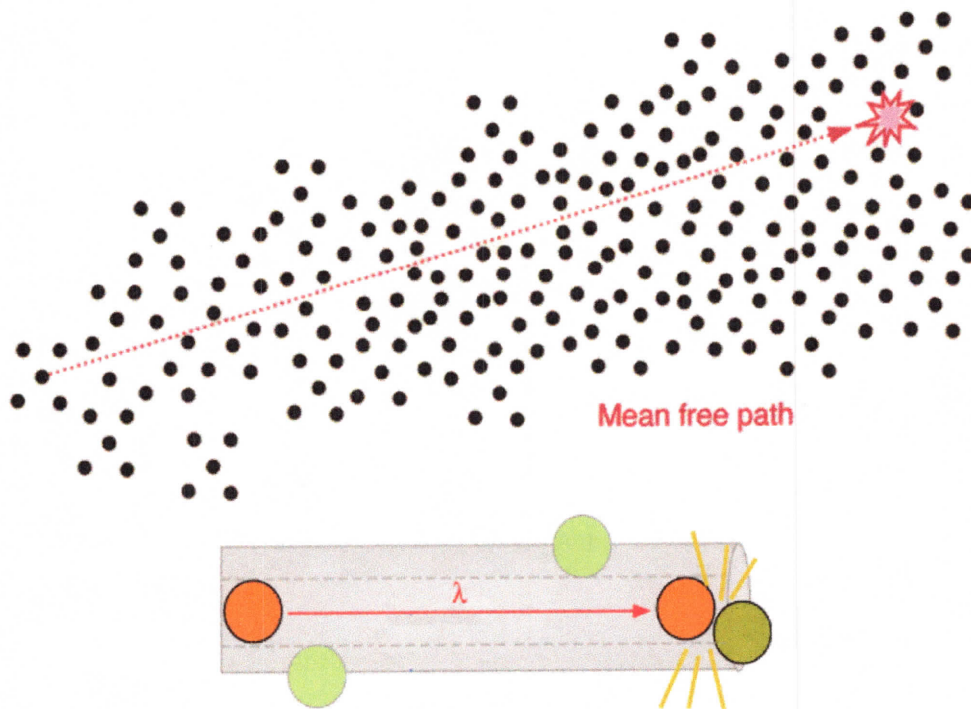


Figure I.4 Libre parcours moyen λ [5].

Expression de λ :

Supposant que les molécules ayant une forme d'une sphère rigide, la section efficace de collision δ est défini par la relation [I.2], montré dans la figure I.5.

$$\delta = \pi d^2 \quad [I.2]$$

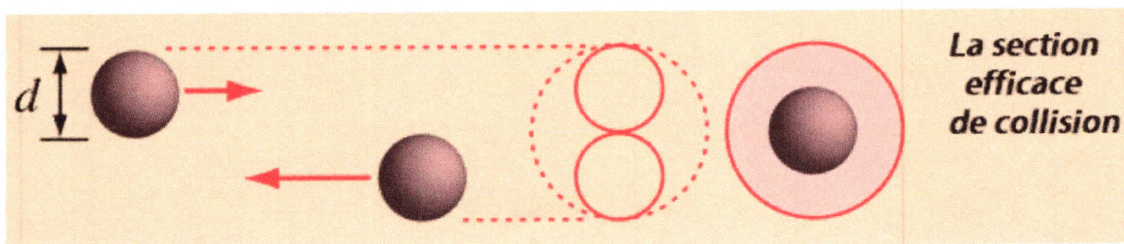


Figure I.5 Section efficace de collision δ [5].

avec, d est le diamètre moléculaire. Sachant que n_V est le nombre de molécules par unité de volume, la théorie cinétique des gaz donne [6] :

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} \delta \cdot n_V} \quad [I.3]$$

Rappelons l'équation d'état des gaz parfait, $PV = NRT$ avec, P la pression de gaz, V son volume, N le nombre de moles, T la température et R la constante des gaz parfaits.

Le nombre de molécules par unité de volume est donné par la relation suivante :

$$n_V = \frac{N \cdot N_A}{V} \quad [I.4]$$

avec, N_A le nombre d'Avogadro.

On sait qu'on peut exprimer la constant de Boltzmann k_B en fonction de la constant des gaz parfaits R par : $k_B = \frac{R}{N_A}$. Exploitant cette dernière avec les relation [I.3], [I.4] et l'équation d'état, en vue d'obtenir une expression de λ en fonction des variables d'état (P, V, T), on obtient la relation [I.5].

$$\lambda = \frac{k_B \cdot T}{\sqrt{2} \delta \cdot P} \quad I.5$$

Il existe une autre expression qui relie le libre parcours moyen λ à la viscosité dynamique μ [4].

$$\lambda = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot \frac{\mu}{P} \cdot \sqrt{RT} \quad I.6$$

On remarque à partir de deux dernières équations que le libre parcours moyen varie inversement avec la pression, et augmente avec la température.

I.5 Nombre de Knudsen K_n et différents régimes d'écoulement

Le nombre de Knudsen est un nombre adimensionnel, défini comme le rapport entre le libre parcours moyen et la longueur caractéristique [4],

$$K_n = \frac{\lambda}{L_c} \quad I.7$$

Pour $K_n < 0,01$, le libre parcours moyen des molécules de gaz est négligeable par rapport à la longueur caractéristique de la géométrie d'écoulement L_c .

Avec l'augmentation de nombre de Knudsen K_n , le rapport entre le nombre de chocs paroi-molécules de gaz et le nombre de chocs entre molécules elles mêmes croit considérablement. Les effets de raréfaction deviennent importants et par conséquent, la condition de non-glissement au contact de la paroi devient moins en moins valide. Avec une augmentation encore plus forte le modèle continue devient lui-même non valide.

On peut exprimer K_n en fonction de rapport des chaleurs spécifiques γ , le nombre de Mach M_a et nombre de Reynolds Re ,

$$K_n = \sqrt{\frac{\pi\gamma M_a}{2 Re}} \quad \text{I.8}$$

Où

$$Re = \frac{\rho \cdot W \cdot L_c}{\mu} \quad \text{I.9}$$

ρ la masse volumique du fluide.

$$M_a = \frac{W}{a} \quad \text{I.10}$$

a la célérité du son et W la vitesse du fluide.

I.5.1 Différents régimes d'écoulement en fonction de K_n

Le taux de raréfaction augment avec l'augmentation du nombre de Knudsen K_n , ce dernier est un paramètre clé pour délimiter les différents régimes d'écoulement des gaz raréfiés [7].

En fonction de ce nombre on peut distinguer quatre régimes d'écoulement, comme illustré dans la figure I.6.

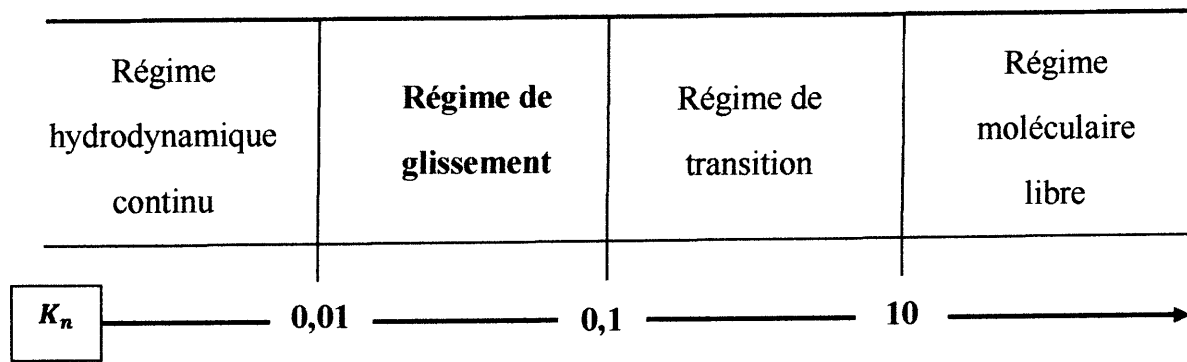


Figure I.6 Classifications des régimes d'écoulement en fonction de K_n .

- Pour $K_n < 0,01$ nous tombons dans le régime continu, c'est de la mécanique des fluides classique, on peut modéliser ce régime avec les équations de Navier-Stokes.
- Pour des nombres de Knudsen compris entre 0,01 et 0,1 c'est le régime de glissement (Slip Flow). Contrairement au régime continu on introduit dans ce régime le glissement de vitesse et le saut de température aux frontières (parois). On peut modéliser ce régime par les équations de Navier-Stokes avec les conditions aux limites, glissement de vitesse et saut de température. On verra dans la suite le glissement de vitesse seulement parce que notre cas d'étude n'exige pas l'étude de transfert de chaleur et en va concentrer seulement sur l'hydrodynamique.
- Si le nombre de Knudsen est compris entre 0,1 et 10, c'est le régime de transition. Les équations de Navier-Stokes ne sont pas applicables, et les collisions entre les molécules de gaz ne sont pas encore négligeables.
- Concernant la quatrième zone où le nombre de Knudsen est supérieur à 10, le régime est dit moléculaire libre où les collisions intermoléculaires sont négligeables devant les collisions molécules-paroi.

L'équation utilisée pour décrire le régime de transition et le régime moléculaire libre est celle de Boltzmann.

la figure I.7 illustre les différents régimes d'écoulements du méthane dans les roches en fonction de nombre de Knudsen K_n , et de la pression P .

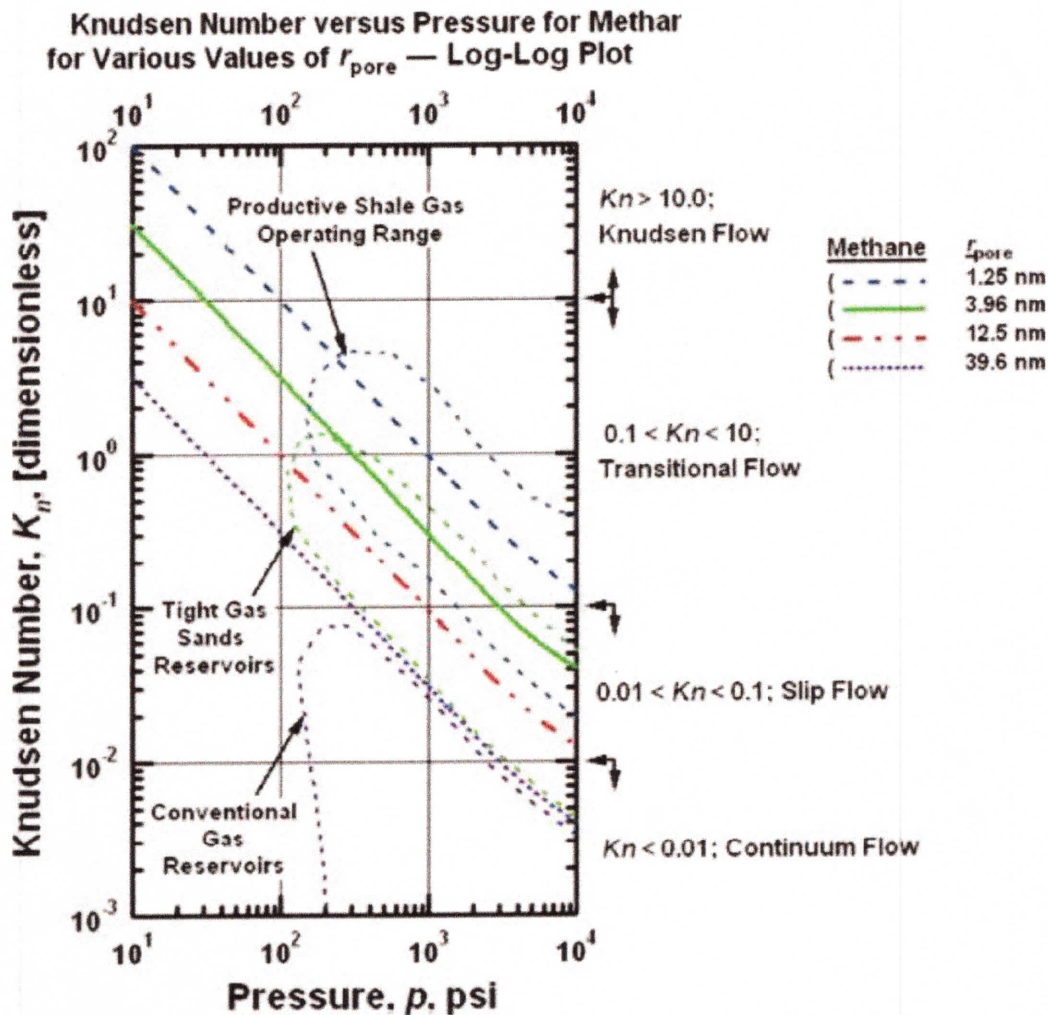


Figure I.7 Diagramme Kn-P [8].

Dans notre étude nous nous intéressons au régime de glissement. On peut trouver dans la littérature différents avis sur la zone de validité du régime de glissement,

$0,001 < K_n < 0,1$ [9], et $0,01 < K_n < 0,6$ [10] et $0,01 < K_n < 0,1$ cette dernière est généralement adopté et que nous adopterons nous même.

I.5.2 Nombre de Knudsen K_n pour un gaz réel

En faisant une lecture de la figure I.7 on remarque clairement que le régime de glissement lors d'un écoulement de gaz peut avoir lieu avec des pressions élevées, de ce fait on doit tenir compte la compressibilité d'un gaz réel.

Le libre parcours moyen d'un gaz réel λ est plus petit (plus grand) d'un facteur Z que celui du gaz parfait λ^* [6], $\lambda = Z\lambda^*$. Rappelons que l'expression du libre parcours moyen d'un gaz parfait est donnée par la relation I.5 (pour qui $Z = 1$).

L'expression de libre parcours moyen d'un gaz réel sera :

$$\lambda = \frac{Z \cdot k_B \cdot T}{\sqrt{2} \delta \cdot P} \quad \text{I. 11}$$

où Z est le facteur de compressibilité du gaz : $Z = Z(T, P)$.

Pour se trouve en régime de glissement, la condition suivante doit être vérifié,

$$0,01 < K_n < 0,1 \Rightarrow 0,01 < \frac{\lambda}{L_c} < 0,1 \Rightarrow 10\lambda < L_c < 100\lambda \quad \text{I. 12}$$

Exploitant cette dernière relation et la relation I.5 on a réalisé le tableau I.2 qui donne les valeurs de L_c en fonction de la pression pour avoir le régime de glissement.

$P(\text{bar})$	$\lambda^*(\text{nm})$	z	$\lambda(\text{nm})$	$L_c, \text{ glissement}(\text{nm})$
1	96,4	1	96,4	$964 < L_c < 9640$
100	0,96	0,96	0,92	$9,2 < L_c < 92$
200	0,48	0,98	0,47	$4,7 < L_c < 47$
500	0,19	1,37	0,26	$2,6 < L_c < 26$

Tableau I.2 Longueur caractéristique L_c pour le régime de glissement en fonction de la pression ($T = 298,15 \text{ K}$).

I.6 Modélisation de l'écoulement glissant

Comme précisé plus haut, il est admis qu'en régime de glissement les équations de Navier-Stokes restent valables mais en incluant des conditions aux limites qui modélisent le glissement à la paroi.

I.6.1 Equations générales

Les équations qui régissent le régime de glissement sont : l'équation de continuité, de quantité de mouvement et de l'énergie.

- Equation de continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho W_j) = 0 \quad \text{I. 13}$$

(j , indice de sommation).

- Equations de quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho W_i) + W_j \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho W_i) = F_i - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial W_i}{\partial W_j} + \frac{\partial W_j}{\partial W_i} \right) \right] \quad \text{I. 14}$$

(i , indice libre)

où, F_i représentent Les forces de volume.

On peut aussi ajouter l'équation de l'énergie avec la condition aux limites modélisant le saut de température. Comme annoncé, dans notre travail on se focalise sur l'hydrodynamique d'un écoulement isotherme.

I.6.2 Conditions aux limites

Dans la mécanique des fluides classique, les particules fluides au voisinage de la paroi ont la même vitesse que celle-ci. Cette condition est appelée la condition de non-glissement. Dans le régime de glissement, cette dernière n'est plus valide. On introduit les conditions aux limites de glissement de vitesse à la paroi.

La première condition aux limite qui décrit le glissement de vitesse a été introduite par Maxwell , elle porte le nom de condition de glissement de Maxwell d'ordre 1 :

$$W_g - W_p = \frac{(2 - \sigma_v)}{\sigma_v} \lambda \frac{\partial W_g}{\partial n} \Big|_p \quad \text{I. 15}$$

avec, W_g et W_p sont respectivement la vitesse du gaz près de la paroi, et la vitesse de la paroi, n est la normal de la paroi.

Le terme σ_V est le coefficient d'accommodation (coefficient de réflexion de Maxwell), ces valeurs extrêmes sont le 1 et le 0. Maxwell a choisi de considérer la paroi comme une surface intermédiaire entre une surface spéculaire et une surface diffuse. une fraction σ_V des molécules incidentes se réfléchit de façon diffuse, cependant la fraction $(1 - \sigma_V)$ se réfléchit d'une façon spéculaire [4].

Pour une réflexion spéculaire $\sigma_V = 0$ et pour une réflexion diffuse $\sigma_V = 1$.

La figure I.8 nous montre les deux façons de réflexion.

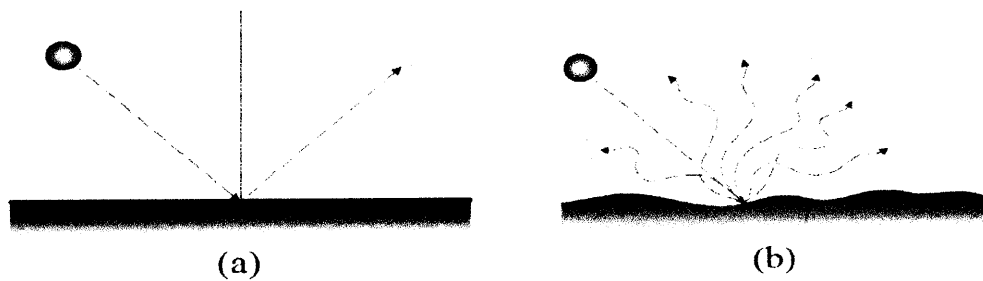


Figure I.8 (a) Réflexion spéculaire. (b) Réflexion diffuse [4].

La figure I.9 montre la différence entre les profils de vitesse de régime de glissement et de celle traditionnel.

