

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

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 Abou bakr Belkaïd – Tlemcen –

Faculté de TECHNOLOGIE



## MEMOIRE

Présenté Pour L'obtention de Diplôme du Master

**En : Génie Mécanique**

**Spécialité : Energétique**

Présenté Par : Aziz Alae Eddine

Sujet :

***Simulation Directe par la Méthode de Monte Carlo d'une loi de Darcy***

Soutenu, le jj/mm/2021, devant le jury composé de :

Mr SEBBANE OMAR.	MCA	Univ. Tlemcen	Président
Mr MEFTAH KHOUANE.	Pr	Univ. Tlemcen	Examineur
Mr AMEUR DJILALI.	MCA	Univ. Tlemcen	Encadreur
Mr SAIM RACHID.	Pr	Univ. Tlemcen	Co-Encadreur

Année Universitaire : 2020 – 2021

# *Remerciement*

*Au nom d'Allah le Très Miséricordieux, le Tout  
Miséricordieux, à qui on doit tout*

Tout d'abord, je remercie **Dieu** le tout puissant de m'avoir donné la santé et la volonté d'entamer et de terminer ce mémoire.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à mon cher encadreur **Mr Ameur Djilali** pour tous ces mois sous sa direction, je le remercie pour ces qualités non seulement de formation à la recherche mais aussi humaines, pour sa disponibilité en présentiel et à distance, malgré les circonstances du Covid.

Je remercie également **Mr Saim Rachid**, mon co-encadreur et chef de notre formation, qui nous a accompagné toutes ces années de formation.

J'adresse aussi mes vifs remerciements aux membres du jury **Mr Sebbane Omar** et **Mr Meftah Khouane** pour avoir bien voulu examiner et juger ce travail ainsi que pour le temps qu'ils ont consacré.

Un remerciement particulier est adressé à **Mme Joanna Dib** derrière les coulisses pour son aide à la réalisation de ce projet.

Enfin, toute personne qui a participé de près ou de loin à l'accomplissement de ce mémoire est sincèrement remerciée.

# *Dédicace*

*C'est avec un grand plaisir que je dédie ce modeste travail :*

**A l'être le plus cher de ma vie, ma mère,**

**A celui qui m'a fait de moi un homme, mon père,**

*Qui n'ont jamais cessé de formuler des prières à mon égard, de me soutenir et de m'épauler pour que je puisse atteindre mes objectifs.*

**A mon frère,**

**A mes chères sœurs,**

*Pour leur soutien moral et leurs conseils précieux tout au long de mes études.*

**A ma chère grand-mère,**

*A qui je souhaite une bonne santé.*

**A mes chère(s) ami(e)s,**

*Pour leurs aides et supports dans les moments difficiles.*

*A tous les membres de ma famille et toute personne qui porte  
les noms*

**AZIZ et KALAI.**

# Résumé

La loi de darcy est une loi proprement physique et qui est considérée comme étant le fondement essentiel pour les équations des écoulements dans les milieux poreux. L'objectif de ce mémoire est de modéliser l'écoulement du monoxyde de carbone (CO) dans un micro-canal. Dans le but de vérifier une loi de Darcy à travers le miro-canal étudié, nous faisons varier la différence de pression entre l'entrée et la sortie de 0.1 bar à 5 bars tout en fixant la pression de sortie à 1 bar. La température ainsi que le coefficient d'accommodation sont fixés constants durant tous les calculs numériques utilisant la simulation directe par la méthode de Monte Carlo. La raréfaction et la compressibilité de l'écoulement sont étudiées. Les résultats numériques montrent que les premiers effets de compressibilité apparaissent après un certain seuil de différences de pression, inversement à la raréfaction qui diminue. Les résultats montrent également un caractère subsonique de l'écoulement au-dessous de cette valeur seuil. Finalement, et pour la même gamme de différence de pression, on a pu vérifier une loi de Darcy.

**Mots clés :** MEMS, Simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC), Dynamique des gaz raréfiés, Microfluidique, Nombre de Knudsen, Loi de Darcy.

# *Abstract*

Darcy's law is a purely physical law and is considered to be the essential basis for the flow equations in porous media. The objective of this thesis is to model the flow of carbon monoxide (Co) in a micro-channel. In order to verify a Darcy's law through the studied micro-ductchannel, we vary the pressure difference between the inlet and the outlet from 0.1 bars to 5 bars while fixing the outlet pressure at 1 bar. The temperature and the accommodation coefficient are kept constant during all numerical calculations using direct simulation Monte Carlo. The rarefaction and compressibility of the flow are studied. The numerical results show that the first compressibility effects appear after a certain threshold of pressure differences, inversely to the rarefaction which decreases. The results also show a subsonic character of the flow below this threshold value. Finally, and for the same range of pressure difference, we could verify a Darcy's law.

**Keywords:** MEMS, Direct Simulation Monte Carlo (DSMC), Rarefied gas dynamics, Microfluidics, Knudsen number, Darcy's law.

# ملخص

قانون دارسي هو قانون فيزيائي بحت يعتبر الأساس لمعادلات التدفق في الوسائط المسامية. الهدف من هذه الأطروحة هو نمذجة تدفق اول أكسيد الكربون في قناة صغيرة. من اجل التحقق من قانون دارسي داخل هذه القناة الصغيرة المدروسة، نقوم بتغيير فرق الضغط بين المدخل والمخرج من 0.1 بار الى 5 بار اثناء تثبيت ضغط المخرج عند 1 بار. درجة الحرارة وكذلك معامل الإقامة ثابتان خلال جميع الحسابات العددية التي نقوم بها باستخدام المحاكاة المباشرة بطريقة مونت كارلو. تمت دراسة خلخلة وانضغاطية التدفق. تظهر النتائج العددية أن التأثيرات الأولى للانضغاطية تظهر بعد عتبة معينة من فروق الضغط، على العكس من تناقص الخلخلة. تظهر النتائج أيضا طابعا دون سرعة الصوت للتدفق أسفل قيمة العتبة هذه. أخيرا، وفي نفس النطاق من فرق الضغط، يمكن للمرء ان يتحقق من قانون دارسي.

**كلمات مفتاحية:** الانظمة الالكتروميكانيكية المصغرة، المحاكاة المباشرة بطريقة مونت كارلو، ديناميكية الغازات المخلخلة،

الموانع الدقيقة، ثابت كنودسن، قانون دارسي.

# ***TABLE DES MATIÈRES***

<i>Remerciement</i> .....	I
<i>Dédicace</i> .....	II
Résumé .....	III
Abstract .....	IV
ملخص .....	V
Table des matières .....	VI
Nomenclature .....	IX
Liste des figures .....	XII
Liste des tableaux.....	XIV
Introduction Générale .....	1
Chapitre I: Revue bibliographique.....	5
I.1    Introduction.....	6
I.2    MEMS (Micro Système Electromécanique) .....	7
I.2.1    Définition .....	7
I.2.2    Historique de MEMS.....	9
I.2.3    Les avantages et les inconvénients des MEMS.....	14
I.2.4    Domaines d'application des MEMS .....	<b>Error! Bookmark not defined.</b>
I.2.5    Relations entre les MEMS et la microfluidique .....	15
I.2.5.1    Application des MEMS dans la microfluidique .....	16
I.3    Les écoulements microfluidiques .....	19
I.3.1    Définition .....	19
I.3.2    Propriétés des écoulements microfluidiques .....	20
I.3.2.1    Nombres adimensionnels en microfluidique gazeuse .....	20
I.3.2.2    Taux de Raréfaction .....	21
I.3.2.3    Equation de Navier-Stokes .....	22
I.3.2.4    Perte de charge dans les micro-canaux fluidique .....	23
I.3.2.5    Résistance hydraulique .....	23
I.3.3    Application des micro-canaux.....	24
I.4    Conclusion .....	26
Chapitre II: La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC) .....	27

II.1	La Méthode de Monte Carlo .....	28
II.1.1	Introduction.....	28
II.1.2	Bref historique des méthodes de Monte Carlo (MC) .....	29
II.1.3	Pourquoi la méthode de Monte Carlo ? .....	30
II.1.4	Applications de la méthode de MC dans diverse disciplines .....	31
II.2	Simulation directe par la méthode de Monte Carlo.....	33
II.2.1	Présentation de la méthode DSMC .....	33
II.2.2	Principe de la méthode DSMC.....	36
II.2.3	Procédure et techniques de DSMC.....	37
II.2.3.1	Initialisation .....	37
II.2.3.2	Mouvement des particules .....	37
II.2.3.3	Indexation des particules .....	38
II.2.3.4	Collision des particules .....	38
II.2.3.5	Evaluation des propriétés des particules d'échantillonnage.....	42
II.2.3.5.1	Grandeurs macroscopiques dérivées de DSMC .....	42
II.2.4	Collision binaire élastique .....	45
II.2.5	Les Interactions gaz-paroi .....	47
II.2.5.1	Modèle de réflexion spéculaire .....	47
II.2.5.2	Modèle de réflexion diffuse.....	47
II.2.5.3	Coefficient d'accommodation .....	48
II.2.6	Les modèles moléculaires pour DSMC.....	48
II.2.6.1	Modèle en loi de puissance inverse (Inverse Power Law IPL).....	48
II.2.6.2	Modèle de sphère rigide (Hard Sphère HS).....	49
II.2.6.3	Modèle de sphère rigide variable (Variable Hard Sphère VHS) .....	50
II.2.6.4	Modèle de sphère molle variable (Variable Soft Sphere VSS).....	51
II.2.6.5	Modèle de sphère rigide généralisée (The Generalized Hard Sphere GHS)	
	51	
II.3	Conclusion .....	51
Chapitre III: Modélisation et résultats numériques .....		52
III.1	Introduction.....	53
III.2	Position de problème.....	54
III.3	Modélisation et paramètres.....	55

III.4	Résultats numériques .....	56
III.4.1	Etude de la pression.....	56
III.4.2	Etude de nombre de mach et du libre parcours moyens .....	57
III.4.3	Etude du débit massique.....	59
III.5	CONCLSION.....	61
	Conclusion et perspectives .....	62
	Bibliographie .....	64

## *Nomenclature*

### **Symboles**

**Re** : Nombre de Reynolds

**Kn** : Nombre de Knudsen

**Ma** : Nombre de Mach

***U*** : Vitesse caractéristique de l'écoulement (m/s)

***L*** : Longueur caractéristique de l'écoulement (m)

***a*** : Vitesse de propagation du son (m/s)

***R<sub>H</sub>*** : Résistance hydraulique (Pa.s/m<sup>3</sup>)

***Q*** : Débit massique (Kg/s)

***Q<sub>v</sub>*** : Débit massique (m<sup>3</sup>/s)

**$\Delta p$**  : Perte d'énergie

**$\Delta t$**  : Pas de temps. (s)

***d*** : Diamètre de la molécule (m)

***n*** : Densité numérique de gaz réel

**$\Delta n$**  : Fraction des molécules

***N<sub>c</sub>*** : Nombre total de collision par unité de volume

***V<sub>cell</sub>*** : Cellule de volume

***N<sub>s</sub>*** : Particules de simulation

***P<sub>col</sub>*** : Probabilité de collision entre deux particules simulées

***m*** : Masse d'une molécule (Kg)

**$\vec{U}$**  : Vecteur de vitesse (m/s)

***e<sub>tr</sub>*** : L'énergie spécifique

***R*** : Constante universelle des gaz parfait

***k*** : Constante de Boltzmann

***r*** : Constante spécifique de gaz

$N_A$ : Nombre d'Avogadro	
$T_{tr}$ : Température cinétique de translation	(C°)
$\vec{c}^*$ : Vitesse d'agitation de la molécule	(m/s)
$\vec{c}$ : Vitesse moléculaire	(m/s)
$c_1^*$ et $c_2^*$ : Vitesses post-collision	(m/s)
$c_1$ et $c_2$ : Vitesses de pré-collision	(m/s)
$m_1$ et $m_2$ : Masses des deux particules rentre en collision	(Kg)
$c_m$ : Vitesse du centre de masse des deux particules	(m/s)
$m_r$ : Masse réduite	(Kg)
$\ell$ : Longueur de micro-canal	( $\mu\text{m}$ )
$h$ : Hauteur de micro-canal	( $\mu\text{m}$ )
$T_{int}$ : Température interne	(C°)
$P_{in}$ : Pression à l'entrée du premier réservoir	(Pa)
$P_{out}$ : Pression à la sortie du deuxième réservoir	(Pa)
$P_0$ : Pression de référence	(Pa)
$T_0$ : Température de référence	(C°)

## Lettres grecques

$\rho$ : Masse volumique	(Kg/ m <sup>3</sup> )
$\mu$ : Viscosité dynamique	(Pa.s)
$\lambda$ : Libre parcourt moyen	
$\gamma$ : Rapport des chaleurs spécifiques	
$\sigma_t$ : Section efficace de collision	
$\nu$ : Fréquence de collision	
$\zeta_{in}$ : Nombre de degrés de liberté	
$\sigma$ : Coefficient d'accommodation	
$\mu_0$ : viscosité dynamique de référence	(Pa.s)

## **Abréviations**

**MEMS** : Système Micro Electromécanique

**DSMC** : Simulation directe de Monte Carlo

**CFD** : Computational Fluid Dynamics

**TC** : Technique Time-Counter

**NC** : Technique Null-Collision

**NTC** : No-Time-Counter

**IPL** : Loi de puissance inverse

**HS** : Modèle de sphère rigide

**VHS** : Modèle de sphère rigide variable

**VSS** : Modèle de sphère molle variable

**GHS** : Modèle de sphère rigide général

## *Liste des figures*

Figure 1. Micro-canaux naturels : Nervures sur une feuille [1].	2
Figure 2. Dispositif de détection et de commande de l'activation des airbags, basé sur la technologie MEMS [2].	2
Figure I. 1 Dispositif de détection et de commande de l'activation des airbags, basé sur la technologie MEMS [3].	6
Figure I. 2 Vue en coupe d'un xylème de tige de plante [4].	7
Figure I. 3 le positionnement des microsystèmes dans l'échelle de la taille des objets [3].	8
Figure I. 4 Définition d'un microsysteme (MEMS) [7].	8
Figure I. 5 Classifications de la technologie des microsystèmes [5].	9
Figure I. 6 Jauges Piézo-résistives (Pont de Wheatstone) [6].	9
Figure I. 7 Texas Instrument's First Integrated Circuit [66].	10
Figure I. 8 There is plenty of the bottom (Richard Feynman) [6].	10
Figure I. 9 Schéma de principe d'un transistor à grille résonnante constitué d'un faisceau d'ordre 0,1 [10].	11
Figure I. 10 Le microprocesseur Intel 4004 [11].	11
Figure I. 11 (a) Schéma d'un réseau de buses à jet d'encre (b) Vue rapprochée d'une tête d'impression à jet d'encre commerciale illustrant les buses [12].	12
Figure I. 12 Micro miroir réalisé par une gravure profonde Bosch (a), commutateur optique (b) [6].	13
Figure I. 13 Pompe à insuline [12].	13
Figure I. 14 Les domaines d'application des MEMS.	14
Figure I. 15 Caractéristiques dimensionnelles des dispositifs micro-fluidiques [18].	16
Figure I. 16 Pompe en silicium permettant la délivrance contrôlée de médicaments [3].	17
Figure I. 17 Laboratoire sur Puce [20].	17
Figure I. 18 Exemples de techniques de mélangeurs passifs utilisés en synthèse chimique [21].	18
Figure I. 19 Dimensions caractéristiques des dispositifs micro-fluidiques [22].	19
Figure I. 20 Caractérisation du type d'écoulement en fonction du nombre de Reynolds $Re$ [26].	21
Figure I. 21 Différents régimes d'écoulements gazeux en fonction de nombre de Knudsen [30].	22
Figure I. 22 Exemple d'un réseau hydraulique(a), et de son schéma électrique équivalent (b) [26].	24
Figure I. 23 Imprimante à jet d'encre [30].	25
Figure I. 24 Micro-échangeur thermique [28].	25
Figure I. 25 Laboratoire sur puce [20].	26