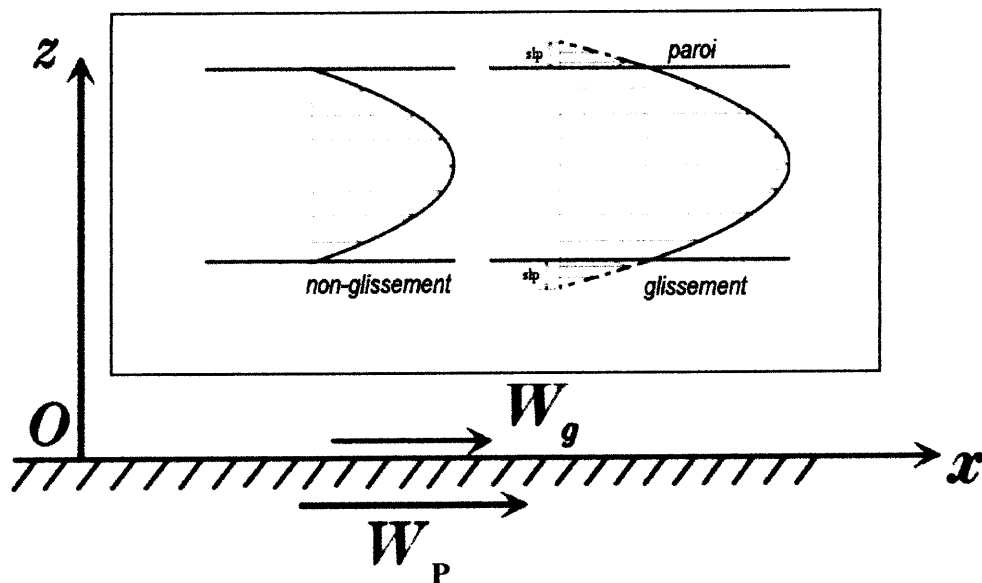


Figure I.9 Glissement gaz-paroi [7].

Il existe bien d'autres expressions donnant la condition de glissement proposées par différents auteurs. Des modèles plus précis appelés du deuxième ordre sont également préposés. Le tableau I.3 regroupe les différentes expressions exprimées par rapport à la vitesse adimensionnelle.

Auteurs	Conditions aux limites	Ordre
Maxwell (1879)	$u_g^* - u_p^* = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} Kn \frac{\partial u_g^*}{\partial y^*} \Big _p$	1
Xue et Fan (2000)	$u_g^* - u_p^* = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \tanh(Kn) \frac{\partial u_g^*}{\partial y^*} \Big _p$	1
Jie. et al. (2000)	$u_g^* - u_p^* = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \left[Kn \frac{\partial u_g^*}{\partial y^*} \Big _p + \frac{Kn}{2} \left(Re \frac{\partial p^*}{\partial x^*} \right)_p \right]$	1
Beskok et Karniadakis (1999)	$u_g^* - u_p^* = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{Kn}{1 - b Kn} \frac{\partial u_g^*}{\partial y^*} \Big _p$	1
Chapman et Cowling (1952)	$u_g^* - u_p^* = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \kappa_0 Kn \frac{\partial u_g^*}{\partial y^*} \Big _p - \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} \frac{\kappa_0^2 Kn^2}{2} \frac{\partial^2 u_g^*}{\partial y^{*2}} \Big _p$	2
Deissler (1964)	$u_g^* - u_p^* = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} Kn \frac{\partial u_g^*}{\partial y^*} \Big _p + \frac{9}{4} \frac{Kn^2}{2} \frac{\partial^2 u_g^*}{\partial y^{*2}} \Big _p$	2
Mitsuya (1993)	$u_g^* - u_p^* = \frac{2 - \sigma_v}{\sigma_v} Kn \frac{\partial u_g^*}{\partial y^*} \Big _p + \frac{4}{9} \frac{Kn^2}{2} \frac{\partial^2 u_g^*}{\partial y^{*2}} \Big _p$	2

Tableau I.3 Conditions aux limites adimensionnelles utilisées dans la littérature [10].

Remarque : La vitesse u coïncide avec la vitesse W de notre notation.

CHAPITRE II :

INTERACTIONS ENTRE MOLÉCULES

II.1 Introduction.

Deux molécules données séparées d'une distance r comptée des deux centres, interagissent entre elles. Ces interactions intermoléculaires sont exprimées par un potentiel. Plusieurs modèles dans la littérature [4] sont proposés pour exprimer ce dernier. Les modèles les plus connus sont schématisés dans la figure II.1.

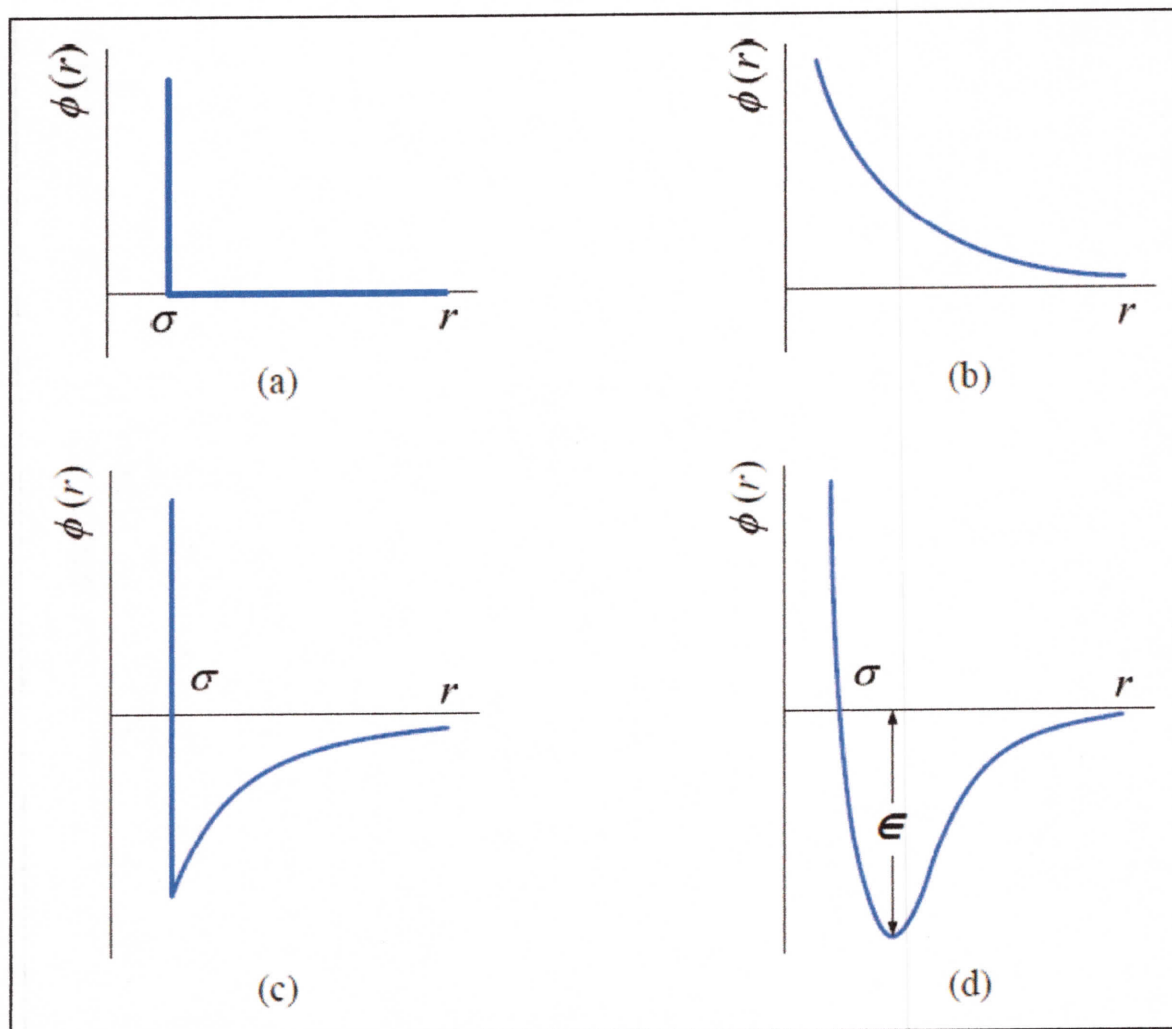


Figure II.1 modèles des potentiels moléculaires.

- (a) Sphère rigide. (b) Modèle en loi de puissance inverse.
(c) Modèle de Sutherland. (d) Modèle de Lennard-Jones [4].

► Modèle sphère rigide (Figure II.1.a): dans ce modèle, qui est le plus simple, les molécules se déplacent librement et n'agissent pas l'une sur l'autre excepté quand elles se heurtent. Le potentiel intermoléculaire est défini par :

$$\begin{cases} \phi(r) = \infty & r \leq \sigma \\ \phi(r) = 0 & r > \sigma \end{cases} \quad \text{II.1}$$

avec,

σ : le diamètre de collision, généralement compris entre 0,3 et 0,8 nm.

r : la distance entre les deux centres des molécules.

► Modèle de puissance inverse (Figure II.1.b): Dans ce modèle, l'expression du potentiel de puissance inverse, sa forme est :

$$\phi(r) = \frac{k}{r^\alpha} \quad \text{II.2}$$

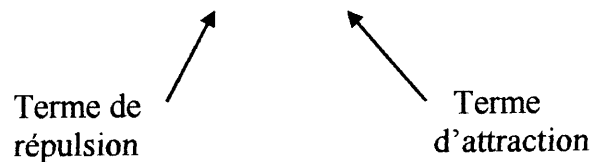
► Modèle de Scheraga (Figure II.1.c) : Ce potentiel s'exprime par :

$$\begin{cases} \phi(r) = \infty & r \leq \sigma \\ \phi(r) = -\frac{k'}{r^\beta} & r > \sigma \end{cases} \quad \text{II.3}$$

► Modèle de Lennard-Jones (Figure II.1.d) : Parmi plusieurs modèles qui sont proposés, le plus généralement employé aujourd'hui est le modèle de Lennard-Jones (12-6). Dans ce modèle sont fixés deux exposants, n et m , de la forme générale proposée par Mie. Cette dernière est constituée de deux termes en puissance inverse l'un représente la répulsion, et l'autre l'attraction.

Le modèle de Mie est donné par l'équation suivante :

$$\phi(r) = \frac{A}{r^n} - \frac{B}{r^m} \quad \text{II. 4}$$



Avec : $A = 4\epsilon\sigma^{12}$ et $B = 4\epsilon\sigma^6$ et $m < n$, Lennard-Jones a fixé les paramètres n et m tel que $n = 12$ et $m = 6$,

$$\phi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad \text{II. 5}$$

On peut l'exprimer également par la relation II.6 :

$$\phi(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6} \quad \text{II. 6}$$

Dans l'expression II.5, ϵ est le minimum de $\phi(r)$ où le puits du potentiel, pour trouver à quelle distance r_0 , le potentiel ϕ est au minimum, mathématiquement on annule la dérivée,

$$\frac{d\phi(r)}{dr} = 0 \Rightarrow r_0 = \sqrt[6]{2} \cdot \sigma$$

Un autre point remarquable est celui où $\phi(r)$ s'annule. De II.5 on déduit immédiatement que cela arrive à $r = \sigma$.

La figure II.2 nous montre l'allure du potentiel Lennard-Jones entre deux molécules d'azote. Pour ce dernier le diamètre de collision et le puits de potentiel ont pour valeur $\sigma = 0,3572$ nm et $\epsilon = 0,12974 \cdot 10^{-20}$ J. Selon la référence [11].

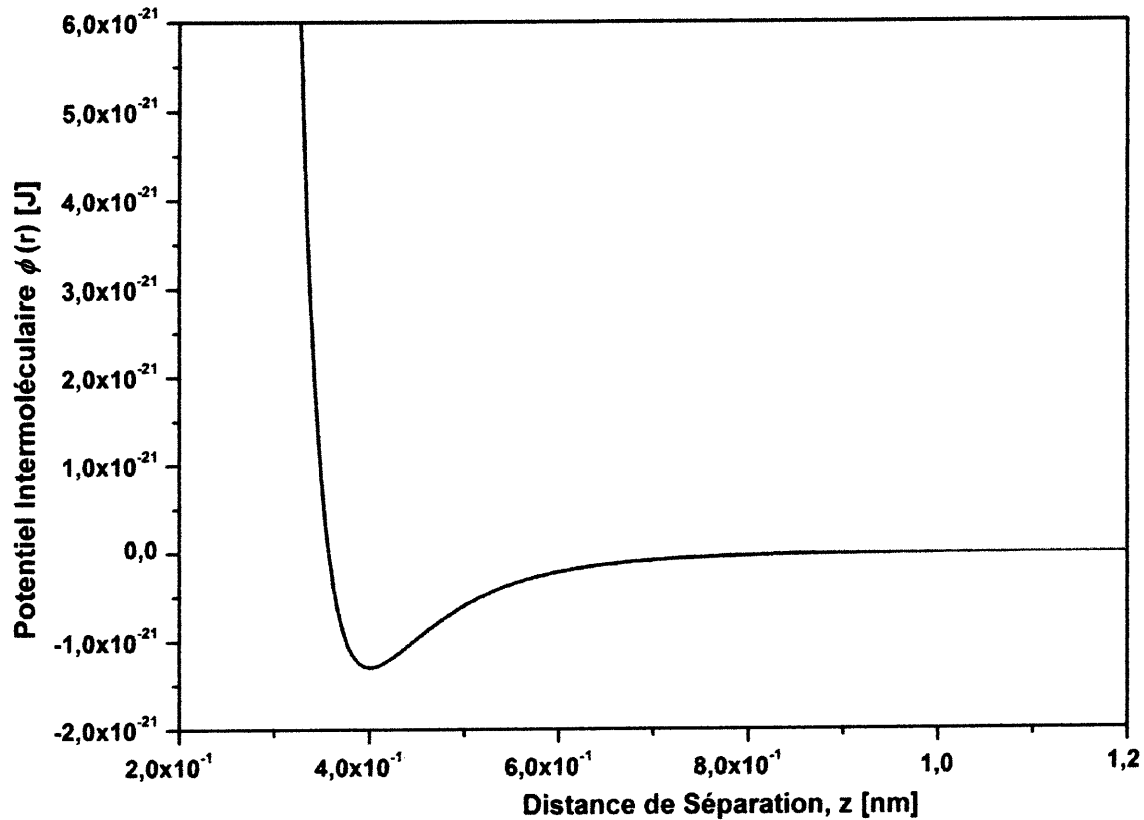


Figure II.2 Potentiel L-J entre deux molécules d'azote.

Forces intermoléculaires :

La force exercée entre deux molécules est la dérivée du potentiel d'interaction ϕ suivant la normale. Généralement si $\phi(r) = \phi(x, y, z)$;

$$\vec{F} = -\overrightarrow{\text{grad}} \phi \quad \text{II. 7}$$

Dans le cas général $\phi = \phi(x, y, z)$:

$$\vec{F} = -\left[\frac{\partial \phi}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial \phi}{\partial z} \vec{k} \right]$$

Si $\phi = \phi(r)$,
$$F(r) = -\frac{d\phi(r)}{dr} \quad \text{II. 8}$$

Un signe positif de la force signifie qu'il y a répulsion,
 $F(r) > 0$ pour $r < r_0$.

Un signe négatif de la force signifie qu'il y a attraction,
 $F(r) < 0$ pour $r > r_0$.

II.2 Potentiel entre une molécule de gaz et une paroi solide.

Soit une molécule de gaz située près d'une paroi solide. Entre chaque atome de la paroi et la molécule de gaz existe un potentiel donné par (II.5) avec des valeurs de σ et ε bien déterminées. La sommation de tous les potentiels, entre la molécule de gaz et tous les atomes de la paroi, nous donne le potentiel d'interaction total entre la molécule de gaz et la paroi.

La figure ci-dessous illustre l'interaction entre deux molécules gaz-solide.

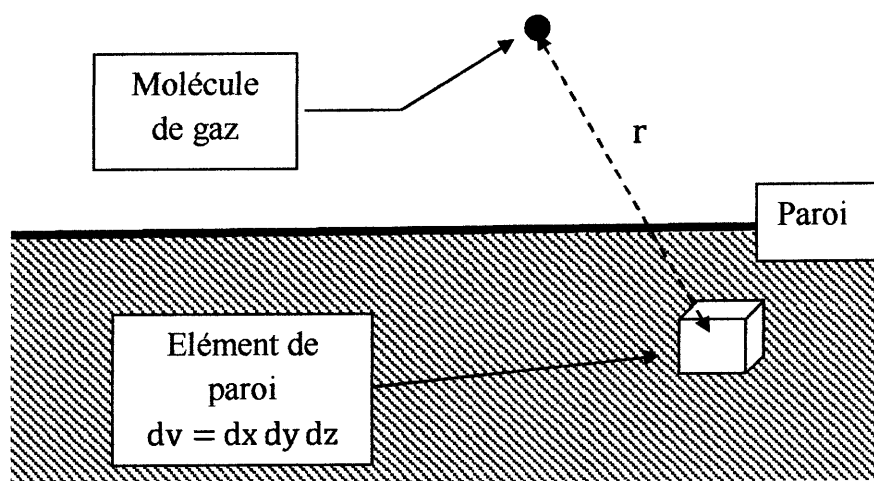


Figure II.3 Interaction gaz-paroi solide.

Ici r , est la distance entre les centres de la molécule de gaz et l'élément de volume dv de la paroi de taille infiniment petite.

Soit que η est le nombre d'atomes de solide par unité de volume, la densité en atomes du solide, en atomes/m³. Pour un élément de paroi dv il y'a ηdv atomes, le

paramètre η dépend de la masse molaire du solide M_s et sa masse volumique ρ_s . On peut calculer sa valeur à l'aide de l'expression II.9 [12]:

$$\eta = \frac{\rho_s \cdot N_A \cdot 10^3}{M_s} \quad \text{II.9}$$

Le tableau suivant donne les valeurs de η pour quelques solides :

	M_s [g/mol]	ρ_s [kg/m ³]	η [atomes/m ³]	η [atomes/nm ³]
Graphite(C)	12	2260	11,34x10 ²⁸	113,4
Fer (Fe)	56	7860	8,45x10 ²⁸	84,5
Nickel (Ni)	59	8900	9,08x10 ²⁸	90,8
Or (Au)	197,2	19300	5,89x10 ²⁸	58,9

Tableau II.1 Densité en atomes pour différents solides.

Soit $\phi(r)$ le potentiel d'interaction entre une molécule du gaz et un atome du solide, le potentiel d'interaction total est donné par l'intégral sur tous le volume du solide,

$$U = \int_V \phi(r) \cdot \eta \cdot dv \quad \text{II.10}$$

II.2.1 Expression du potentiel entre une molécule de gaz et un Demi-bloc infini.