Figure II. 1 Libre parcours moyen : moyen des distances parcourues par une particule entre chaque collision [50].	34
Figure II. 2 Classification des régimes d'écoulement [51].	35
Figure II. 3 Molécules réelles (a) et les molécules simulées (b) [30, 64, 65].	36
Figure II. 5 Collision entre molécules [64, 65].	39
Figure II. 6 Collisions binaires de molécules de sphère rigide de diamètre $d$ [64, 65]	39
Figure II. 7 Modèles de réflexion spéculaire (A) et diffuse (B) pour les interactions gaz-surface	47
Figure III.1 Géométrie du micro-canal pour les simulations DSMC.	55
Figure III. 2 Pression en fonction de l'abscisse $x$ dans le micro-canal pour différentes ordonnées.	56
Figure III. 3 Variation la pression le long du micro-canal à $y=0$ pour trois valeurs de pression d'entrée $P_1=1.1e5$ Pa, $P_1=4.0e5$ Pa et la pression $P_1=6.0e5$ Pa	57
Figure III. 4 Variation du nombre de Mach dans les cas de pression d'entrée $P_1=1.1e5$ Pa, $P_1=4.0e5$ Pa et la pression $P_1=6.0e5$ Pa	58
Figure III. 5 Variation du nombre du LPM pour trois valeurs de pression d'entrée $P_1=1.1e5$ Pa, $P_1=4.0e5$ Pa et la pression $P_1=6.0e5$ Pa	59
Figure III. 6 Débit massique $Q$ dans la section verticale au centre du micro-canal en fonction de la différence de pression $\Delta P$ .	61

## *Liste des tableaux*

Tableau 1 Les avantages et les inconvénients des MEMS.....	<b>Error! Bookmark not defined.</b>
Tableau 2 Les Applications du MEMS [5]. .....	<b>Error! Bookmark not defined.</b>
Tableau 3 Analogie entre résistance électrique et résistance hydraulique [26]. .....	<b>Error! Bookmark not defined.</b>
<b>Bookmark not defined.</b>	
Tableau 4 Formules simplifiées de la résistance hydraulique pour différents cas de section [26].....	<b>Error! Bookmark not defined.</b>
Tableau 5 Les propriétés moléculaires de gaz de monoxyde de carbone.	<b>Error! Bookmark not defined.</b>
<b>defined.</b>	
Tableau 6 Valeurs numériques du débit massiques en fonction de la différence de pression calculés dans la section verticale au centre du micro-canal .....	<b>Error! Bookmark not defined.</b>

---

## Introduction Générale

---

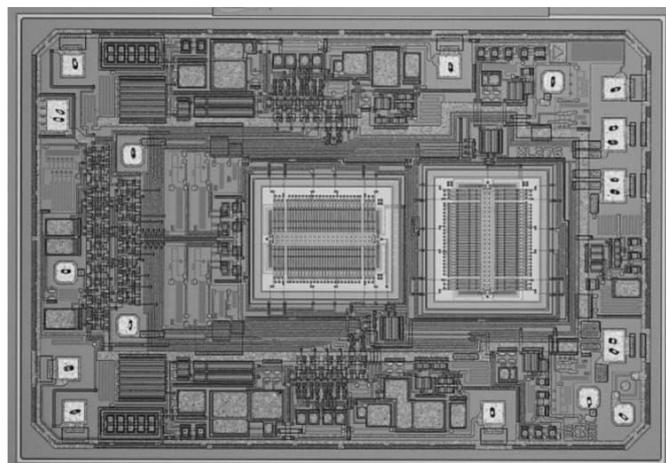
Dans notre vie, la nature nous entoure de tous les aspects, que l'homme devrait contempler et toucher, pour en profiter dans divers domaines, car notre environnement contient de nombreux phénomènes qui doivent être étudiés et analysés. Parmi ces phénomènes, nous mentionnons l'écoulement de l'eau dans les vallées et les rivières ou la circulation sanguine dans les corps humain ainsi que la circulation des aliments dans les plantes, ect...

L'homme a ainsi commencé à creuser plus profondément, en découvrant la façon dont le sang circule dans le corps, ainsi que l'entrée d'O<sub>2</sub> et la sortie du CO<sub>2</sub> lors de la respiration, et il a également pu étudier le chemin d'eau qui coule des racines des arbres à leurs feuilles, tous ces processus, se passent à un niveau micrométrique ou ce que l'on appelle des microcanaux.



**Figure 1. Micro-canaux naturels : Nervures sur une feuille [1].**

Ces dernières années, de grands progrès ont été réalisés dans le domaine de la miniaturisation, de sorte que les chercheurs ont pu réduire à une échelle sub-micrométrique et micrométrique la taille des mécanismes fluidiques, électromécaniques ou de flux de chaleur depuis les années 80. Toutes ces réalisations sont connues sous le nom de MEMS (Micro Electromécanique Système).



**Figure 2. Dispositif de détection et de commande de l'activation des airbags, basé sur la technologie MEMS [2].**

## Introduction Générale

---

Dans les années 90, cette discipline a connue un grand développement dans plusieurs domaines tels que les applications de la chimie, la biologie, la médecine et de la communication. Ces domaines dépendent de l'écoulement des fluides dans des conditions inhabituelles, ce qui nécessite la mise en place d'un nouveau système connu sous le nom de microfluidique.

La microfluidique ou l'art de manipuler des petits volumes de fluide, représente l'ensemble des théories et techniques liées à l'écoulement de fluides (gaz ou liquide) confinés dans des dispositifs dont la plus petite dimension spatiale caractéristique est de l'ordre de quelques micromètres. Donc on peut dire que la microfluidique est l'étude et la mise en oeuvre des écoulements au sein des réseaux des micro-canaux avec un diamètre de quelques micromètres. Cette technologie permet la fabrication de dispositifs traitant de très petites quantités de fluides et trouve un nombre illimité d'applications.

Actuellement en microfluidique, il y a un développement dans la connaissance de la microfluidique gazeuse que celle de la microfluidique liquide. Concernant les gaz, le problème est plus clairement défini : Le principal effet microscopique dû au confinement poussé est la rareté de l'écoulement. Il existe une forte analogie (mais n'est pas parfaite) entre les écoulements gazeux à basse pression, étudiés de façon approfondie depuis plus d'un demi-siècle, surtout pour leurs applications dans le domaine spatial, et les écoulements internes dans une structure avec une taille caractéristique de l'ordre du micromètre.

L'étude des écoulements gazeux dans les microsystèmes nécessite de prendre en compte les effets de raréfaction qui sont définies par un nombre adimensionnel appelé le nombre de Knudsen, qui détermine le domaine de validité des équations et méthodes numériques et définit plusieurs régimes d'écoulements. Dans certains régimes des écoulements gazeux, l'utilisation des relations de Navier Stokes devient extrêmement difficile voir impossible, ce qui nous amène à nous orienter vers les méthodes numériques pour modéliser ce genre de régime. Parmi ces méthodes, nous citons les méthodes lattice gas et lattice Boltzmann gas, avec une attention particulière pour la simulation directe de Monte Carlo (DSMC).

### ***L'objectif de l'étude***

La loi de darcy est une loi proprement physique, qui est le fondement essentiel pour les équations des écoulements dans les milieux poreux. Cette loi a été obtenue expérimentalement et publié en 1856, par Henry Philibert Gaspard Darcy, l'un des premiers scientifiques à étudier en profondeur l'écoulement dans les milieux poreux. Dans ce contexte, de nombreux travaux des recherches ont été menés sur la base de cette loi, afin de l'améliorer et de l'approfondir. L'objectif de ce mémoire est de une modéliser un écoulement du monoxyde de carbone (CO) dans un micro-canal. Dans le but de vérifier une loi de Darcy à travers le miro-canal étudié.

## *L'organisation de travail*

Ce mémoire est présenté en trois chapitres:

- **Le premier chapitre**

Ce chapitre se présente comme un chapitre introductif et analyse bibliographique. Dans ce chapitre, nous expliquerons les systèmes micro-électromécaniques et leurs diverses applications ainsi que leur relation avec la microfluidique. Nous discuterons également les propriétés des écoulements microfluidiques.

- **Le deuxième chapitre**

Ce chapitre bibliographique est consacré à la définition de la simulation directe par la méthode de Monte Carlo, au cours de laquelle nous aborderons le principe sur lesquels est basée, et les techniques de cette méthode. Ensuite, nous présenterons les différents modèles de collisions binaires élastiques trouvés dans les littératures avec une attention particulière au modèle de sphère rigide variable (Variable Hard Sphère VHS), qui sera le modèle adopté dans tous nos calculs.

- **Le troisième chapitre**

Dans ce chapitre, nous modéliserons l'écoulement de gaz de monoxyde de carbone (CO) dans un micro-canal. Nous ferons varier la différence de pression entre l'entrée et la sortie de 0.1 bar à 5 bars tout en fixant la pression de sortie à 1 bar. La température ainsi que le coefficient d'accommodation sont fixés constants. Nous effectuerons une étude numérique à l'aide du code DS2V, basée sur la simulation directe par la méthode de Monte Carlo.

---

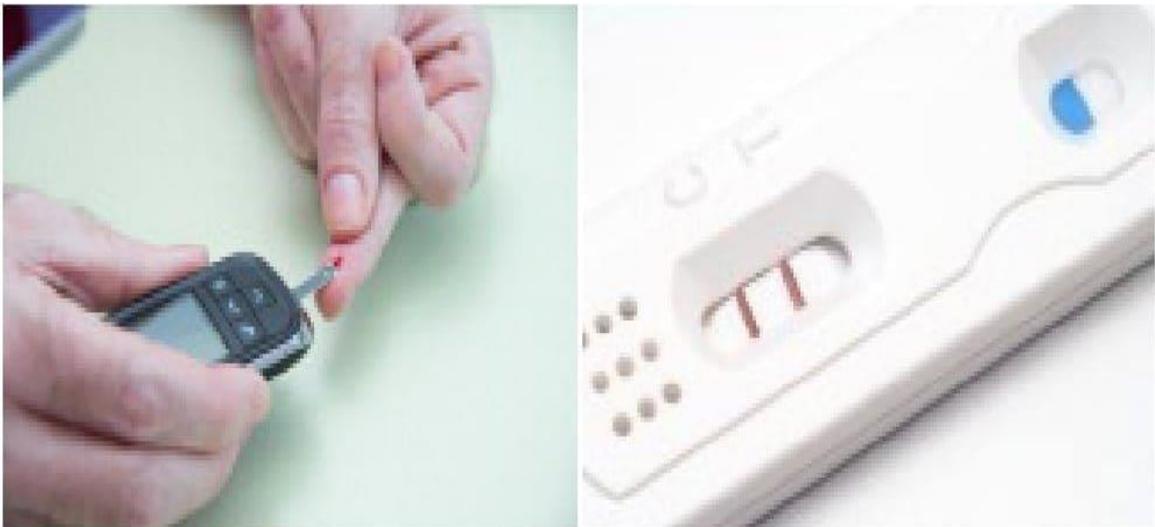
## Chapitre I: Revue bibliographique

---

## I.1 Introduction

L'une des techniques les plus importantes des derniers développements scientifiques est la technologie de miniaturisation, permettant de réduire la taille des appareils. La disponibilité de l'industrie électronique est le meilleur exemple de gains de production, d'efficacité, de taille et même de produits, et le changement de nouvelles cultures résultant de la conception et de la demande de petits dispositifs.

La réduction de taille s'est développée dans beaucoup de domaines. Elle comprend plusieurs domaines par exemple le domaine de médecine, biologie, chimie, etc... Par exemple, nous pouvons citer les "Laboratoires sur puce" (voir Figure I.1). Cette technologie a réduit la taille du laboratoire de plusieurs mètres pour avoir la dimension d'une puce. Ce dernier réduit non seulement la taille, mais réduit également le temps, coûts et réactifs utilisés pour l'analyse.



**Figure I. 1 Dispositif de détection et de commande de l'activation des airbags, basé sur la technologie MEMS [3].**

Cette miniaturisation a obligé les chercheurs durant ces dernières années à étudier l'écoulement des fluides dans des espaces réduits de quelques microns et de créer des applications avancées en dynamique des fluides. Alors, une nouvelle technologie est née, elle s'appelle la « micro-fluidique » [3].

Dans le monde des vivants, les écoulements de fluides sont généralement confinés dans des micro-canaux. Il en est ainsi des écoulements dans les xylèmes des tiges de plantes dont le diamètre est typiquement de l'ordre d'une dizaine de micromètres ou du sang dans les artérioles dont le diamètre est de l'ordre de 50 – 100  $\mu\text{m}$  [4].



**Figure I. 2** Vue en coupe d'un xylème de tige de plante [4].

La microfluidique désigne l'ensemble des théories et technologies relatives aux écoulements de fluides (gaz ou liquide) dans des dispositifs dont la dimension spatiale caractéristique la plus petite est le micromètre [4]. La microfluidique s'applique quand les longueurs caractéristiques de l'écoulement traversant les canaux sont inférieures à un millimètre. Mais il y a des difficultés pour commander et véhiculer les fluides dans ces micro- canaux.

## **I.2 MEMS (Micro Système Electromécanique)**

### **I.2.1 Définition**

Les MEMS ont été identifiés comme l'une des technologies les plus prometteuses du 21<sup>ème</sup> siècle et ont le potentiel de révolutionner à la fois l'industrie et les produits de consommation en combinant la micro-électronique à base de silicium avec la technologie de micro-usinage. Ses techniques et microsystèmes ont le potentiel d'affecter de façon dramatique notre vie et notre façon de vivre.

Les systèmes micro-électromécaniques (MEMS) sont une technologie de processus utilisée pour créer de minuscules dispositifs ou systèmes intégrés combinant des composants mécaniques et électriques. Ils sont fabriqués à l'aide de techniques de traitement par lots des circuits intégrés (CI) et leur taille peut aller de quelques micromètres à quelques millimètres [5]. Ces dispositifs (ou systèmes) ont la capacité de détecter, de contrôler et d'agir à l'échelle micro, et de générer des effets à l'échelle macro.

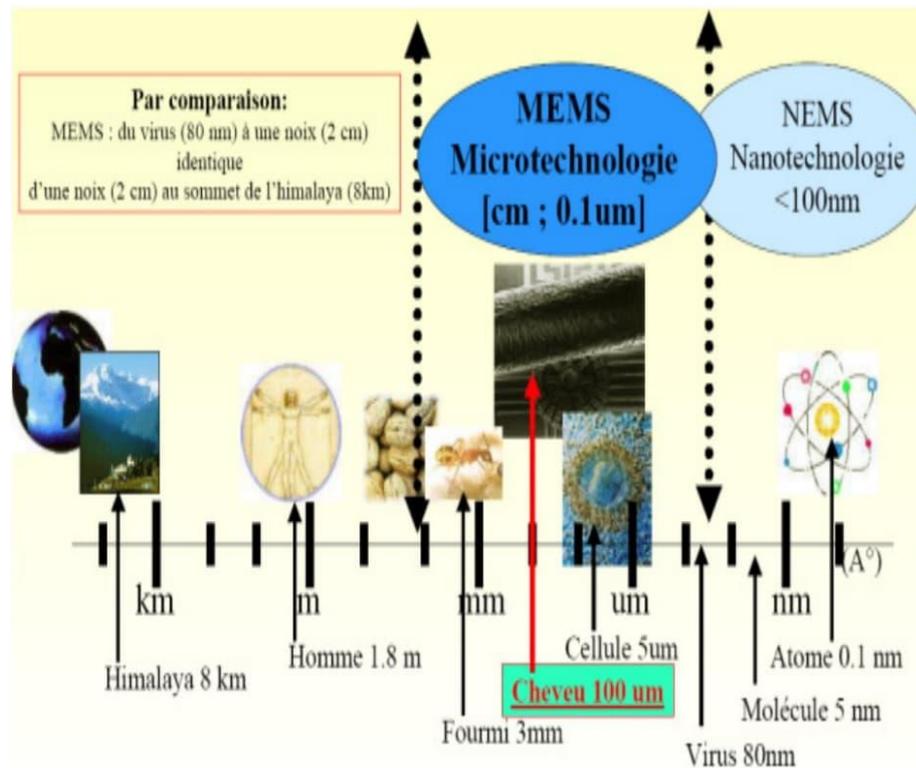


Figure I. 3 le positionnement des microsystèmes dans l'échelle de la taille des objets [3].

Les MEMS est un acronyme d'origine américaine, et sont également appelés Microsystems Technologie (MST) en Europe, Micromachines au Japon ou encore Micro-ingénierie en Angleterre [5, 6]. Ils intègrent généralement des éléments mécaniques couplés à de l'électronique et sont réalisés par des procédés de fabrication issus de la microélectronique. Les MEMS exploitent entre autres, des effets liés à l'électromagnétisme, la thermique et la fluïdique. Ils sont dans notre quotidien, au cœur de la téléphonie, de l'automobile, du médical, des chaînes de production ou des manettes de consoles de jeux [7].