Pour une molécule située à une distance z perpendiculairement d'un demi-bloc infini (paroi plane infinie), (Figure II.3), l'intégration du potentiel sous la forme générale de Mie donne [12] :

$$U_P = 2\pi\eta \left[\frac{A}{(n-2)(n-3)} \frac{1}{z^{n-3}} - \frac{B}{(m-2)(m-3)} \frac{1}{z^{m-3}} \right] \quad \text{II.11}$$

Pour le potentiel de Lennard-Jones ($n=12$, $m=6$) on aura :

$$U_P(z) = \pi\eta \left[\frac{A}{45} \frac{1}{z^9} - \frac{B}{6} \frac{1}{z^3} \right] \quad \text{II. 12}$$

Dans l'expression II.12 l'unité de $U_P(z)$ est le Joule/molécule de gaz.

II.2.2. Expression du potentiel entre une molécule de gaz et deux Demi-blocs infinis.

Lorsque la molécule est située entre deux blocs parallèles séparés d'une distance h , comme montré dans la figure II.4 on peut déduire l'expression de potentiel total comme suit,

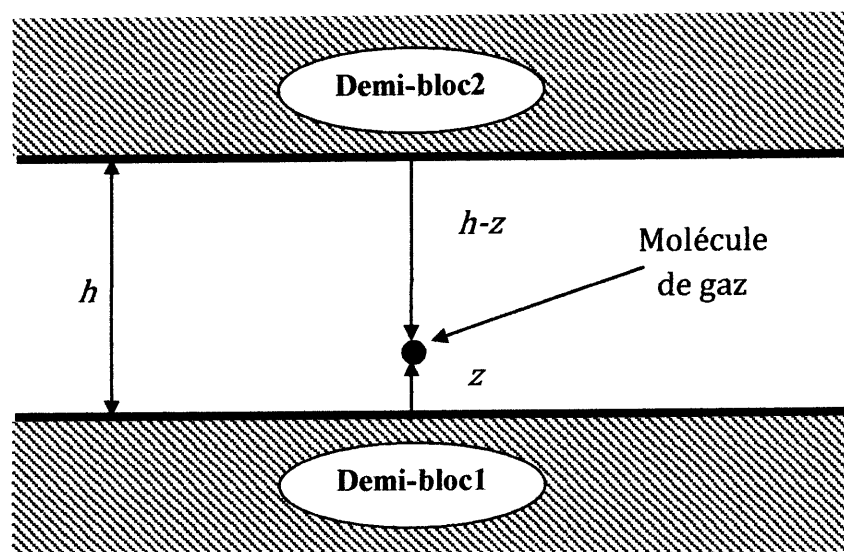


Figure II.4 Deux demi-blocs infinis séparés d'une distance h formant un canal

Ayant, U_{P_1} le potentiel de la molécule par rapport au bloc 1, $U_{P_1} = U_P(z)$ et U_{P_2} est le potentiel de la molécule par rapport au bloc 2, $U_{P_2} = U_P(h - z)$. Le potentiel total U_C dans le canal est donné par l'intégrale,

$$U_C = \int_v \phi(z) \cdot \eta \cdot dv = \int_{v_1} \phi(z) \cdot \eta \cdot dv + \int_{v_2} \phi(z) \cdot \eta \cdot dv$$

$$= U_{P_1} + U_{P_2}$$

En résumé le potentiel total U_C d'une molécule par rapport à deux blocs est la somme des deux potentiels U_{P_1} et U_{P_2} .

$$U_C(z) = U_P(z) + U_P(h - z) \quad \text{II. 13}$$

Règle de Lorentz-Berthelot [13]

Dans le cas d'interaction entre deux molécules non-identiques pour qui les paramètres ε et σ sont différents, le puits de potentiel et le diamètre de collision sont donnés par la règle de combinaison de Lorentz-Berthelot.

$$\sigma_{12} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2} \text{ et } \varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1 \cdot \varepsilon_2} \quad \text{II. 14}$$

Le tableau II.2 réunit les valeurs des paramètres de Lennard Jones pour le graphite et l'azote et le résultat que donne la règle de combinaison.

	Azote, N ₂	Graphite, C	La combinaison
ε (J)	0,0416 10 ⁻²⁰	0,129710 ⁻²⁰	0,07347 10 ⁻²⁰
σ (nm)	0,3572	0,3416	0,3494

Tableau II.2 Paramètres L-J pour le système azote (N₂) – graphite (C) [11].

Sur la figure II.5 est représentée l'allure du potentiel molécule-paroi, sur l'exemple du couple Azote–graphite.

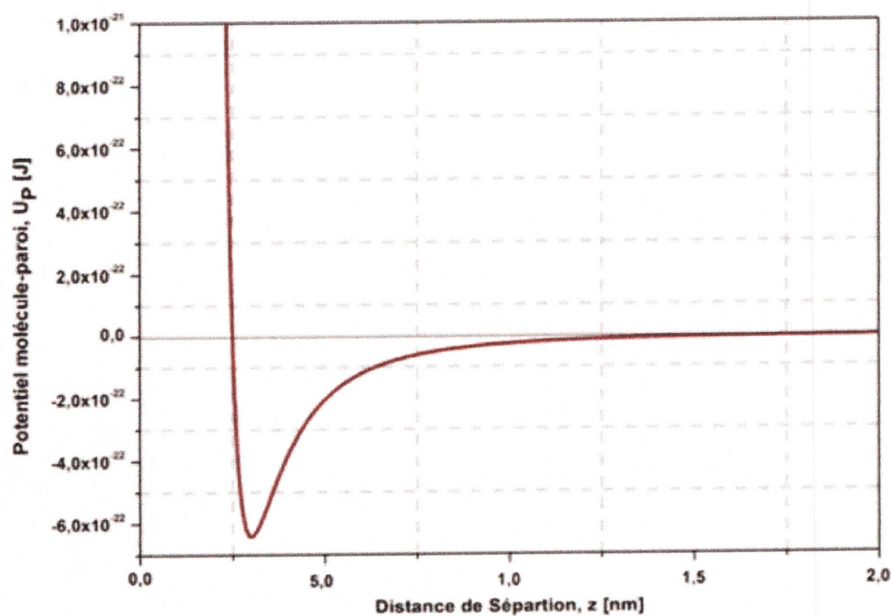


Figure II.5 Potentiel d'interaction U_p entre une molécule d'azote et une paroi plane de graphite (Demi-bloc infini).

La figure II.6 donne sur le même exemple le potentiel U_c dans un canal de distance de séparation $h = 20$ nm.

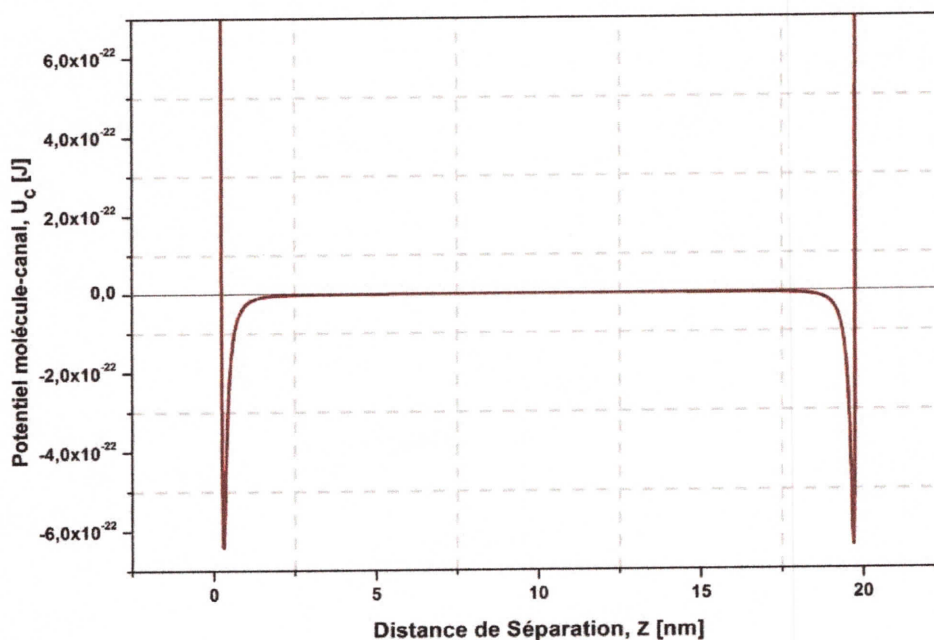


Figure II.6 Potentiel d'interaction U_c entre une molécule d'azote au voisinage des parois d'un canal de 20 nm.

II.3 Force exercée au voisinage de la paroi

Comme présenté précédemment, le potentiel d'interaction engendre une force qui dérive ce dernier. Très près de la paroi, les molécules de gaz seront repoussées par des forces de répulsion, plus loin de la paroi, elles sont soumises à des forces d'attraction, celles-ci agissent à une distance relativement plus grande que les force de répulsion.

C'est justement l'existence de ces forces qui nous a poussés à nous interroger sur leur effet lors d'un écoulement. Cela d'autant plus que nous n'avons pas rencontré de travaux antérieurs qui prennent en compte leur existence à l'exception de ceux relatifs à la simulation directe de la dynamique moléculaire.

Dans le cadre de notre travail il est primordial de trouver l'expression de ces forces sous la forme qui nous permet de les introduire dans les équations de mouvement de Navier-Stokes. La force exercée par la paroi sur une molécule de gaz en fonction de la distance de séparation z est,

$$F_P = -\frac{\partial U_P(z)}{\partial z} = \pi \cdot \eta \left[\frac{A}{5} \frac{1}{z^{10}} - \frac{B}{2} \frac{1}{z^4} \right] \quad \text{II. 15}$$

Dans le cas d'un canal d'ouverture h La force entre la molécule de gaz et les deux demi-blocs est,

$$\begin{aligned} F_C &= -\frac{d}{dz} (U_P(z) + U_P(h-z)) \\ &= -\frac{dU_P}{dz} - \frac{dU_P(h-z)}{d(h-z)} \frac{d(h-z)}{dz} \end{aligned}$$

d'ou

$$F_C = F_P(z) - F_P(h-z) \quad \text{II. 16}$$

La figure II.7 donne l'allure de la force qu'exerce la paroi de graphite sur une molécule d'azote en Newton. La figure II.9 représente la force que subit une molécule dans un canal de 20 nm. Le signe de la force (attraction ou répulsion) et considéré par rapport à la paroi de gauche sur laquelle se trouve l'origine de l'axe z .

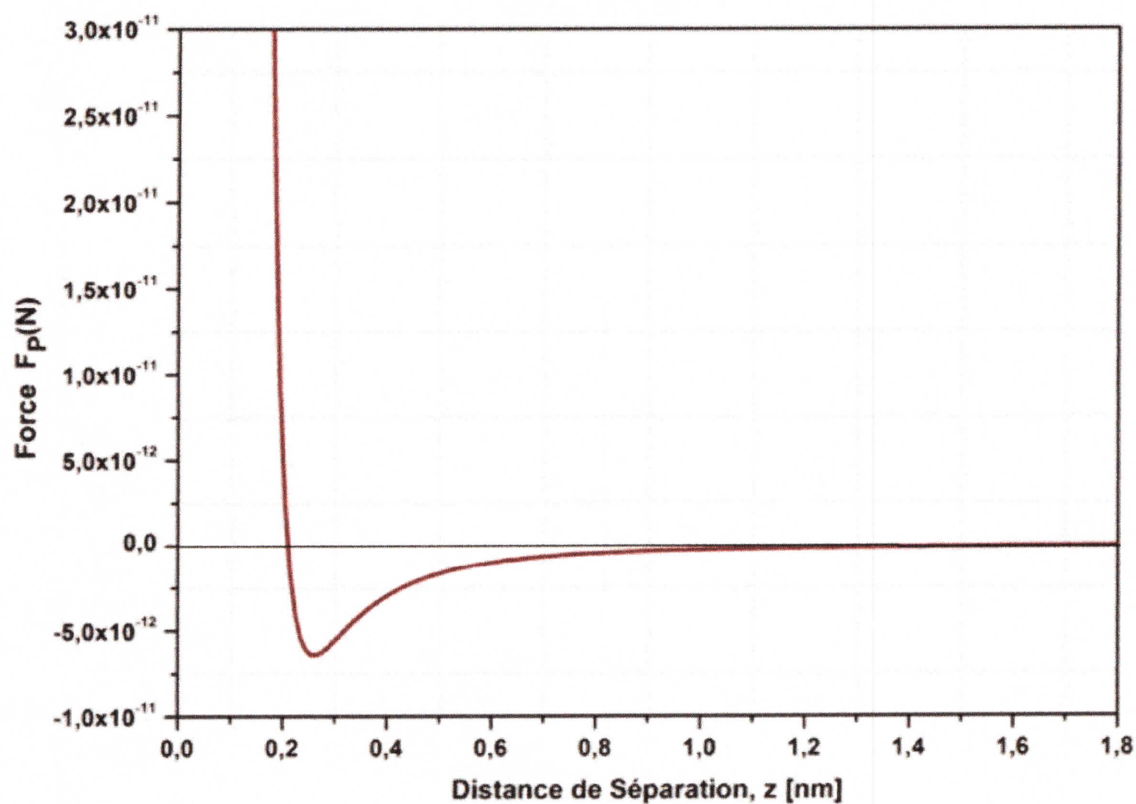


Figure II.7 Force exercée par un demi-bloc de graphite sur une molécule d'azote

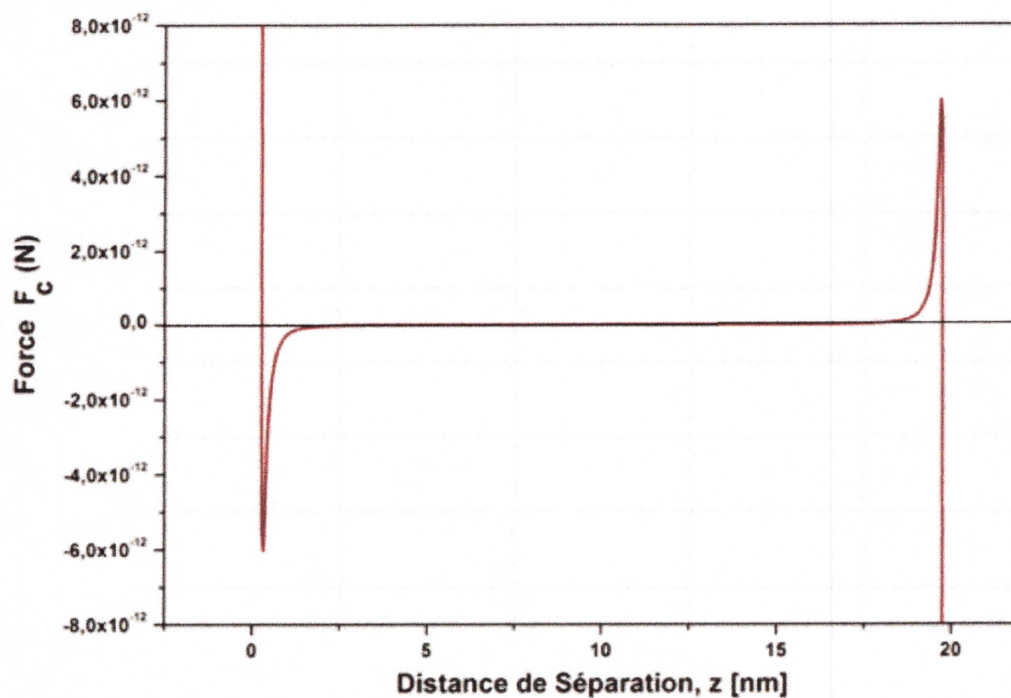
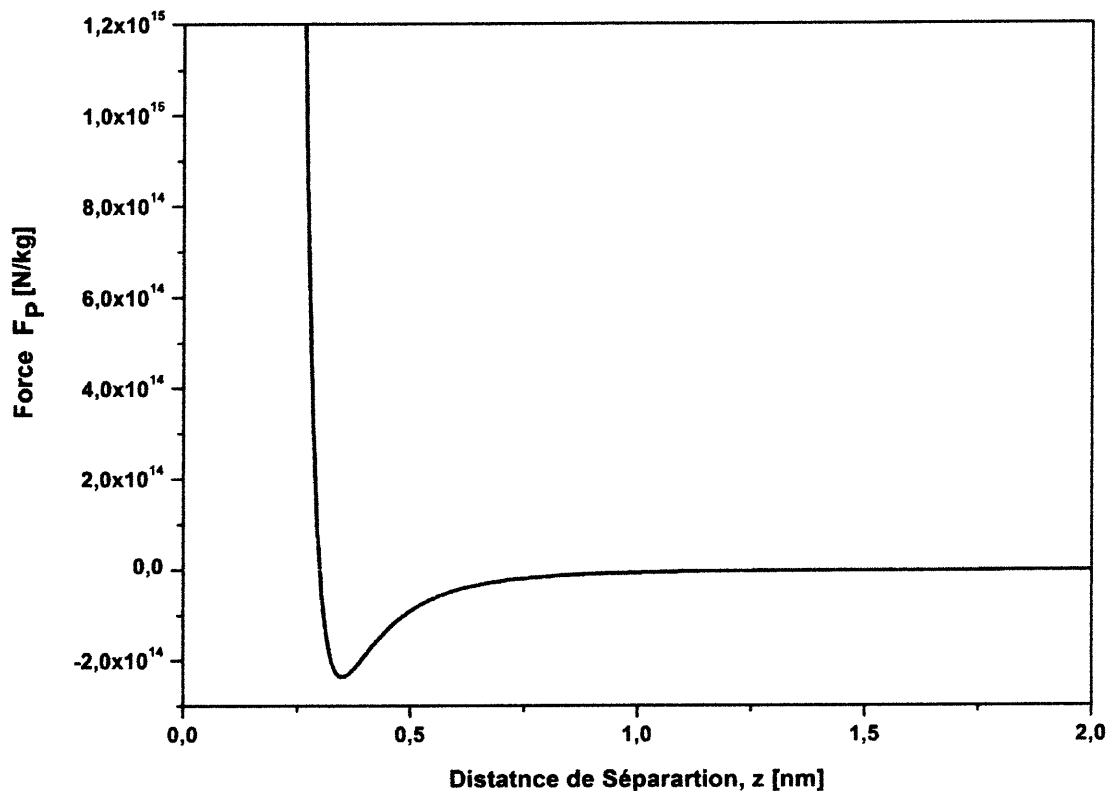


Figure II.8 Force subie par une molécule d'azote dans un canal de graphite de 20 nm

On peut exprimer les forces $F_p(z)$ et $F_c(z)$ en unité massique ou volumique. C'est-à-dire en (N/kg) ou (N/m³). Il suffit de diviser par la masse moléculaire ou le volume moléculaire respectivement.