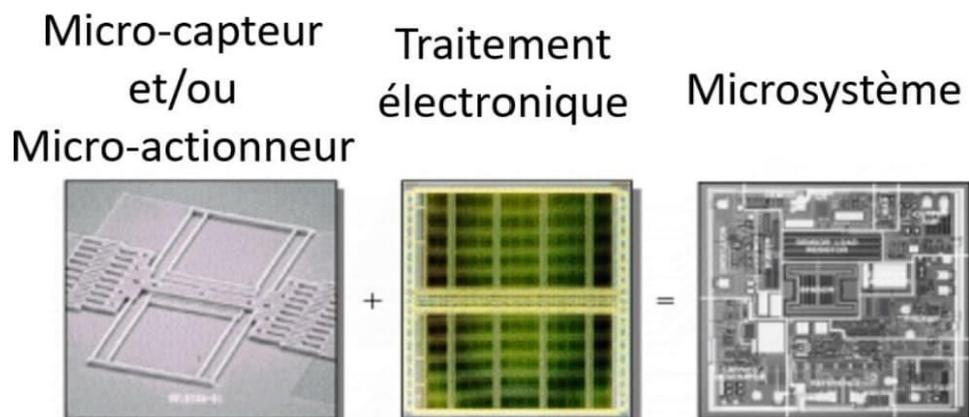


Figure I. 4 Définition d'un microsystème (MEMS) [7].

Les microsystèmes sont de plus en plus multidisciplinaires. Ils sont parfois appelés MOEMS, Bio-MEMS ou RF-MEMS selon leurs fonctions principales (optiques, biologiques, chimiques ou radio-fréquence) [8].

La Figure I.5 illustre les classifications de la technologie des microsystèmes (MST). Bien que MEMS est également appelé MST, à proprement parler, MEMS est une technologie de processus utilisée pour créer ces minuscules dispositifs ou systèmes mécaniques, et par conséquent, il s'agit d'un sous-ensemble de MST.

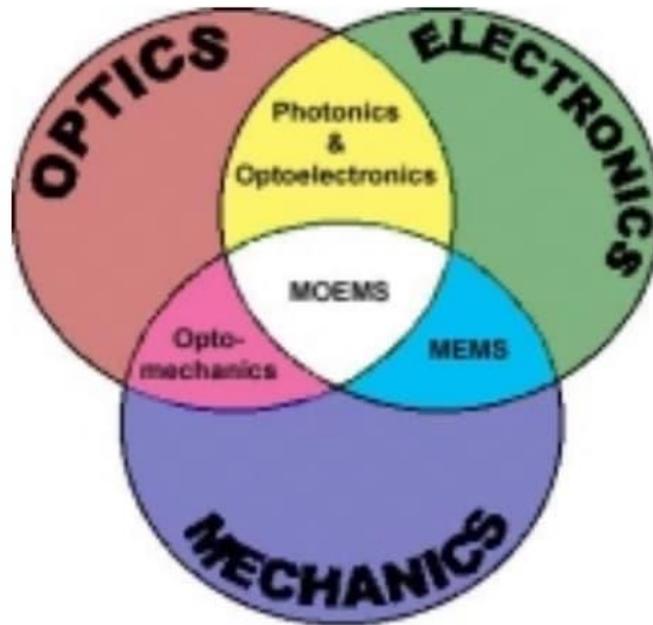


Figure I. 5 Classifications de la technologie des microsystèmes [5].

### I.2.2 Historique de MEMS

-1948 : Invention du transistor au germanium aux Laboratoires Bell (William Shockley).

-1954 : Effet piézorésistif dans le Germanium et le Silicium (C.S. Smith).

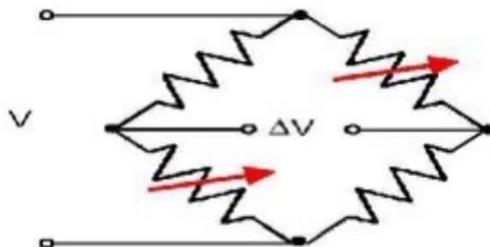
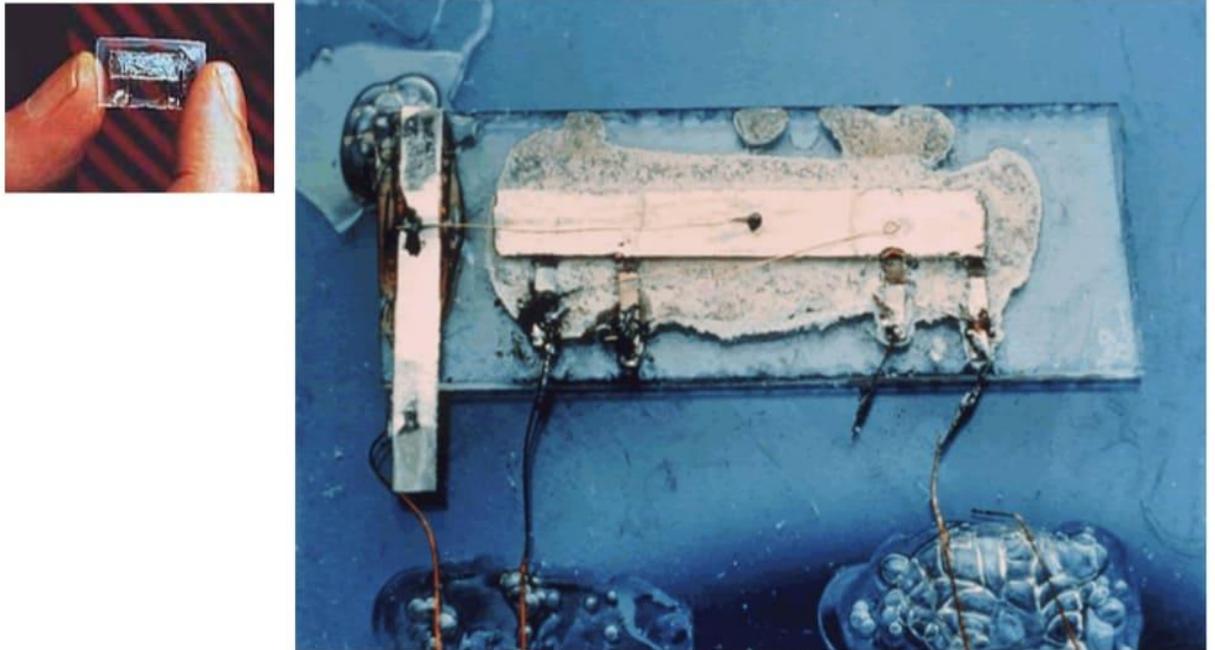


Figure I. 6 Jauges Piézo-résistives (Pont de Wheatstone) [6].

- 1958 : Premier circuit intégré (IC) (J.S. Kilby 1958 / Robert Noyce 1959).



**Figure I. 7 Texas Instrument's First Integrated Circuit [66].**

- 1959 : "Il y a plein de place au fond" (R. Feynman).

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 » [9].

"There's plenty of room at the bottom"  
Lecture given by Dr. Richard Feynman in 1959



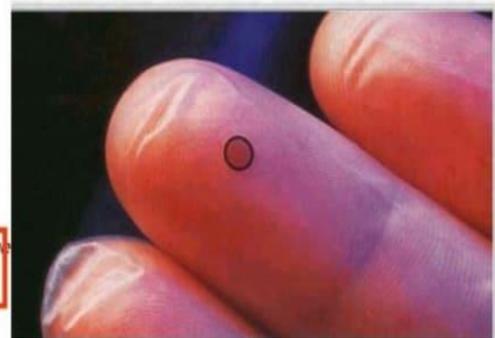
What I want to talk about is the problem of manipulating and controlling things on a small scale.

It is a staggeringly small world that is below. In the year 2000, when they look back at this age, they will wonder why it was not until the year 1960 that anybody began seriously to move in this direction.

*Why cannot we write the entire 24 volumes of the Encyclopedia Britannica on the head of a pin?*

<http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>

Aujourd'hui

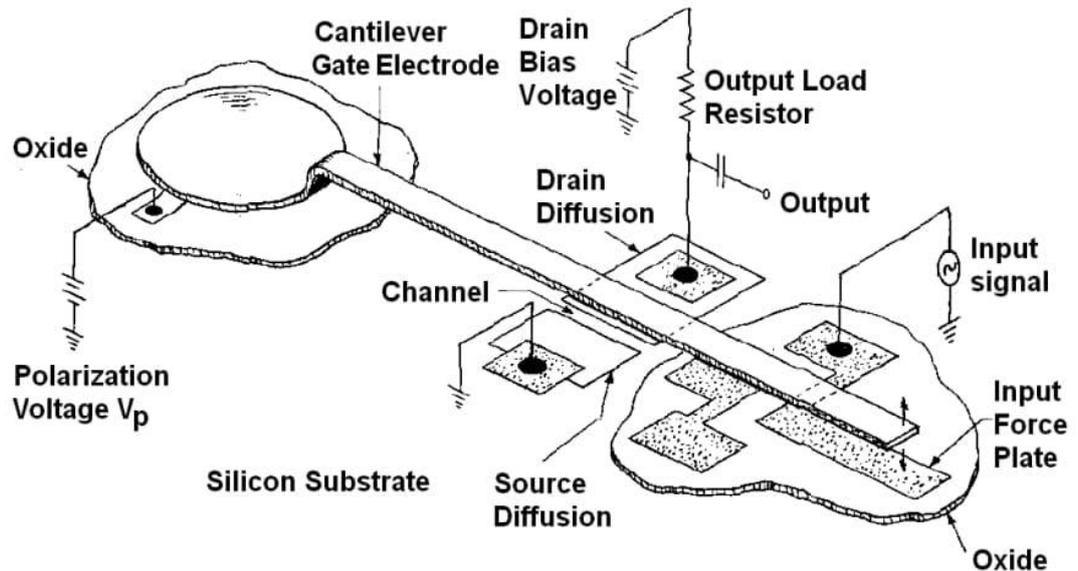


Toute l'Encyclopédie « Britannica » tient sur ce composant constitué de milliard de nano perforations.

**Figure I. 8 There is plenty of the bottom (Richard Feynman) [6].**

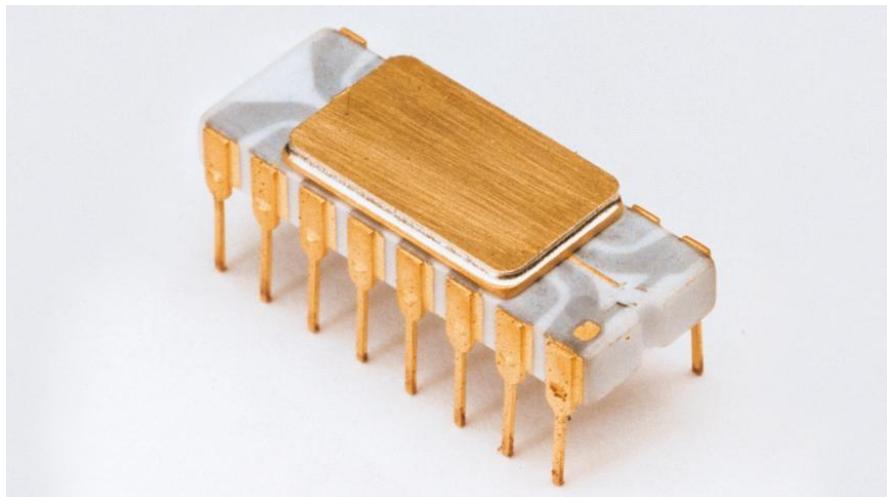
## Revue bibliographique

- 1959 : Premier capteur de pression en silicium démontré (Kulite).
- 1967 : Gravure profonde anisotrope du silicium (H.A. Waggener *et al.*).
- 1968 : Brevet pour un transistor à porte résonnante (procédé de micro-usinage de surface) (H. Nathanson *et al.*).



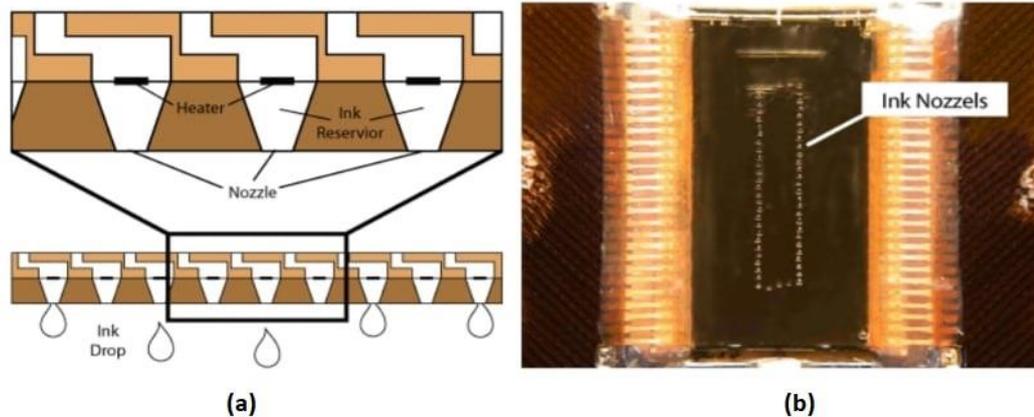
**Figure I. 9 Schéma de principe d'un transistor à grille résonnante constitué d'un faisceau d'ordre 0,1 [10].**

- 1970 : Plaquettes de silicium gravées en vrac utilisées comme capteurs de pression (procédé de micro-usinage en vrac).
- 1971 : Le microprocesseur est inventé.



**Figure I. 10 Le microprocesseur Intel 4004 [11].**

- 1979 : Buse à jet d'encre micro-usinée de HP.

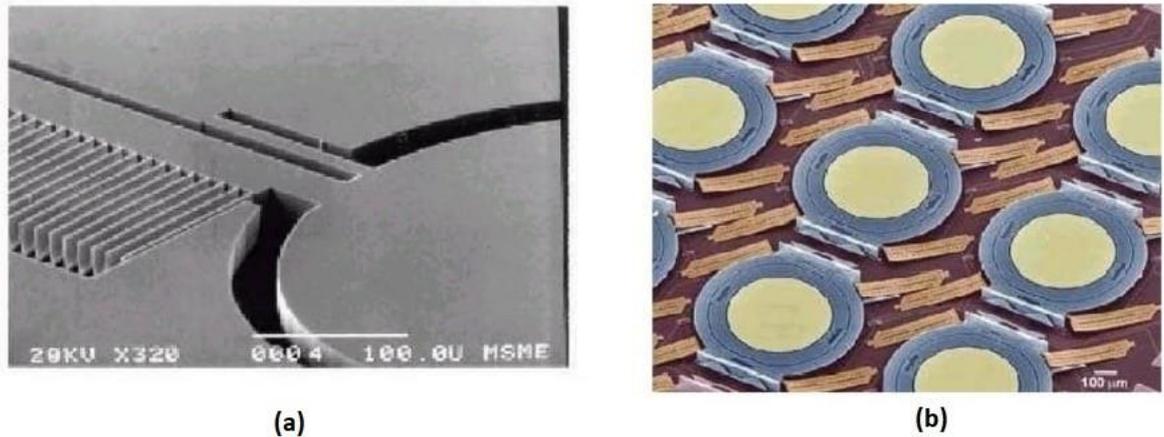


**Figure I. 11 (a) Schéma d'un réseau de buses à jet d'encre (b) Vue rapprochée d'une tête d'impression à jet d'encre commerciale illustrant les buses [12].**

- 1982 : «Le silicium comme matériau de structure», K. Petersen.
- 1982 : Processus LIGA (KfK, Allemagne).
- 1982 : Transducteur de pression sanguine jetable (Honeywell).
- 1983 : Capteur de pression intégré (Honeywell).
- 1983 : "Machinerie infinitésimale", R. Feynman.
- 1985 : Capteur ou capteur de collision (Airbag).
- 1985 : Découverte du "Buckyball".
- 1986 : Le microscope à force atomique est inventé.
- 1986 : Collage des plaquettes de silicium (M. Shimbo).
- 1988 : Capteurs de pression fabriqués en série par collage de plaquettes (Nova Sensor).
- 1988 : Moteurs rotatifs électrostatiques à entraînement latéral (Fan, Tai, Muller).
- 1991 : Charnière en polysilicone (Pister, Judy, Burgett, Fearing).
- 1991 : Découverte du nanotube de carbone.
- 1992 : Modulateur de lumière à réseau (Solgaard, Sandejas, Bloom).
- 1992 : Micro-usinage en vrac (procédé SCREAM, Cornell).
- 1993 : Affichage numérique du miroir (Texas Instruments).
- 1993 : MCNC crée le service de fonderie MUMPS.