Pour une molécule on a une masse $\frac{M_g 10^{-3}}{N_A}$ et un volume $\frac{M_g 10^{-3}}{\rho_g \cdot N_A}$ avec M_g la masse molaire du gaz et ρ_g sa masse volumique.

Pour donner une idée sur l'intensité de ces forces au voisinage d'une paroi en unité massique nous avons tracés la figure II.9



*Figure II.9 Force molécule-paroi en unité massique
Couple Azote-Graphite.*

On remarque l'extrême intensité de ces forces, comparées à la gravité elles la dépasse par un facteur de 10^{13} .

II.4 Distribution de la pression près de la paroi [14]

La force exercée sur le gaz tend à le comprimer comme dans le cas de la gravité qui comprime l'atmosphère du haut vers le bas. De façon similaire au cas de la gravité la variation de la pression dP sur une distance dz s'exprime par,

$$dP(z) = \rho \cdot G_p \cdot dz \quad \text{II. 17}$$

Où G_p est la force d'interaction en unité massique, $G_p = \frac{Na}{M_g \cdot 10^{-3}} \cdot F$

Sachant que $k_B = \frac{R}{Na}$ et $\frac{P}{\rho_g} = Z \cdot \frac{R}{M_g \cdot 10^{-3}} \cdot T$. L'équation II.17 permet d'écrire :

$$\frac{dP}{P} = -\frac{dU_p}{Zk_B T} \quad \text{II. 18}$$

Comme $Z = Z(P)$, l'intégration de II.18 sera,

$$\int_{P_0}^P Z \frac{dP}{P} = \int_{U_{P_0}}^{U_P} -\frac{dU_p}{k_B T} = -\frac{1}{k_B T} (U_P - U_{P_0})$$

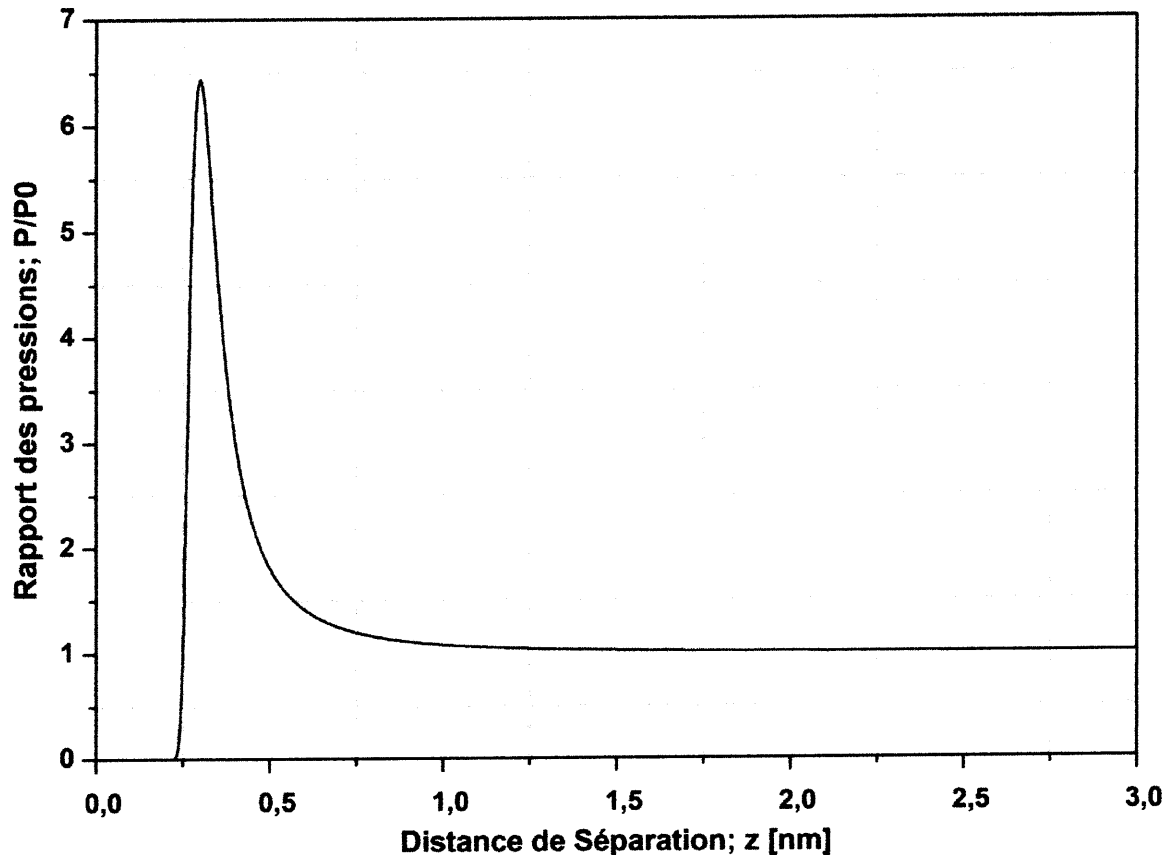
Si on prend U_{P_0} celui de l'état loin de la paroi où $U_{P_0} = 0$ et $P = P_0$ on aura,

$$\int_{P_0}^P Z \frac{dP}{P} = -\frac{U_p(z)}{k_B T} \quad \text{II. 19}$$

Dans le cas d'un gaz parfait : $Z=1$, cela donne :

$$\frac{P}{P_0} = \exp\left[-\frac{U_p(z)}{k_B T}\right] \quad \text{II. 20}$$

La figure II.10 représente l'allure du rapport $\frac{P}{P_0}$ au voisinage de la paroi.



*Figure II.10 Distribution de la pression près de la paroi, l'azote
Est supposé gaz parfait.*

II.5 Résumé

Dans ce chapitre, nous avons détaillé certains points relatifs aux interactions intermoléculaires et nous avons présenté les développements qui vont nous permettre de tenir compte de ces forces dans les équations de Navier-Stokes. Qualitativement on peut résumer que ces forces agissent à des distances relativement courtes cependant elles sont d'une très grande intensité qui affectent les propriétés du fluide et sans aucun doute l'écoulement aussi.

CHAPITRE III :

OUTILS DE SIMULATION

III.1. Introduction

On peut traduire un modèle physique par un système d'équations, afin de résoudre ce dernier, la méthode analytique n'offre pas toujours la solution. L'utilisation des méthodes numériques est alors incontournable pour arriver à une solution. Parmi ces méthodes, on peut citer la méthode des éléments finis, différences finies et volumes finis.

Le progrès et l'explosion informatique nous offrent une diversité de logiciels qui permet la simulation des problèmes physiques et assurent la résolution numérique des systèmes d'équations complexes. Les secteurs d'application de la simulation sont très vastes, nombreux et divers. La simulation présente beaucoup d'avantages :

- Elle fournit une méthode de résolution plus simple quand les procédures mathématiques sont complexes et difficiles.
- Dans certains cas, la simulation est le seul moyen pour obtenir une solution ou bien comprendre un phénomène physique.
- Elle permet à l'expérimentateur d'observer et d'interagir avec le système par conséquent elle peut être employée dans l'ingénierie et la conception des produits (étudier les conséquences d'un modèle dans toutes sortes de conditions avant de le produire), également on peut étudier des situations qui seraient dangereuses dans la vie réelle (Sécurité aéronautique par exemple).

En ce qui nous concerne, notre intérêt porte sur les logiciels destinés à la dynamique des fluides citons par exemple, Abaqus, Openfoam, Fluent et Comsol Multiphysique. Ces outils informatiques sont capables de modéliser les écoulements des fluides, leurs propriétés (pression, vitesse, masse volumique.....) et l'effet de leur environnement (transfert thermique, forces extérieures....).

Il faut bien retenir que les valeurs finales obtenues par une simulation sont seulement des solutions approchées des valeurs réelles.

III.2 Choix du logiciel Comsol Multiphysique 4.3

Mes premiers pas de la simulation étaient avec Fluent et Gambit, le premier est un solveur basé sur la méthode des volumes finis et le deuxième est un préprocesseur qui sert à définir la géométrie, faire le maillage et introduire les conditions aux limites. Dans certains cas on rencontre des conditions aux limites spécifiques ou bien on tombe dans des situations qui nous obligent de modifier les équations du model physique. Pour les modeler par Fluent, nous avons besoin de définir des fonctions et d'ajouter des sous programmes (UDF, User Define Function) en langage 'C'. Cette tâche nécessite la bonne maîtrise et des connaissances suffisantes de ce langage.

Comme nous avons déjà vu dans le chapitre précédant dans notre cas d'étude, il faut prendre en compte une force similaire à une force de gravité. Cette dernière n'est pas constante, son expression contient des variables (coordonnées, masse volumique...). Après plusieurs tentatives durant les premiers mois de notre travail, nous n'avons toujours pas pu introduire cette force dans le code de calcul Fluent car ce dernier n'accepte qu'une force constante dont la valeur est introduite dans la fenêtre correspondante. La force sous forme de fonction n'est pas acceptée comme le montre la figure (III.1).

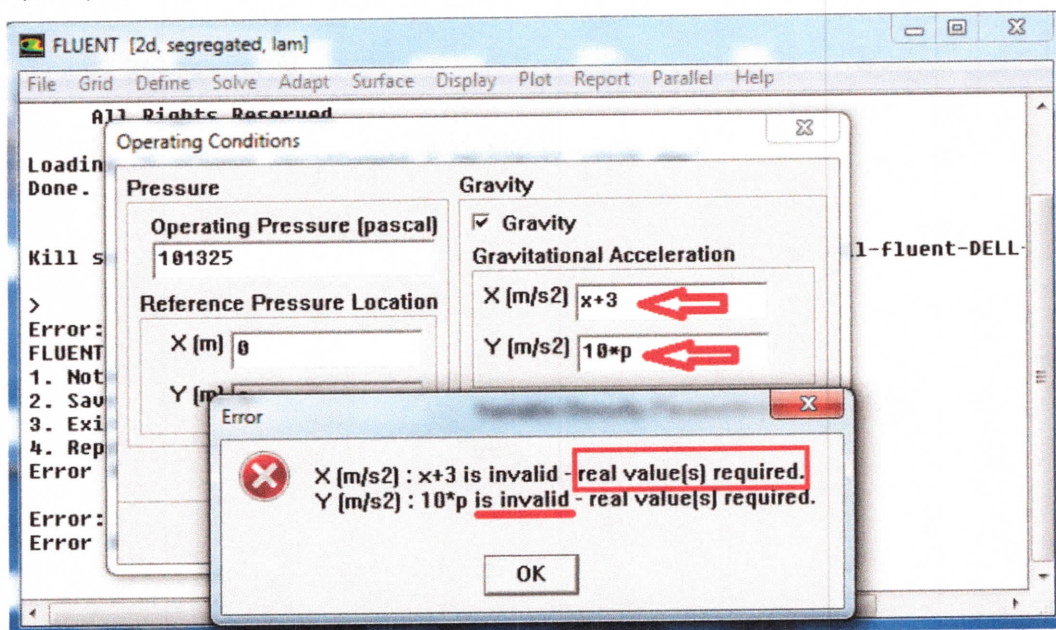


Figure III.1 Obstacle trouvé dans fluent (Refus de force sous forme de fonction).

En résumé la fonction donnant la force ne peut être introduite dans Fluent que par des UDF écrites en langage 'C'. En plus de problème liée à la pris en compte de la force, il n'était pas claire comment introduire la condition de glissement dans la version du Fluent 6.2.16 que nous avons essayé.

Parallèlement à cela, nous nous sommes renseignés sur les autres codes de calculs et leurs capacités, nous avons estimé que les contraintes posées par Fluent nous ne laisse pas beaucoup de temps pour avancer dans notre travail. L'autre code qui est également très utilisée en simulation est Comsol. En explorant ce dernier, nous avons vite remarqué des capacités intéressantes, ce qui nous a amené à opté pour celui-ci, Comsol Multiphysique version (4.3).

Pour rappel Comsol est basé sur la méthode des éléments finis que nous aborderons dans la suite du chapitre. Ce code de calcul est impressionnant par les capacités qu'il comporte, il intègre son propre mailleur et utilise Matlab comme langage de programmation (plus accessible que le langage C).

Comsol Multiphysique peut virtuellement modeler tout phénomène physique qu'un ingénieur ou un scientifique peut décrire avec des équations aux dérivées partielles (PDE), y compris transfert de chaleur, écoulement de fluide, acoustique, radio fréquence, électrostatique, électrochimie, ...etc. On a également la possibilité de coupler plusieurs modèles physiques.

La bibliothèque de Comsol contient plusieurs tutoriels qui permettent de guider pas à pas pour réaliser différents modèles types avec des explications bien détaillées et d'une manière simple et compréhensible.

D'une façon générale le choix pour l'utilisation de Comsol ou de Fluent dépend en réalité du problème rencontré et de l'aptitude du logiciel à le résoudre sans forcément signifier que Comsol serait meilleur que Fluent. Dans notre cas c'est Comsol qui nous a apparu le plus adapté.

Pour notre cas d'étude Comsol assure la modélisation des écoulements raréfiés, modèles physiques (Rarefied Flow), parmi ces modèles on trouve l'écoulement en régime glissant (slip flow) qui est l'axe de notre étude. Pour introduire la condition aux limites vitesse de glissement qu'on a vu dans le chapitre I, il suffit de quelques clics, son ajout ne demande pas de programmation et ne pose pas de difficulté particulière. Concernant la prise en compte de la force due aux interactions, contrairement à Fluent, Comsol Multiphysique permet de l'introduire directement sous forme de fonction sans programmer une UDF. Cela est illustré dans la figure III.2.

Il est à remarquer que dans Comsol les forces extérieures figurant dans les équations de Navier-Stokes sont à introduire en unité de volumique et non pas en unité massique.

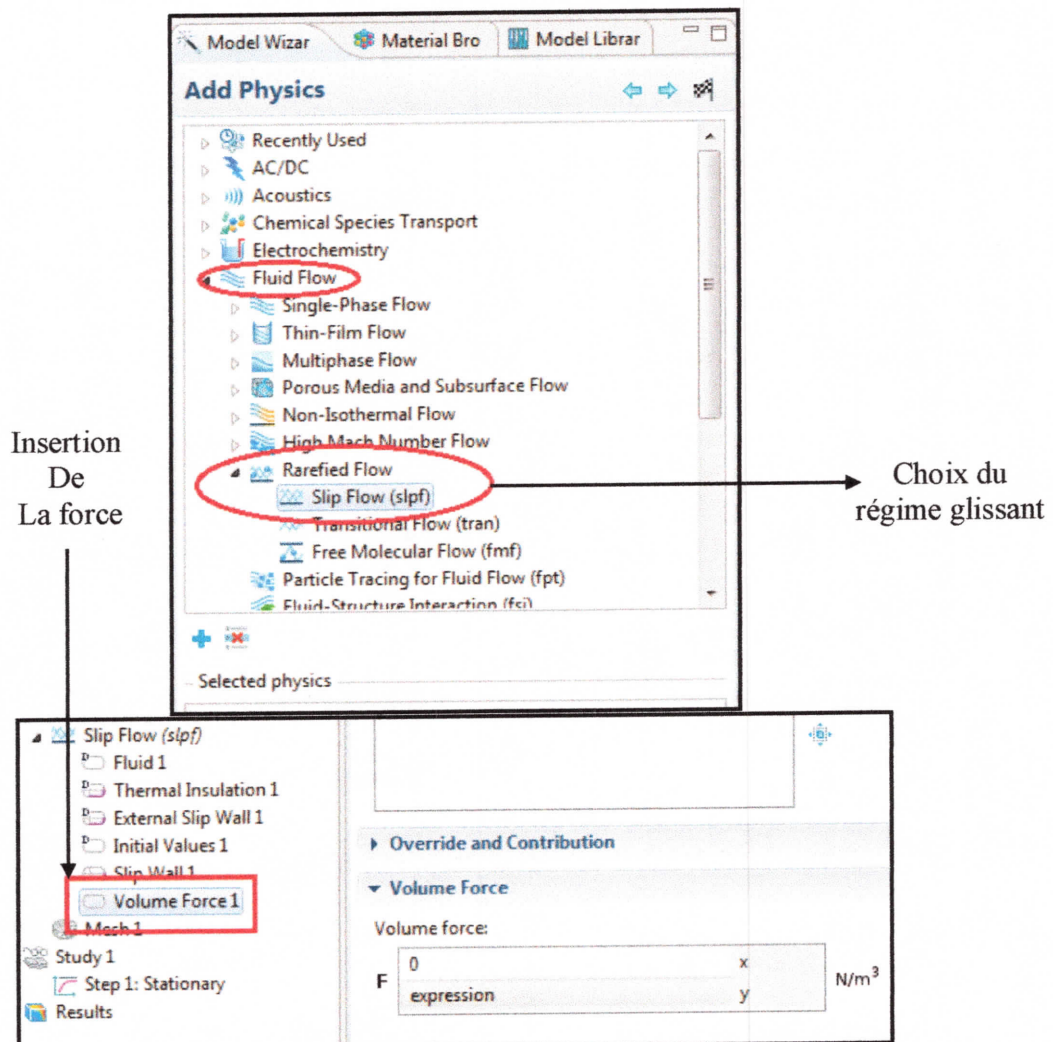


Figure III.2 Convivialité pour l'introduction de la force sous forme de fonction avec Comsol.

III.3 Utilisation de Comsol Multiphysique version 4.3

Comme nous avons mentionné ci-dessus, Comsol est basé sur la méthode des éléments finis que nous présentons brièvement ci-après avant d'aborder l'utilisation et le principe de fonctionnement de ce code.

III.3.1 La méthode des éléments finis

La méthode des éléments finis (MÉF en Français ou FEM en Anglais) est une méthode numérique pour la résolution des équations aux dérivées partielles pour des conditions aux limites données, rencontrées dans divers problèmes d'ingénierie et de physique.

Le principe de la méthode est de diviser le domaine (structure) sur lequel sont définies certaines équations qui caractérisent le comportement physique du problème en une série de sous-domaines non sécants entre eux appelés éléments finis. L'ensemble des éléments finis forme une répartition du domaine, on l'appelle discrétisation (figure III.3).