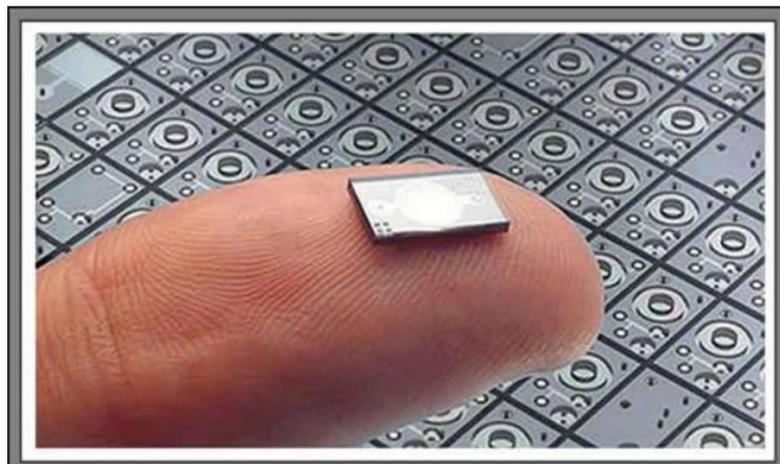
## Revue bibliographique

- 1993 : Premier accéléromètre micro-usiné en surface produit en grande quantité (Analog Devices).
- 1994 : Le procédé Bosch de gravure ionique réactive profonde est breveté.
- 1996 : Richard Smalley met au point une technique pour produire des nanotubes de carbone de diamètre de taille uniforme.
- 1999 : Commutateur de réseau optique (Lucent).



**Figure I. 12 Micro miroir réalisé par une gravure profonde Bosch (a), commutateur optique (b) [6].**

- Années 2000 : Boom des MEMS optiques.
- Années 2000 : Prolifération des BioMEMS.



**Figure I. 13 Pompe à insuline [12].**

- Années 2000 : Le nombre de dispositifs et d'applications MEMS ne cesse d'augmenter.
- Années 2000 : les applications et la technologie NEMS se développent.

## I.2.3 Les avantages et les inconvénients des MEMS

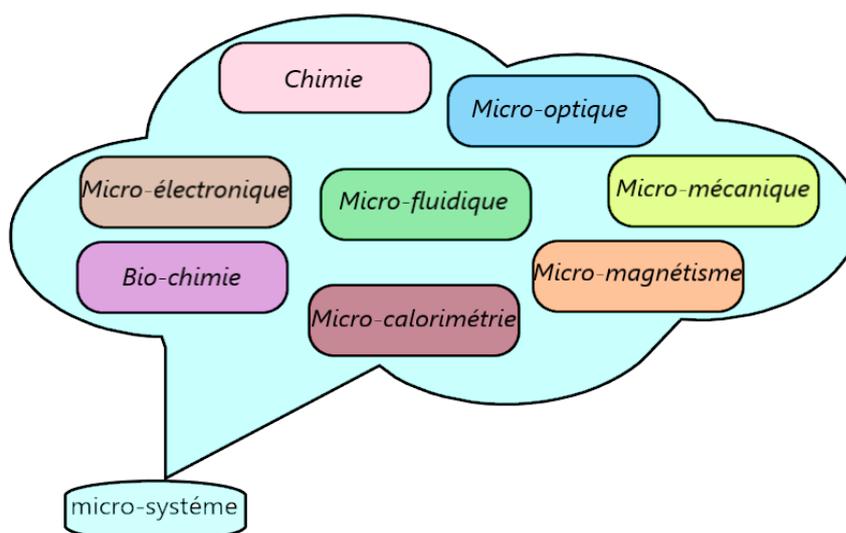
Nous pouvons résumer les avantages et les inconvénients des MEMS dans le tableau suivant :

**Tableau 1 les avantages et les inconvénients des MEMS.**

Les avantages	Les inconvénients
<ul style="list-style-type: none"><li>- Réduction de la taille et du poids des équipements.</li><li>- Réduction de la consommation énergétique.</li><li>- Amélioration des performances (vitesse, sensibilité, etc.)</li><li>- Production collective de composants individuels.</li><li>- La réduction des coûts.</li><li>- Prédominance de certains phénomènes physiques.</li><li>- Spécification de fréquence de fonctionnement et largeur de bande.</li><li>- Fiabilité mécanique élevée.</li><li>- Fabrication collective.</li><li>- Motivation scientifique: explorer des «objets» ou des systèmes de plus en plus petits</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>- Traitement fin dans certains micro-systèmes.</li><li>- Complexité de plus en plus accrue.</li></ul>

## I.2.4 Domaines d'application des MEMS

Les micro-systèmes existent dans de nombreux domaines et outils que nous utilisons dans notre vie quotidienne. La figure suivante peut résumer ces différents domaines.



**Figure I. 14 Les domaines d'application des MEMS.**

Le tableau suivant nous donne des exemples de quelques domaines d'applications des MEMS :

**Tableau 2 Les Applications du MEMS [5].**

<b>Automobile</b>	<b>Électronique</b>	<b>Médecine</b>	<b>Communications</b>	<b>Défense</b>
capteurs de navigation interne	Têtes de disques durs	Capteur de pression sanguine	composants de réseau fibre optique	Munitions orientation
capteur de compresseur de climatisation	Imprimantes à têtes jet d'encre	stimulateurs musculaires et systèmes de livraison de drogue	Relais RF, commutateurs et filtres	Surveillance
Capteurs de force de freinage et accéléromètres de contrôle de suspension	Projection écran téléviseurs	Implantés capteurs de pression	Projection écrans dans portable communications portables et l'instrumentation	Systèmes d'armement
capteurs niveau de carburant et pression de vapeur	capteurs de tremblement de terre	Prothèses	Oscillateurs commandés en tension oscillateurs (VCO)	capteurs Embarqués
Capteurs d'airbag	Avionique capteurs de pression	Instruments analytiques miniatures	Séparateurs et coupleurs	Stockage des données
"Pneus "intelligents	Systèmes de stockage de masses numériques	Stimulateurs cardiaques	Lasers accordables	Contrôle des aéronefs

### I.2.5 Relations entre les MEMS et la microfluidique

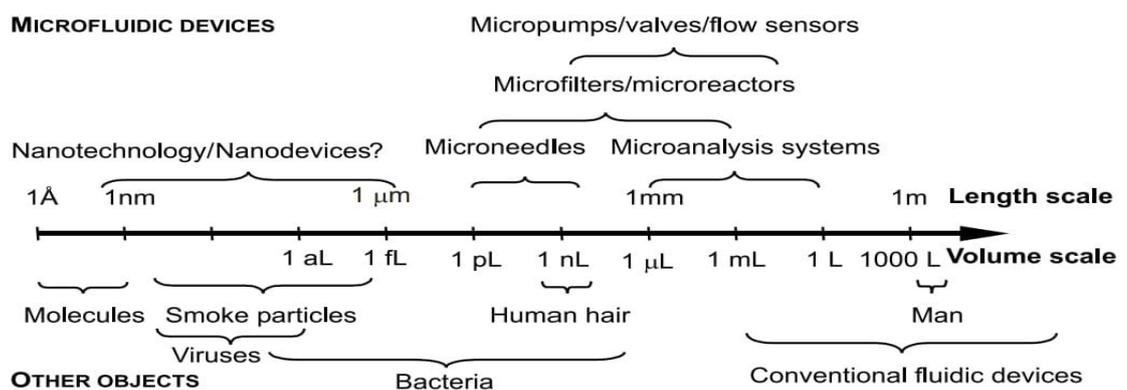
Depuis le discours stimulant de Richard Feynman en 1959 : « Il y a beaucoup de place en bas » [9], l'humanité a connu le développement technologique le plus rapide de son histoire : La miniaturisation des appareils électroniques. La microélectronique était la technologie habilitante la plus importante du dernier siècle.

Avec les circuits intégrés et les progrès du traitement de l'information, la microélectronique a changé notre façon de travailler, de découvrir et d'inventer. Depuis ses débuts jusqu'à la fin des années 1990, la miniaturisation en microélectronique a suivi la loi de Moore [13], doublant la densité d'intégration tous les 18 mois. Présentement à la limite de la technologie de la photolithographie (ayant une taille de structure inférieure à 100 nm), ce rythme devrait ralentir pour doubler la

densité d'intégration tous les 24 à 36 mois [14]. Jusqu'à récemment, le développement de dispositifs non électroniques miniaturisés était en retard sur la tendance à la miniaturisation en microélectronique.