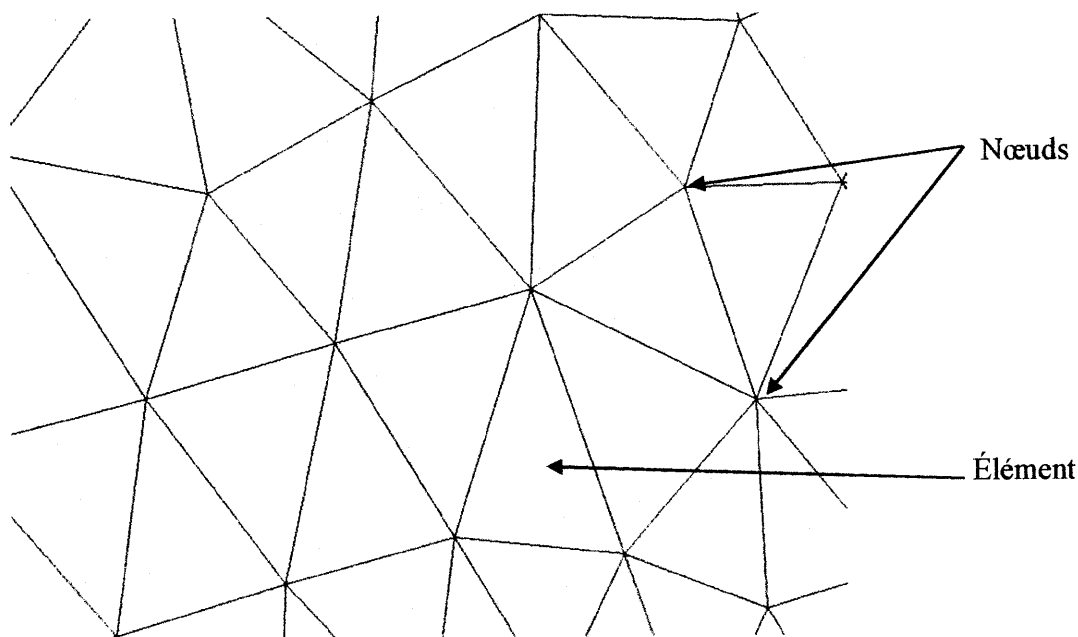


Figure III.3 Exemple de discrétisation en éléments finis.

La méthode des éléments finis consiste à remplacer le problème différentiel par un problème algébrique afin de trouver une solution approchée, les valeurs des grandeurs inconnues sont stockées aux nœuds entre lesquelles sont faites des interpellations. Il existe une grande diversité d'éléments :

III.3.2 Lancement du code. Etapes principales

La figure suivante schématise les différentes étapes à suivre lors de l'utilisation de Comsol 4.3.

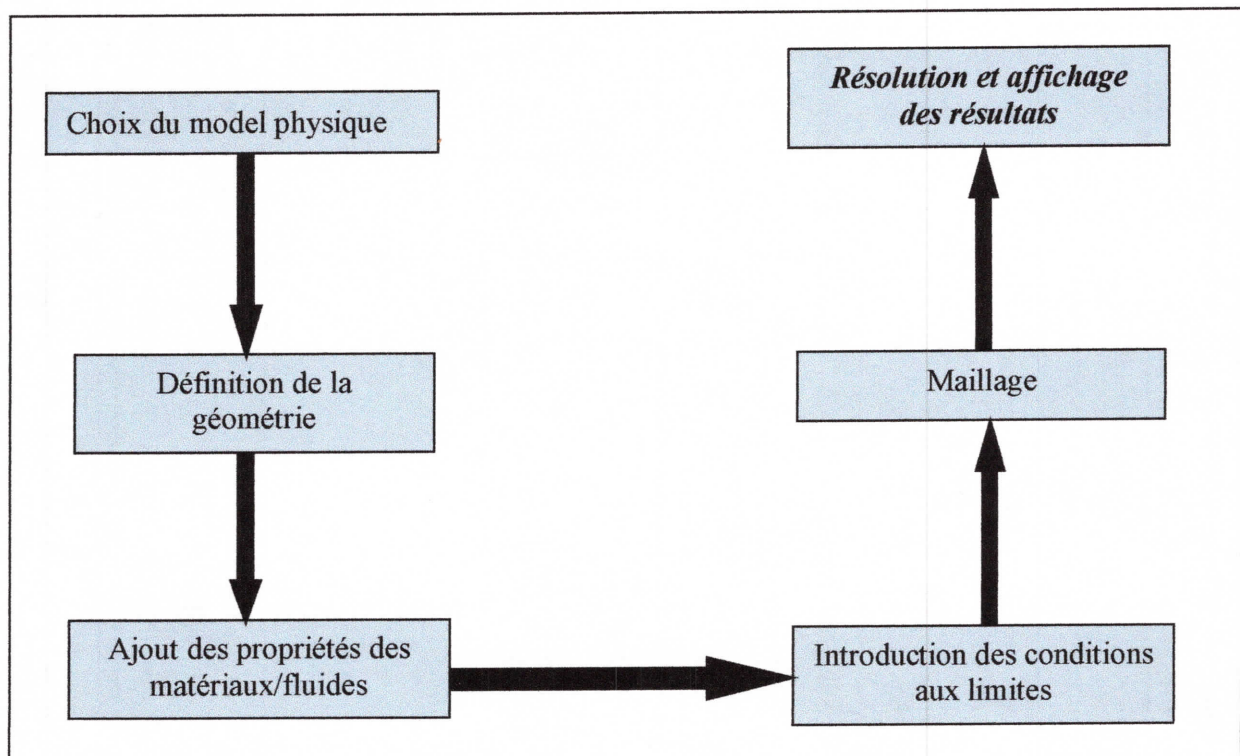


Figure III.4 Etapes suivies pour la résolution d'un problème.

III.4 Modélisation de l'écoulement glissant en présence d'interactions gaz-parois

III.4.1 Création du modèle

Après le lancement du Comsol, on fixe d'abord la dimension d'espace de travail 2D, on sélectionne le régime glissant (Slip Flow) avec régime d'écoulement stationnaire, comme le montre la figure II.5.

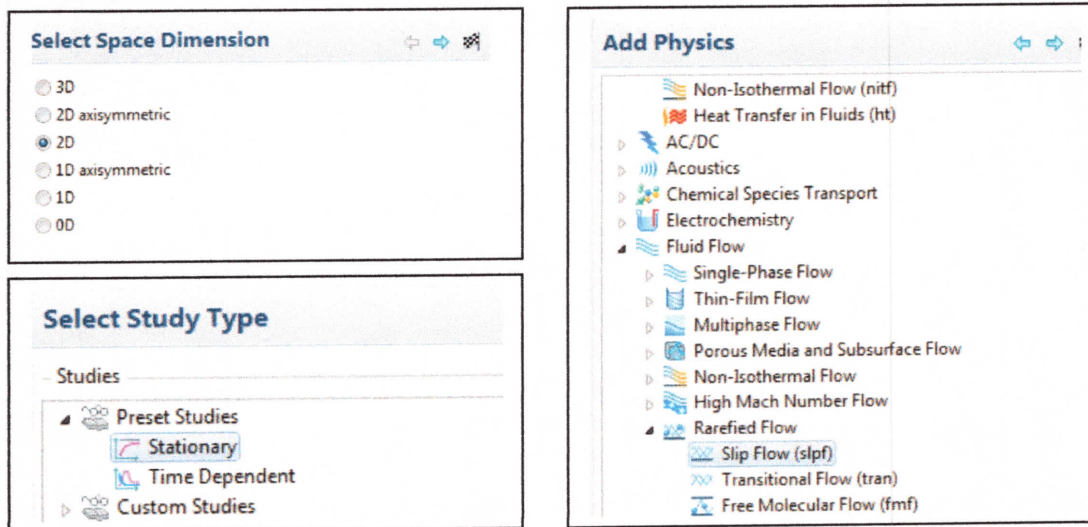


Figure III.5 Création du model par Comsol.

III.4.2 Géométrie

Dans l'interface (Model) et en cliquant sur (Geometry) on crée la géométrie représentée dans la figure III.6. Il s'agit d'un canal de hauteur h et de longueur $l \times h$ relié à deux chambres de dimensions indiquées sur le dessin

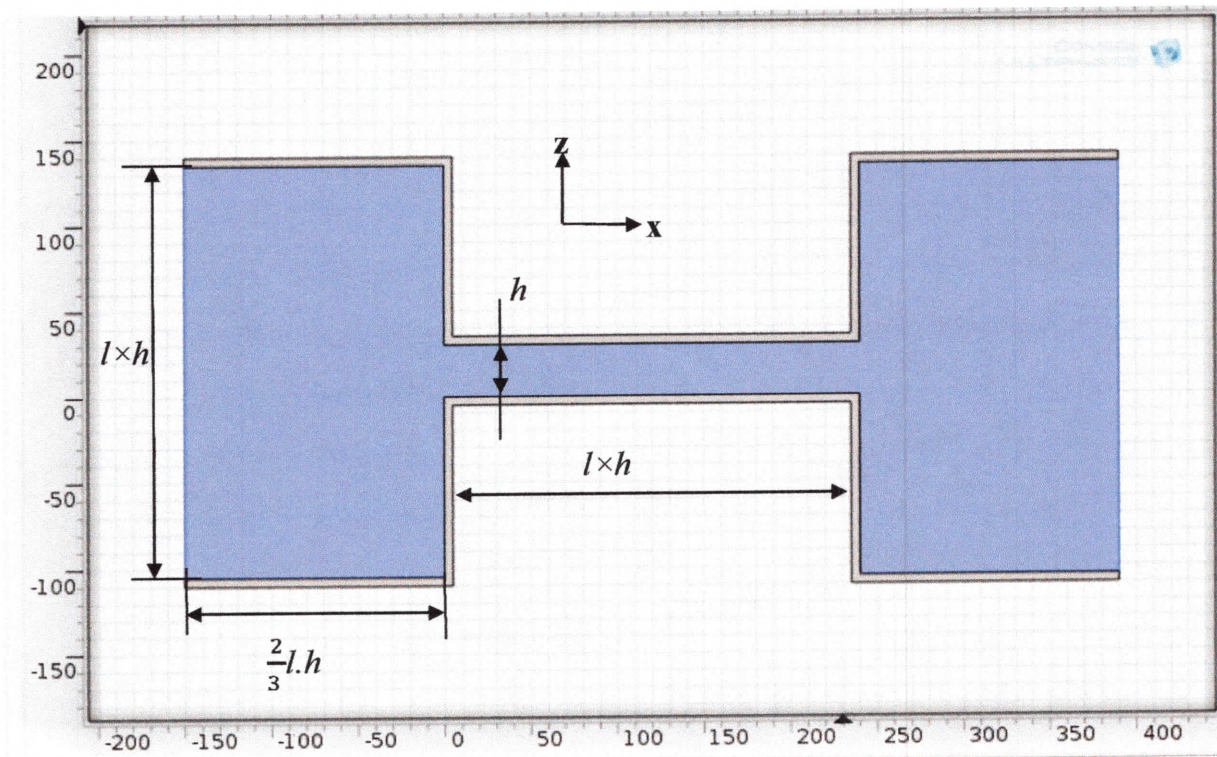


Figure III.6 Création de la géométrie de notre problème.

III.4.4 Propriétés du fluide

Afin de préciser le fluide, l'azote dans notre étude, par rapport à la zone d'écoulement, il suffit de cliquer sur (Materials). On Sélectionne (Nitrogen) pour l'ajouté au domaine d'écoulement. Cela est illustré dans la figure III.7.

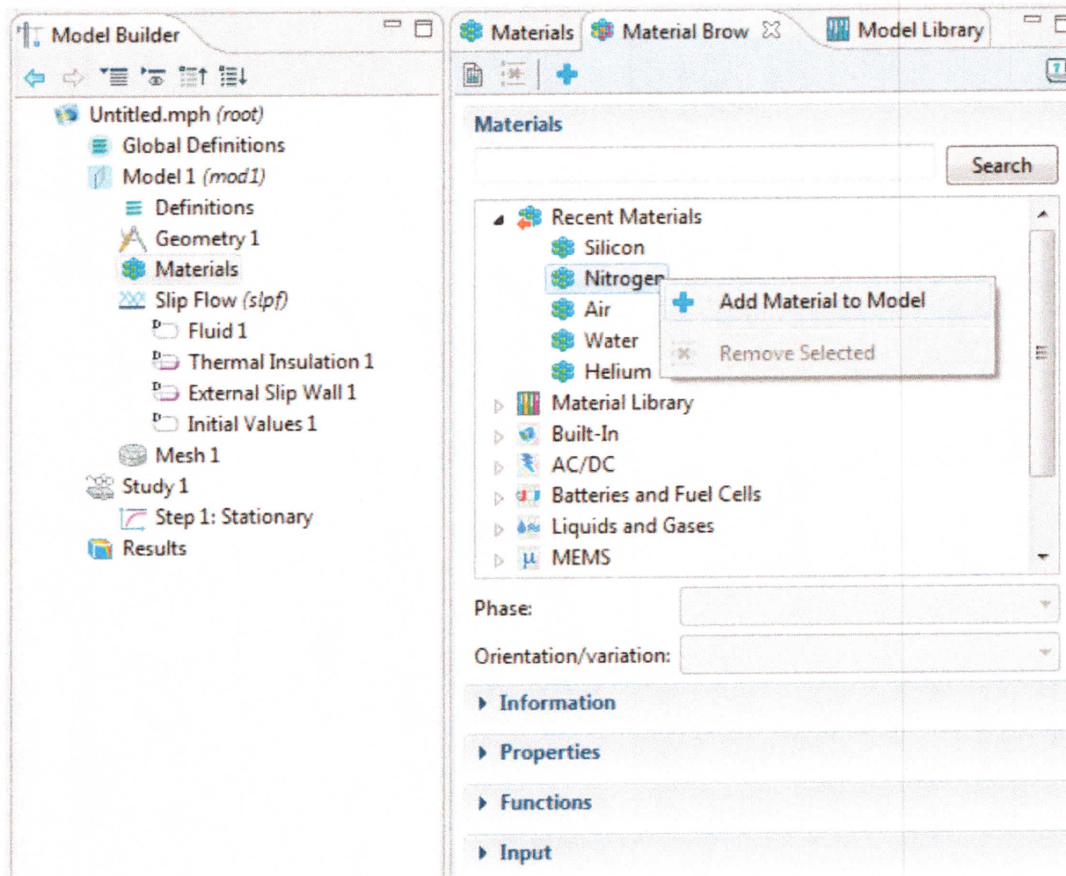


Figure III.7 Choix du fluide de travail.

A noter qu'avec la sélection de (Nitrogen) Comsol laisse le choix pour travailler en fluide incompressible ou en gaz parfait. Vu les niveaux de pression qui seront atteints dans notre cas, nous avons estimé nécessaire de travailler en fluide réel. Pour cela nous avons introduit les propriétés volumétriques de N_2 sous forme de tableau. Comsol peut par interprétation calculer les valeurs au point voulu. Le tableau a été calculé à partir d'un site internet offrant ce service [15]. Le tableau est représenté ci-dessous.

Data source: Table

Function name: rho

t	f(t)
140E5	154.9
130E5	144.3
120E5	133.7
100E5	112.5
80E5	90.47
70E5	79.29
60E5	68.04
55E5	62.385
50E5	56.73
49.9E5	56.6166
49.8E5	56.5032
49.7E5	56.3898
49.6E5	56.2764
49.5E5	56.163

Tableau I.1 Masse volumique de N_2 en fonction de la pression à $T = 298,15K$.

Pour la même raison, c'est-à-dire le niveau de pression élevé, nous avons estimé important de tenir compte de la variation de la viscosité dynamique μ avec la pression. Similairement au cas de ρ nous avons introduit le tableau I.2 donnant $\mu = \mu(P)$ calculé du même site internet.

Data source: Table

Function name: eta

t	f(t)
140E5	21.106E-6
130E5	20.802E-6
120E5	20.498E-6
100E5	19.89E-6
80E5	19.36E-6
70E5	19.11E-6
60E5	18.88E-6
55E5	18.77E-6
50E5	18.66E-6
49.9E5	18.658E-6
49.8E5	18.656E-6
49.7E5	18.654E-6
49.6E5	18.654E-6
49.5E5	18.65E-6

Tableau I.2 viscosité dynamique de N_2 en fonction de la pression à $T = 298,15K$.

III.4.5 Ajout des conditions aux limites

Dans notre étude on se place dans le cas isotherme. On focalise l'étude sur l'hydrodynamique en ignorant le transfert de chaleur. Donc on ne tient pas compte du saut de température aux parois, qui existe aussi en régime de glissement. On s'intéresse seulement au glissement de vitesse. Par défaut Comsol permet d'introduire le glissement de vitesse proposé par Maxwell d'ordre 1 déjà présenté dans le chapitre I.

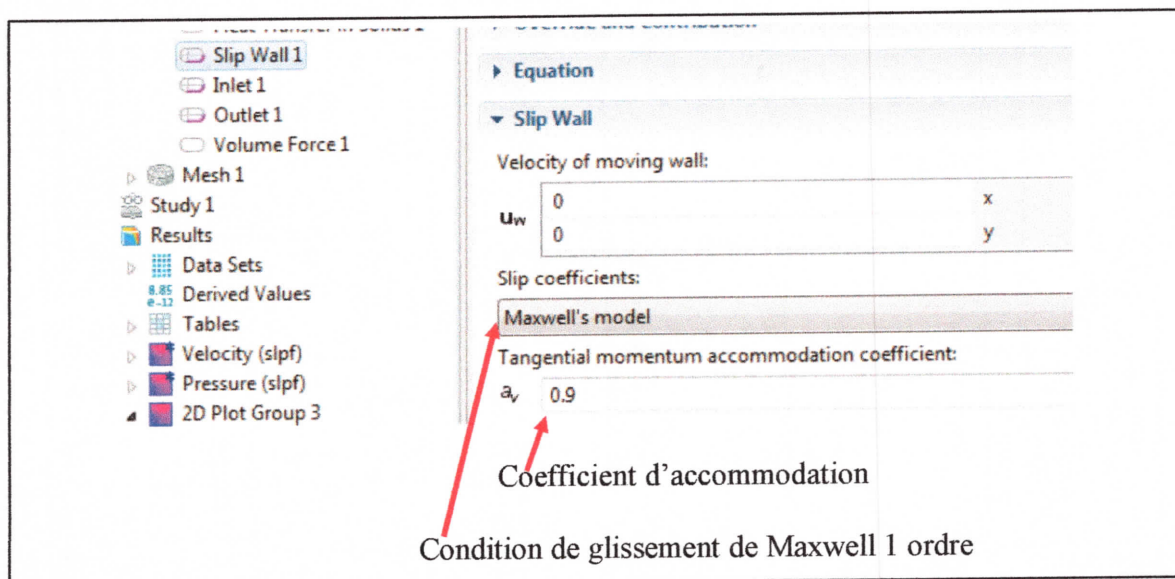


Figure III .8. Sélection de la condition de glissement aux parois.

III.4.6 Incorporation de la force d'interaction

Cette étape est la plus importante dans notre étude, comme nous l'avons expliqué précédemment. Nous rappelons que la force doit être introduite en unité volumique. La figure III.9 indique la procédure à suivre.

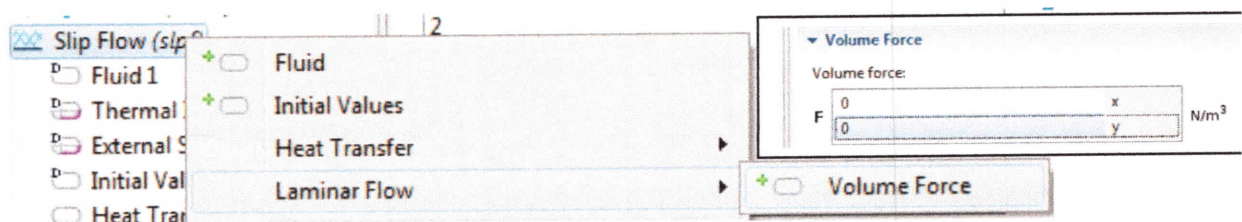


Figure III .9 Incorporation de la force volumique molécule-canal.

L'effet de bord :

L'expression de la force d'interaction présentée dans le chapitre précédent concerne un canal infini. Cependant le calcul que nous allons simuler présente une longueur finie. Près de l'extrémité la force commence à diminuer jusqu'à s'annuler créant ainsi un effet de bord.

La prise en compte exacte de cet effet nécessite l'intégration du potentiel U_c par rapport au coin. Pour un premier travail nous nous sommes limités à introduire le potentiel d'un canal infini en l'annulant empiriquement les forces sur les bords. Mathématiquement nous avons multiplié le potentiel $F_c(x)$ par une fonction $\varphi(x)$ ainsi on aura :

$$F_c(z, x) = F_c(z) \cdot \varphi(x)$$

L'allure de la fonction $\varphi(x)$ est représentée sur la figure III.10.

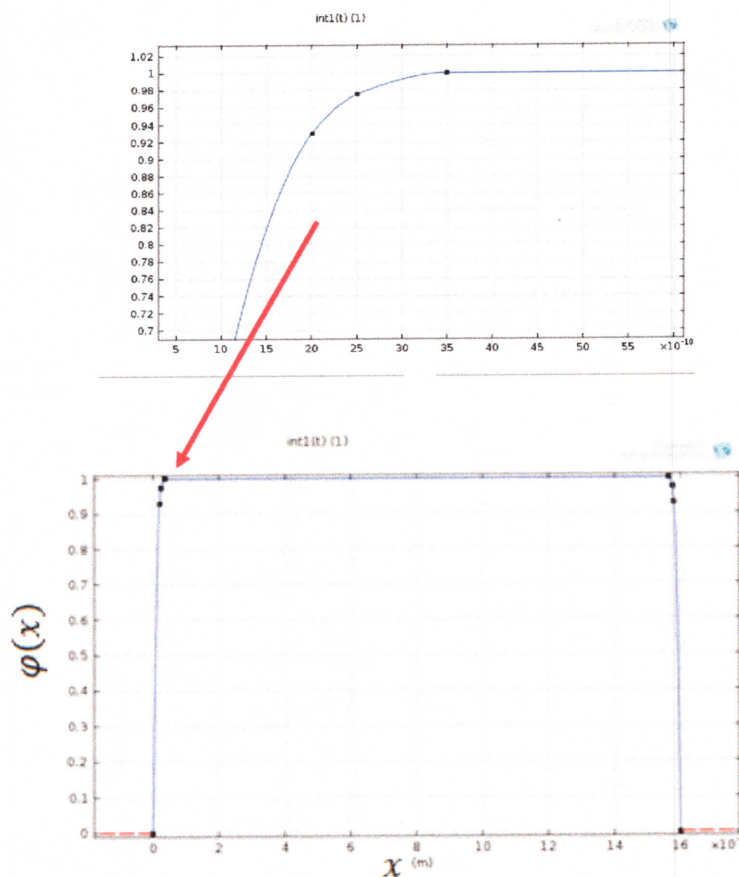


Figure III. 11 L'allure de la fonction $\varphi(x)$.

III.4.7 Maillage

Dans l'interface Comsol on sélectionne (**mesh**) pour mailler le domaine. La figure III.10 donne une illustration du maillage obtenu avec l'élément triangulaire. Comme le montre la figure, le maillage au voisinage des parois du canal est plus fin. Cela pour pouvoir gérer l'allure difficile de la force d'interaction comme le montre la figure III.11.

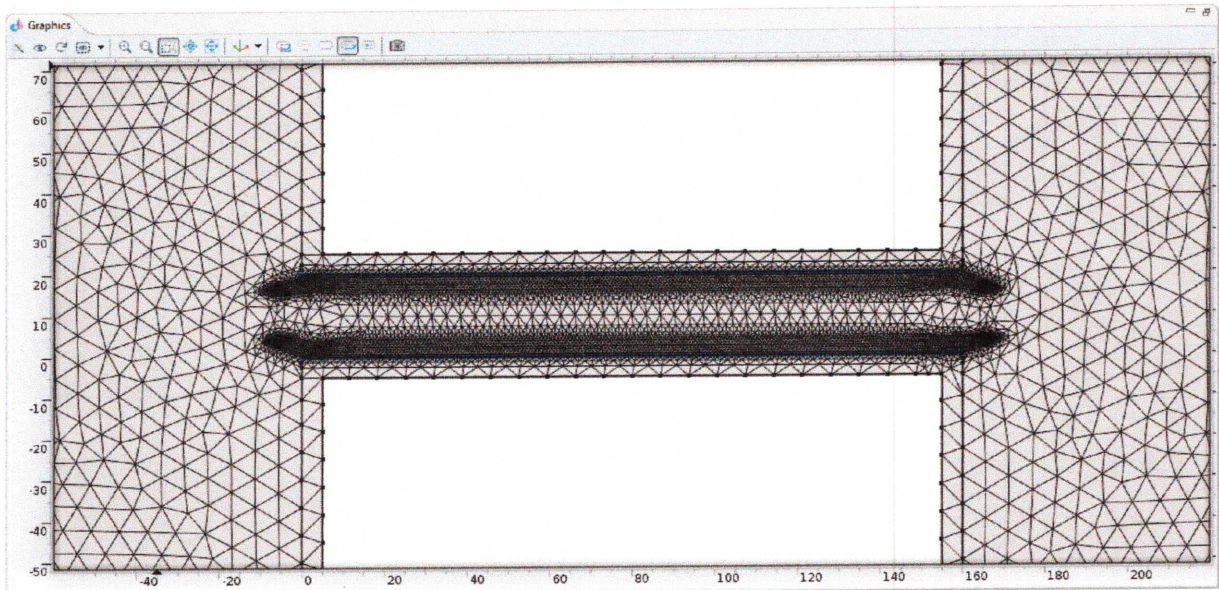


Figure III. 11 Maillage en élément triangulaire.

Nombre des éléments : 9368.

Une fois l'opération terminée, on peut lancer les calculs.

III.5 Résumé

A l'aide de Comsol on est en mesure d'étudier l'écoulement glissant en gaz compressible réel cela en tenant compte de l'effet de la pression sur la viscosité. Nous avons pu aussi introduire la force d'interaction et adapter le maillage vu les variations rapides de cette force près de la paroi.

CHAPITRE IV:

RÉSULTATS ET DISCUSSIONS

IV.I Introduction

Les paramètres de notre simulation sont comme suit,

Géométrie : La géométrie étudié est donnée par la figure III.6 et la figure IV.1.

Nous prenons comme canal de référence celui ayant $h=20$ nm et de longueur $8 \times h = 160$ nm.

Système : Azote-Graphite avec paramètres de Lennard-Jones tels que :

$$\varepsilon = 0,07347 \cdot 10^{-20} \text{ J et } \sigma = 0,3494 \text{ nm.}$$

Propriétés de l'azote : Fluide compressible réel, viscosité fonction de la pression.

Ecoulement : Régime isotherme permanent ($T = 298,15\text{K}$).

Régime de glissement avec condition au limite de Maxwell,

Coefficient d'accommodation $\sigma_v = 0,9$.

Expérimentation numérique : Les simulations sont conduites comme suit,

- La pression dans la chambre côté entrée est fixé telle que $P_e = 50$ bars. Cette valeur est fixée pour garantir un régime de glissement dans le canal.

En effet à l'entrée on a : $\lambda = 1,367$ nm d'où $K_n = \frac{\lambda}{2h} = 0,035$.

- La perte de charge ΔP est variée typiquement dans la plage,

$$0,25 \text{ bar} < \Delta P < 3 \text{ bars.}$$

- Pour chaque valeur de ΔP on calcule le débit massique \dot{m} qui traverse le canal à l'aide de la relation,

$$\dot{m} = \int_0^h \rho(z) \cdot w(z) \cdot dz \quad \text{IV.1}$$

$\rho(z)$ et $w(z)$ sont la masse volumique et la vitesse longitudinale dans une section du canal. A cet effet nous avons programmé la relation(IV.1) dans Comsol. A remarquer que ce débit est calculé pour 1 m de largeur du canal.

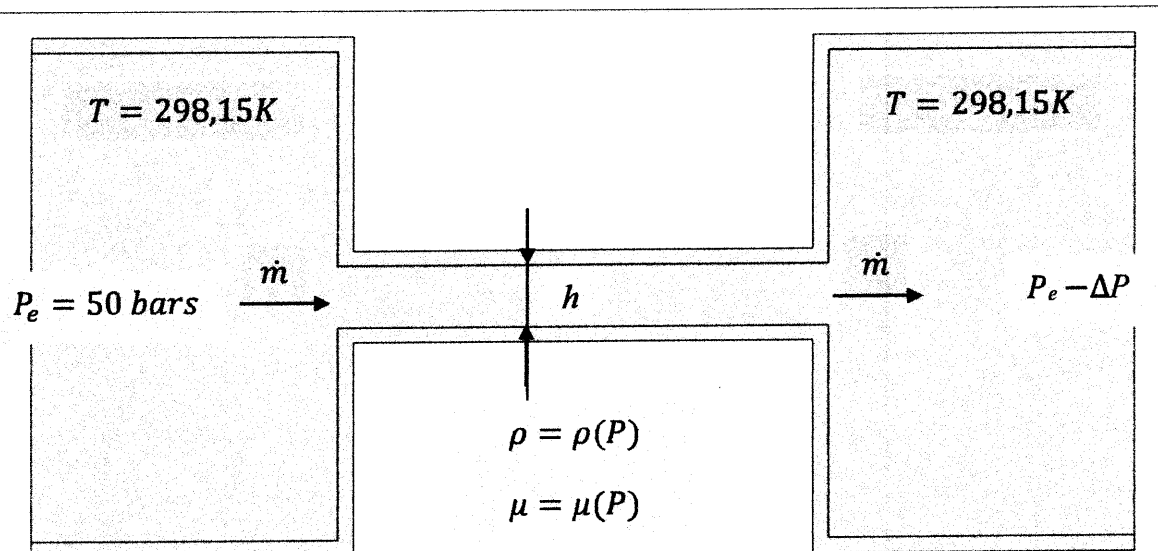


Figure IV.1 Géométrie et paramètres du problème étudié.

La présentation des résultats obtenus est organisée comme suit : Une comparaison générale entre les écoulements sans et avec interaction gaz- paroi. Ensuite on regarde les changements dans l'écoulement en présence d'interaction gaz-paroi à différents débits massiques (perte de charge). On présente ensuite les caractéristiques, Débit (\dot{m})-Perte de charge (ΔP) des écoulements sans et avec interaction gaz-paroi. En dernier lieu on cherche à déterminer la limite à laquelle ces interactions affectent l'écoulement par rapport à l'ouverture (hauteur) h du canal.

IV.2 Effet des forces d'interactions sur l'écoulement

Le but est de montrer à partir de différents champs, les différences importantes qui existent entre un écoulement calculé sans prendre en compte les interactions Gaz-Paroi et celui ou ces effets sont inclus dans le modèle et qui fait l'objet de notre travail.

Ci-dessous sont représentés successivement les champs de : vitesse, pression, Reynolds, Knudsen ainsi que les lignes de courant. Cette partie est réalisée avec une perte de charge $\Delta P = 2 \text{ bars}$.

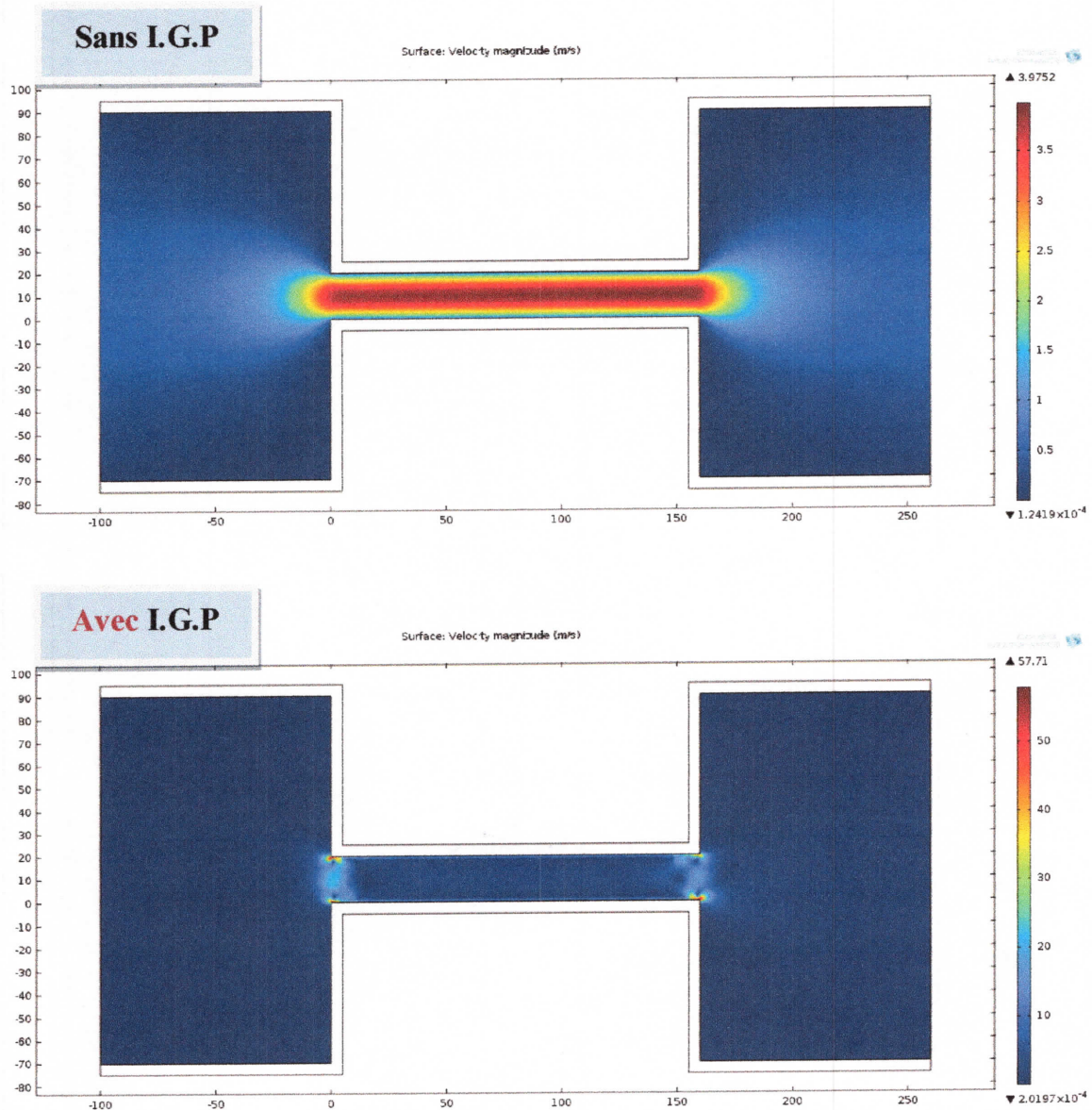


Figure IV.2 Champs de vitesse en m/s. Canal de référence 20 nm X 160 nm, $\Delta P = 2\text{bars}$. Ecoulement sans et avec Interaction gaz-paroi(I.G.P).

LA figure IV.2 montre que les vitesses les plus grandes se situent au niveau des coins où il y'a un développement de tourbillons. A remarquer que l'échelle des couleurs est différente pour les deux cas, sans et avec I.G.P.

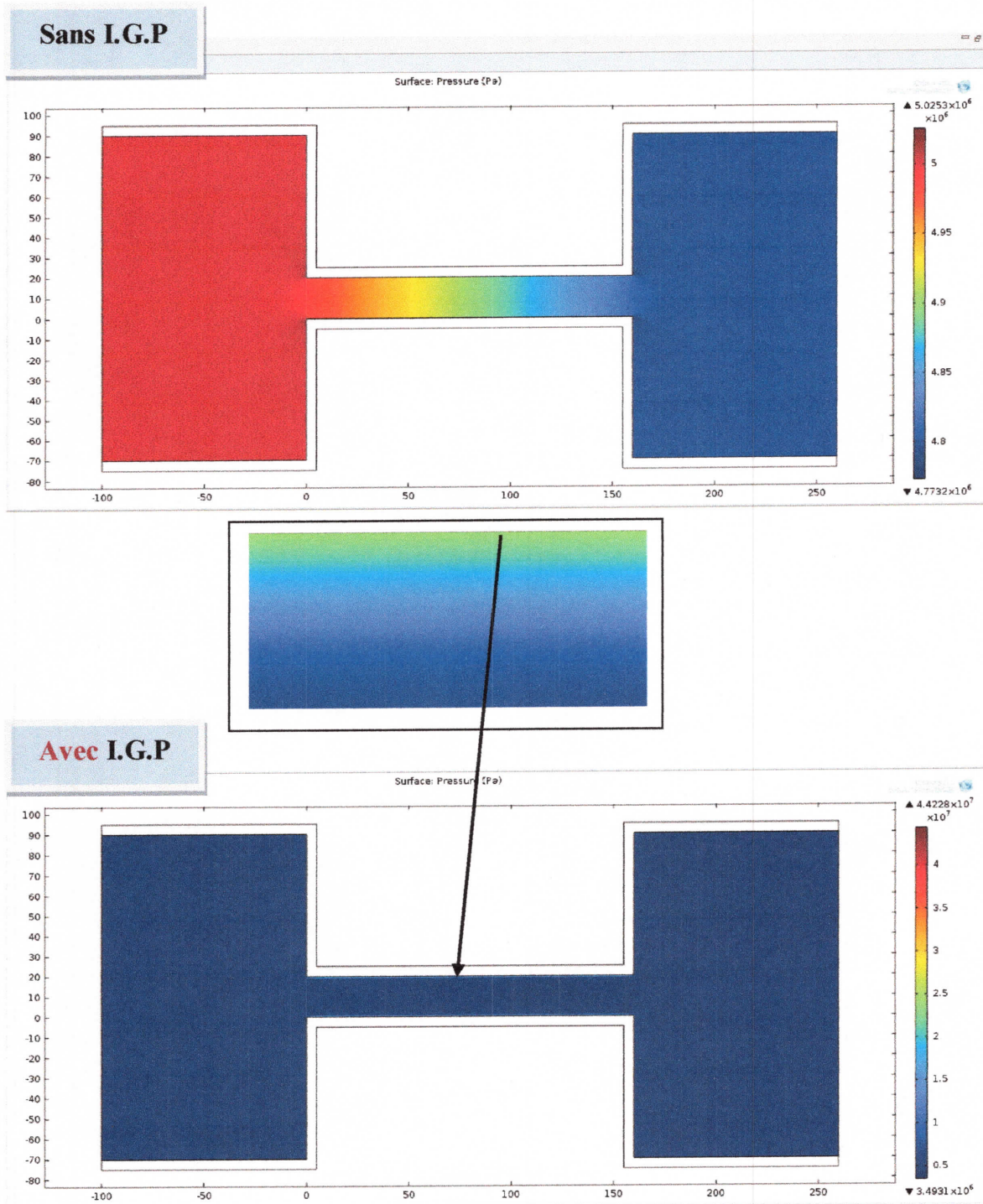


Figure IV.3 Champs de pression en Pa. Canal de référence 20 nm X 160 nm, $\Delta P = 2\text{bars}$. Ecoulement sans et avec Interaction gaz-paroi(I.G.P).

Sur la figure IV.3 les résultats montre que les pressions les plus fortes se trouvent près de la paroi lorsqu' on prend en compte les I.G.P.

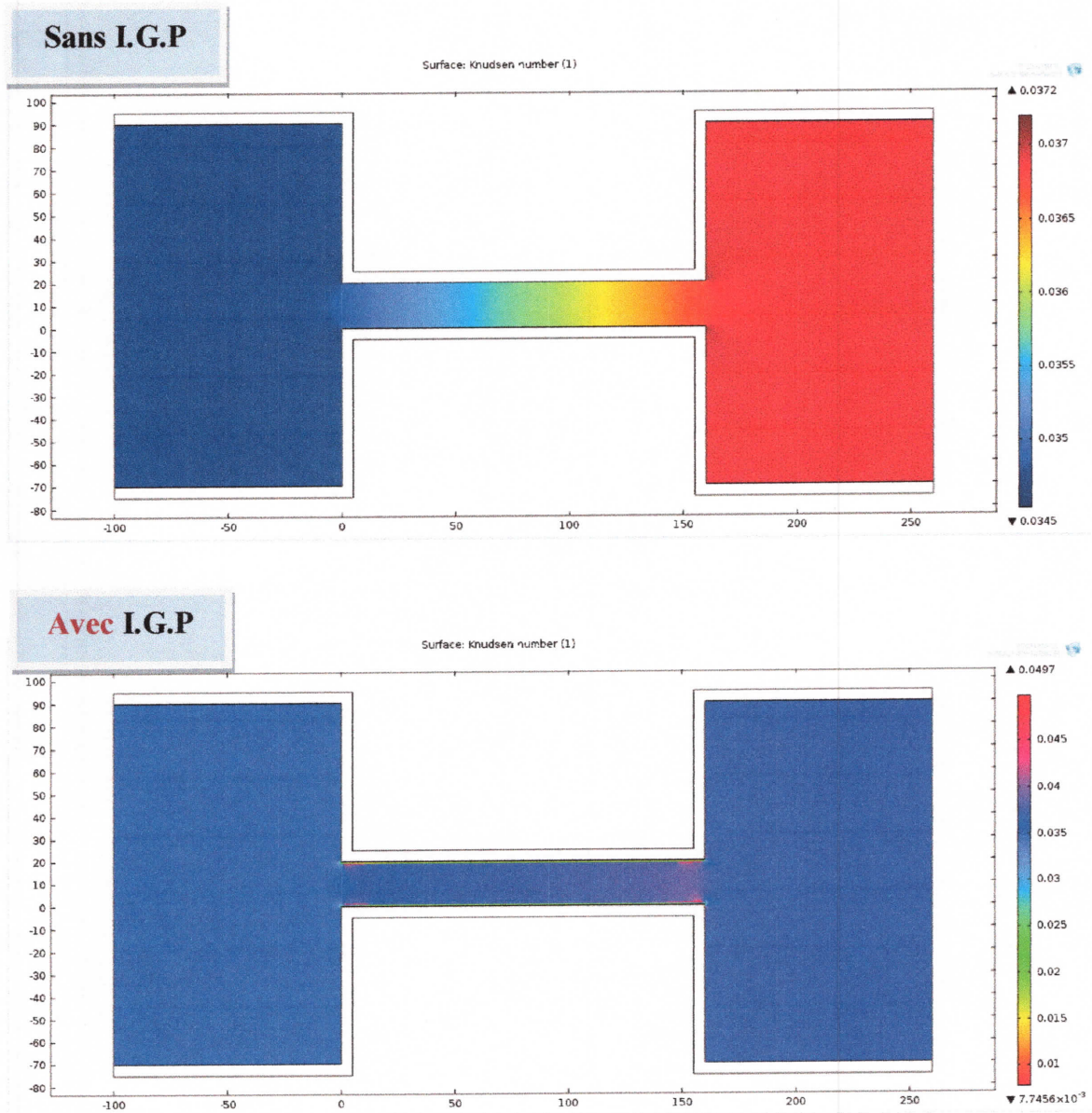


Figure IV.4 Nombre de Knudsen. Dans le Canal 20 nm x 160 nm, $\Delta P = 2bars$. Ecoulement sans et avec (I.G.P).

Pour la figure IV.4 le nombre de Knudsen avec I.G.P. est distribué transversalement contrairement au cas sans I.G.P où il varie principalement selon le long de l'écoulement seulement.

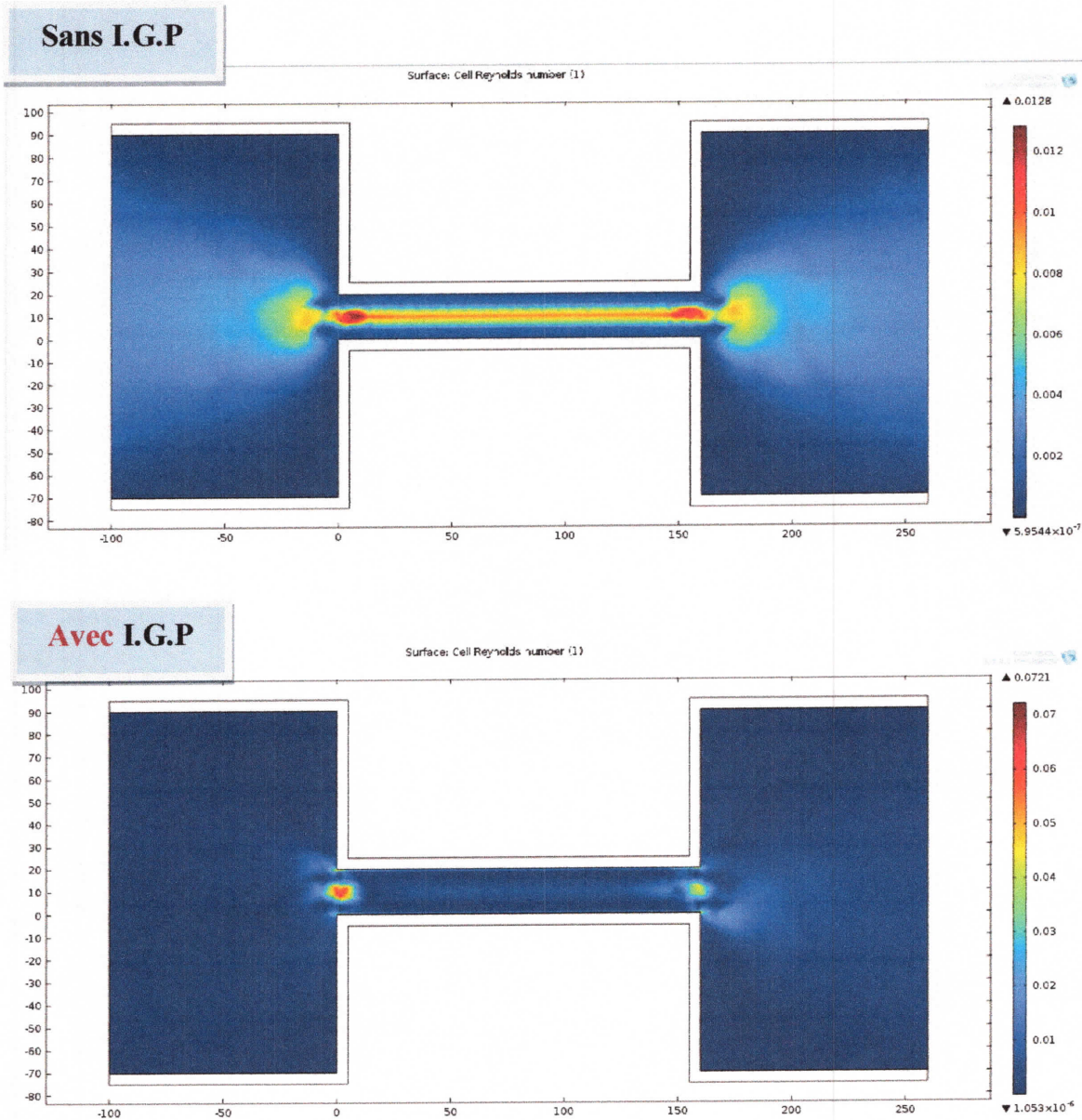


Figure IV.5 Nombre de Reynolds. Dans le Canal 20 nm x 160 nm, $\Delta P = 2\text{bars}$. Ecoulement sans et avec (I.G.P).

La figure IV.5 relatif au nombre de Reynolds montre aussi toute la différence qu'il y'a entre les deux cas. Elle cohérente avec le champs de vitesse présenté précédemment.

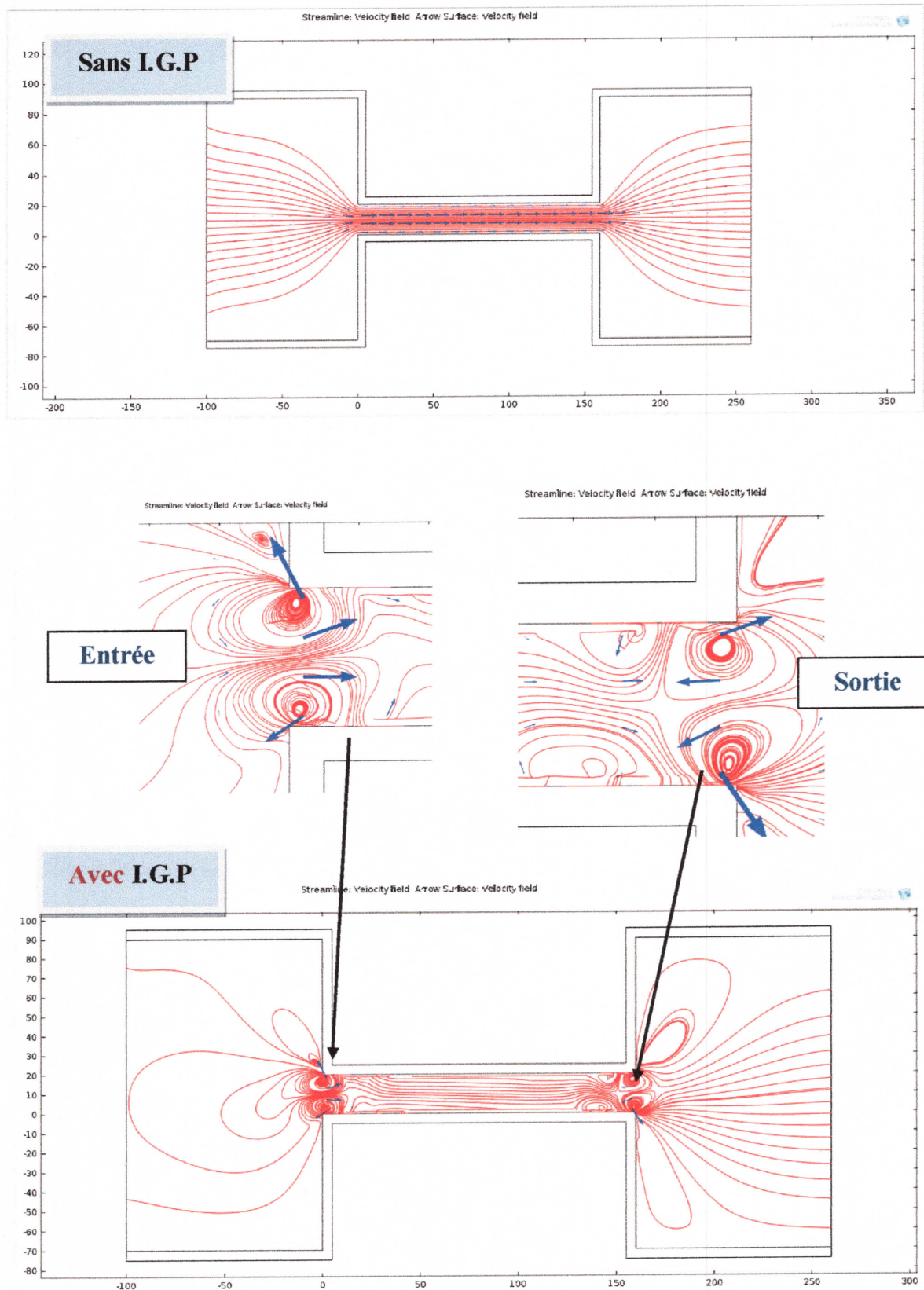


Figure IV.6 Lignes de courant sans et avec interaction. Cas d'un Canal 20 nm x 160 nm, ($\Delta P = 2$ bars).

L'examen des figures présentées démontre sans aucun doute que les interactions intermoléculaires Gaz-Paroi affectent profondément l'écoulement. Le résultat qualitatif le plus important que révèlent les figures concerne l'existence des tourbillons des deux côtés du canal. Ces tourbillons sont assez puissants pour conduire à l'apparition de vitesses négatives et l'inversion des débits locaux c'est-à-dire l'apparition d'écoulement en sens inverse de l'écoulement principal. Cela est montré dans la figure IV.6 Les deux figures montrent aussi une différence importante entre l'entrée et la sortie. Pour l'entrée l'inversion du débit local apparaît sur les parois. Pour la sortie par contre c'est au milieu (au cœur) de l'écoulement que l'inversion s'effectue.

A l'entrée les tourbillons tournent dans le sens antihoraire et à la sortie dans le sens horaire pour la moitié supérieure du canal. Par symétrie c'est l'inverse pour la moitié inférieure.

IV.3 Ecoulement avec interaction gaz-paroi à différents débits (perte de charge)

Le but est de voir l'évolution de la structure de l'écoulements en augmentant le débit c'est-à-dire dans notre cas, en augmentant la perte de charge ΔP . Nous voulons comparer l'évolution des tourbillons à l'entrée et à la sortie.

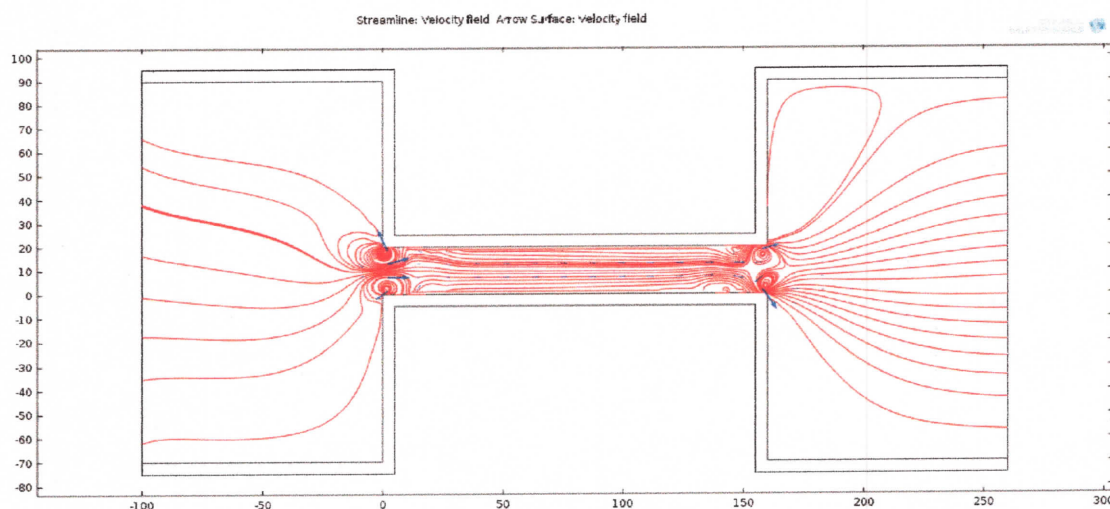


Figure IV.7 Lignes de courant avec interaction géométrie de référence pour ($\Delta P = 5$ bars).

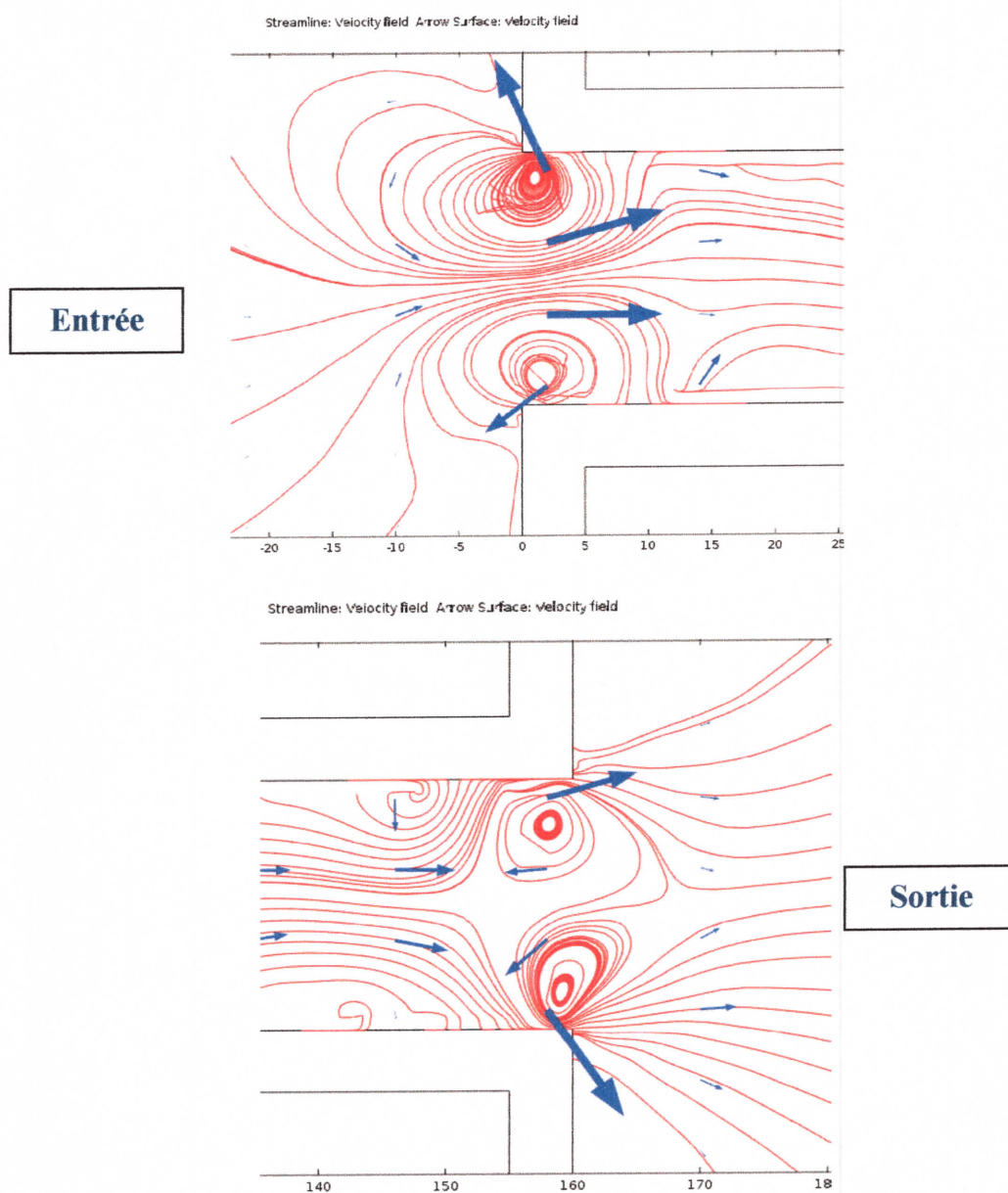
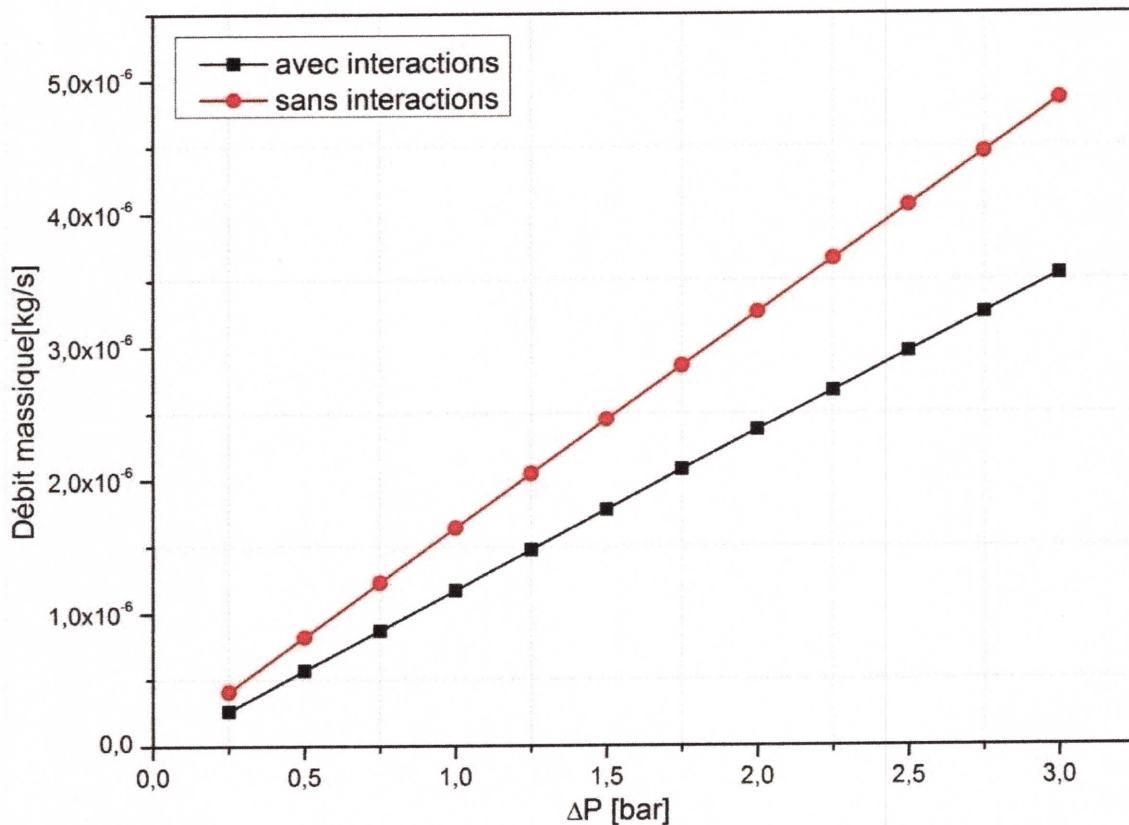


Figure IV.8 Agrandissement de la zone d'entrée et de la zone de sortie des Lignes de courant avec interaction géométrie de référence pour ($\Delta P = 5\text{bars}$), configuration précédente (IV.7).

En comparant les deux écoulements données par les figures IV.6, IV.7 et IV.8, les tourbillons gardent globalement la même allure. On peut dire que l'augmentation du débit n'a pas affecté l'allure générale de tourbillons.

IV.4 Comparaison des pertes de charges, avec et sans force d'interaction

Il s'agit de tracer et comparer les caractéristiques débit (\dot{m})- perte de charge (ΔP) dans les deux cas.



*Figure IV.9 Débit massique en fonction de la perte de charge,
Canal 20 nm X 160 nm*

Les résultats indiquent qu'en présence des forces d'interactions la perte de charge est plus importante à un débit donnée, cela est cohérent avec l'apparition de tourbillons qui provoque plus de frottements. Ce résultat présente une importance pratique.

IV.5 Profondeur de l'influence des interactions gaz-paroi

Le but est de voir jusqu'à quelle ouverture du canal, les tourbillons affectent la caractéristique débit-perte de charge, pour cela nous avons tracé la courbe des rapports des débits en fonction de l'ouverture de canal $\frac{\dot{m}_{I.G.P}}{\dot{m}} = f(h)$, cela est représenté dans la figure IV.10.

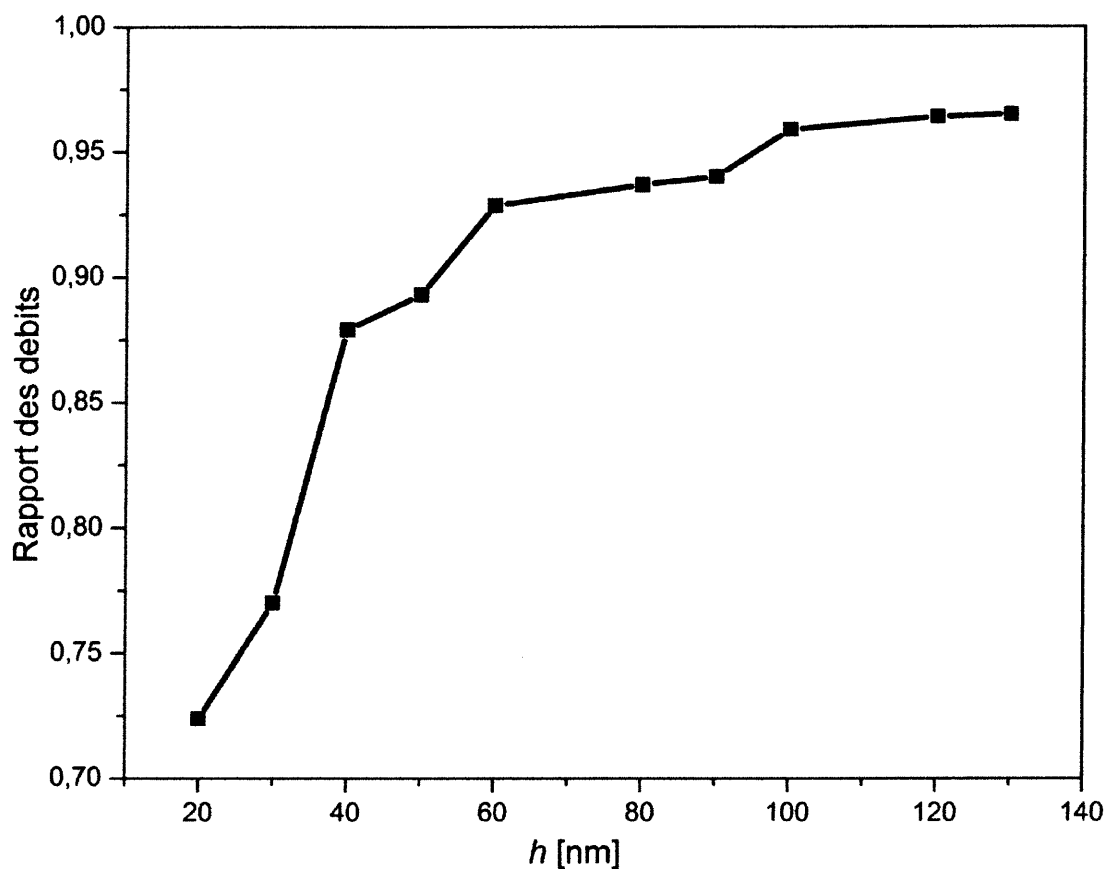


Figure IV.10 Rapport des débits avec et sans I.G.P $\dot{m}_{I.G.P}/\dot{m}$ en fonction de l'ouverture du canal h . ($\Delta P = 2$ bars).

Nous remarquons que l'effet des I.G.P reste non négligeable même pour un canal de 100 nm ($0,1\mu m$). Pour des canaux plus grands il y'a une tendance plus lente à la disparition de cette influence, c'est-à-dire : $\dot{m}_{I.G.P}/\dot{m} \rightarrow 1$.

Sur la figure IV.11 sont représentées les lignes de courant à l'entrée et à la sortie pour le cas du canal de 100 nm.

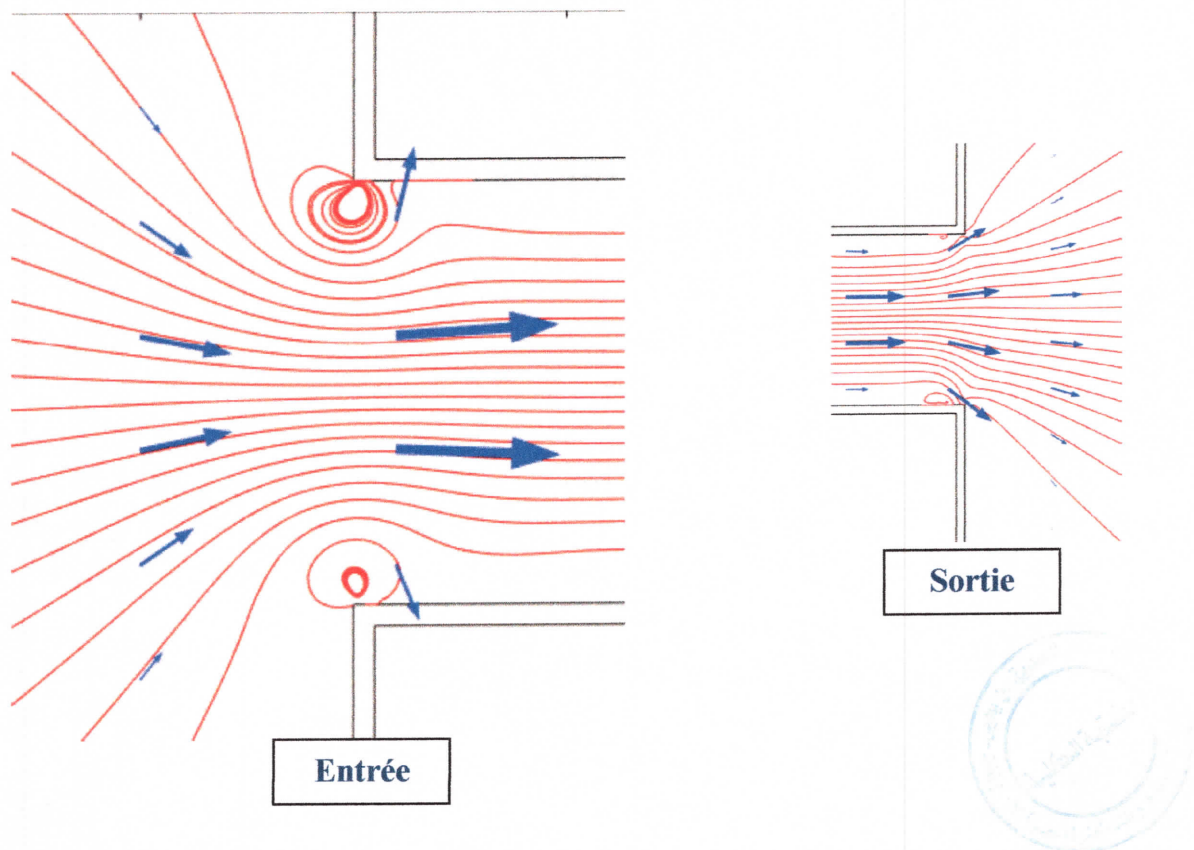


Figure IV.11 Agrandissement de la zone d'entrée et de la zone de sortie des Lignes de courant avec interaction, canal de $h = 100$ nm, ($\Delta P = 2$ bars).

On remarque qu'à l'entrée les tourbillons persistent et de la même taille environ que ce du canal de 20 nm (voir Figure IV.8) c'est-à-dire de 6 à 8 nm de diamètre. Par contre à la sortie un comportement différent se dessine. En effet il y'a presque disparition des tourbillons, les forces d'interactions ont seulement comme effet de dévier et de faire diverger les lignes de courant à la sortie.

Remarque

Les résultats présentés dans ce chapitre sont obtenus avec une précision de 10^{-6} .

IV.6 Résumé

En résumé, les résultats présentés démontrent la grande influence qu'ont les forces d'interactions gaz-paroi sur les caractéristiques de l'écoulement. Il y'a apparition de tourbillons assez puissants des deux cotés du canal, qui occasionnent une plus forte perte de charge. La puissance de ces tourbillons s'explique par l'intensité déjà soulignée des forces d'I.G.P qui conduisent notamment à l'apparition des vitesses négatives. On a aussi montré comment se présente la structure de l'écoulement pour des canaux plus grands.

Conclusion générale

Au cours de ce travail, nous avons eu l'occasion d'apprendre et de nous initier à la mécanique des fluides liée aux écoulements à petite échelle. Nous avons par la même occasion pu étudier certaines notions sur la physique à l'échelle moléculaire. Nous avons aussi acquis des connaissances sur les outils de simulation qui deviennent de plus en plus puissants.

La modélisation entreprise nous a permis de prendre en compte l'effet mécanique des parois sur le gaz. Les calculs itératifs exécutés par le code Comsol ont convergés sans problèmes, cela notamment par l'affinage du maillage au voisinage des parois où ces forces présentent un fort gradient.

Les résultats obtenus montrent que l'effet des forces est loin d'être négligeable sur l'écoulement, ces derniers le perturbent considérablement. Il y'a apparition de tourbillons assez forts sur les bords du canal et qui conduisent à l'augmentation des pertes de charge comparativement au cas répondu dans la bibliographie où l'existence de ces forces n'est pas prise en compte. L'effet de ces forces se propage à l'intérieure de l'écoulement à cause de ces même tourbillons.

Comme perspectives, ces résultats doivent être confirmés par d'autres simulations, et d'autres couples gaz-solide. L'effet de la longueur du canal est aussi d'un point à examiner pour vérifier si la caractéristique débit-perte de charge de l'écoulement dévie de la linéarité ou pas.

BIBLIOGRAPHIE

[1] <http://www.marksclerk.fr>.

[2] www.google.com (images).

[3] S.T.Kandlikar, W.J.Grande, (2002), Evolution of microchannels flow passages – Thermohydraulic performance and fabrication technology, Heat Transfer Engineering, Vol. 25 N° 1.

[4] J.Pitakarnnop, Analyse expérimentale et simulation numérique d'écoulements raréfiés de gaz simples et de mélanges gazeux dans les microcanaux, Thèse de doctorat, INSA Toulouse (2009).

[5] www.hyperphysics.com.

[6] A.Laouir, Libre parcours moyen et compressibilité des gaz réels, Communication d'encadrement et d'orientation, Département de génie mécanique université de Jijel, Février 2016.

[7] C.Aubert, Ecoulements compressibles de gaz dans les micro-canaux : Effets de raréfaction, effets instationnaires, Thèse doctorat, Université Paul Sabatier Toulouse (1999).

[8] C.M.Freeman, G.J.Moridis, T.A.Blasingame, A numerical study of micro scale flow behavior in tight gas and shale gas reservoir systems, Transp Porous Med (2011) 90:253–268.

[9] C.Tchekiken, Modélisation et simulations numériques d'écoulements compressibles dans des micro-conduites planes, Thèse doctorat, Université Paris-Est (2014).

[10] P.Lalonde, Etude expérimentale d'écoulement gazeux dans les microsystèmes a fluide, Thèse doctorat INSA Toulouse (2001).

[11] Y.F.Yin, B.Mcenaney, T.J.Mays, Dependence of GCEMC simulation of nitrogen adsorption on activated carbons on input parameters, Carbon (1998) 36: 1425-1432.

[12] A.Laouir, Intégration du potentiel Lennard-Jones sur un plan ifini, Communication d'encadrement et d'orientation, Département de génie mécanique université de Jijel, Mai 2016.

BIBLIOGRAPHIE

[13] F.BETAOUAF, Simulation de dynamique moléculaire des fluides denses, application aux mélanges méthane-azote, méthane-néon : Approche de Feynman-Hibbs, Thèse doctorat Université de Tlemcen (2015).

[14] A.Laouir, Propriétés du fluide au voisinage de la paroi sous l'effet des interactions, Communication d'encadrement et d'orientation, Département de génie mécanique université de Jijel, Mai 2016.

[15] <http://www.peacesoftware.de>