À la fin des années 1970, la technologie du silicium a été étendue à l'usinage micro-dispositifs mécaniques [15] qui sont devenus plus tard connus sous le nom de systèmes micro-électromécaniques (MEMS). Cependant, il est inapproprié, bien que courant, d'utiliser MEMS comme terme pour la micro-technologie en usage aujourd'hui. Avec des composants fluidiques et optiques dans les micro-dispositifs, la technologie des microsystèmes (MST) est une description plus précise. Le développement de capteurs de micro-débit, des micro-pompes et des micro-vannes de la fin des années 1980, dominait les premiers stades de la microfluidique. Cependant, le terrain a été sérieusement et rapidement développé depuis l'introduction par Manz et al, à la cinquième conférence internationale sur les capteurs et actionneurs à semi-conducteurs (Transducers '89), qui ont indiqué que les sciences de la vie et la chimie sont les principaux domaines d'application de la micro-fluidique [16].

Plusieurs termes concurrents, tels que « micro-fluides », « MEMS-fluidique » ou « Bio-MEMS » et « micro-fluidique » sont apparus comme le nom de la nouvelle discipline de recherche traitant des phénomènes de transport et des dispositifs à base de fluides à l'échelle microscopique [17]. Avec tous ces termes différents pour fondamentalement décrire la même chose (c'est-à-dire des flux à petite échelle), il est logique d'essayer de converger vers une terminologie acceptée en posant la question : Comment s'intègre l'échelle de longueur à laquelle les hypothèses de continuum se décomposent ?



**Figure I. 15** Caractéristiques dimensionnelles des dispositifs micro-fluidiques [18].

### I.2.5.1 Application des MEMS dans la microfluidique

Parmi tous les microsystèmes, on les retrouve à fluides qui sont des dispositifs utilisant ou véhiculant des fluides liquides ou gazeux. Permettant d'envisager le transport et la manipulation de nano litres de fluide dans des canaux de la taille d'un cheveu [3], voici quelques exemples de micro-systèmes à fluide :

- **Le médical**

L'ouverture des microsystèmes fluidiques aux laboratoires sur puces est d'un grand apport pour la médecine moderne [19]. L'application de la microfluidique médicale est très diverse, par exemple les micro-pompes à insuline qui deviennent de plus en plus courantes et compactes afin de permettre aux usagers d'être autonomes [3] (voir Figure I.16).



Figure I. 16 Pompe en silicium permettant la délivrance contrôlée de médicaments [3].

- **Les biotechnologies**

Le développement de la micro-fabrication a permis de réaliser des microsystèmes totalement intégrés possédant de multiples fonctions telles que le mélange de réactifs, la séparation, l'analyse... avec une haute sensibilité et un bon rendement [19].

Ce qui a donné naissance à « Lab-on-chip » permettant des processus biologiques sur petite surface.

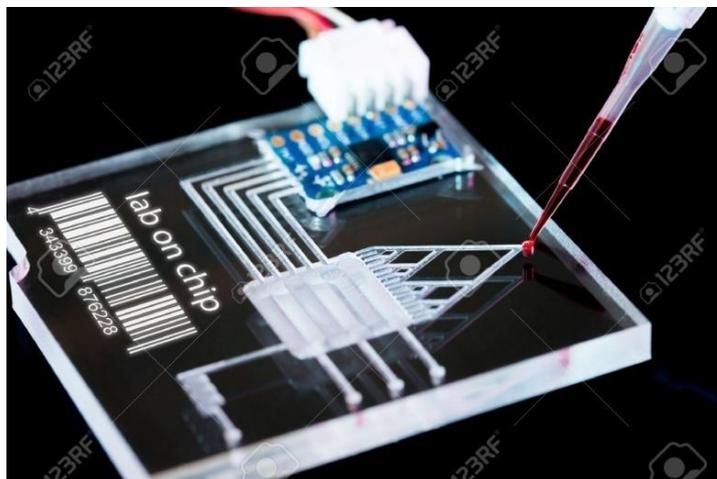
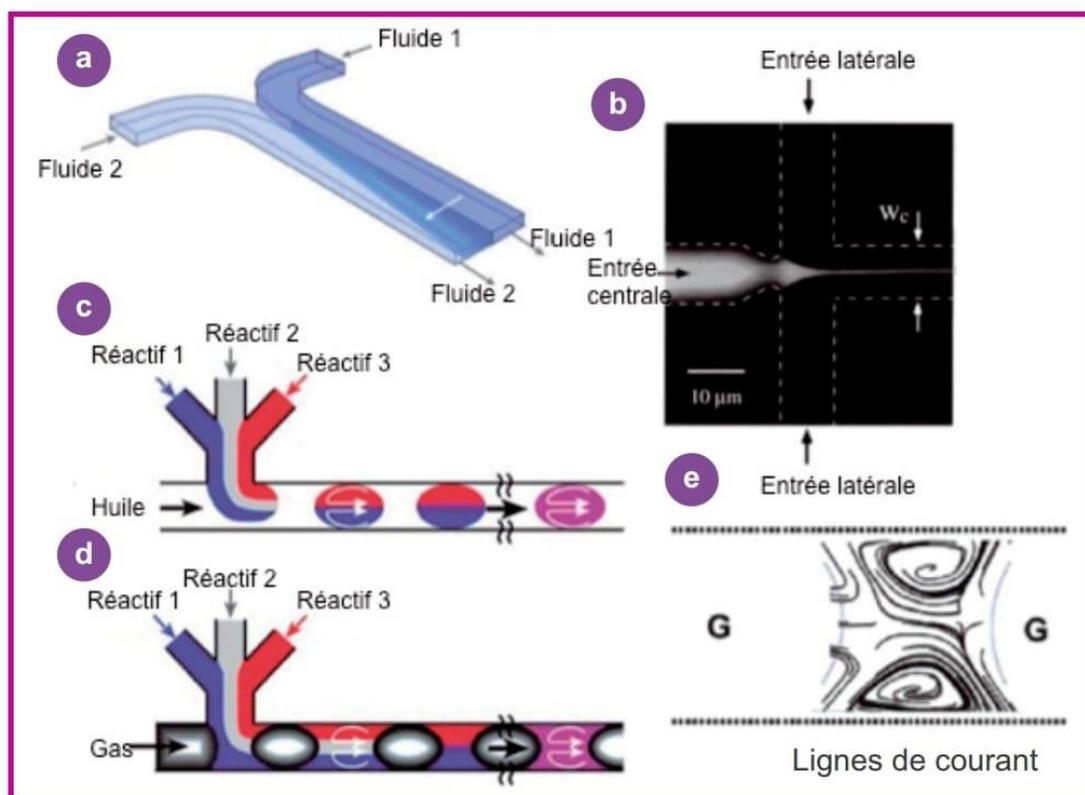


Figure I. 17 Laboratoire sur Puce [20].

- **Le génie chimie**

La microfluidique de gouttelettes trouve également des applications en chimie : Formation de particules et étude de réactions chimiques [19].

Dès 1996, les gens ont réalisé l'intérêt des microsystèmes pour le génie chimique. Les petites quantités mises en jeu permettent de mieux contrôler certaines réactions chimiques rendant la maîtrise du risque plus facile. Les microréacteurs peuvent alors être de simples gouttes [3].



**Figure I. 18 Exemples de techniques de mélangeurs passifs utilisés en synthèse chimique [21].**

a) mélange de deux flux de fluides miscibles par inter-diffusion ; b) mélange par focalisation du flux interne (centre) par un flux externe (latéral) ; c) systèmes microfluidiques à gouttelettes ou d) à flux segmentés ; e) agrandissement de la recirculation des lignes de courant dans une gouttelette du réacteur à flux segmentés.

## I.3 Les écoulements microfluidiques

### I.3.1 Définition

Les prémices de la microfluidique sont apparues vers la fin des années 1980 avec le développement de micro-pompes et micro-vannes. Néanmoins, cette discipline peut être qualifiée de bien plus ancienne, puisque dès 1846 Poiseuille s'est intéressé à la circulation du sang au sein de capillaires [19].

Dans le monde des vivants, les écoulements de fluide sont généralement confinés dans des micro-canaux. Il en est ainsi des écoulements dans les xylèmes des tiges de plantes dont le diamètre est typiquement de l'ordre d'une dizaine de micromètres ou du sang dans les artérioles dont le diamètre est de l'ordre de 50 – 100  $\mu\text{m}$  [4].

La microfluidique, ou l'art de manipuler des petits volumes à l'échelle micrométrique, peut être définie comme la science étudiant le transport des fluides de l'échelle de quelques microns à quelques centaines de microns [22].

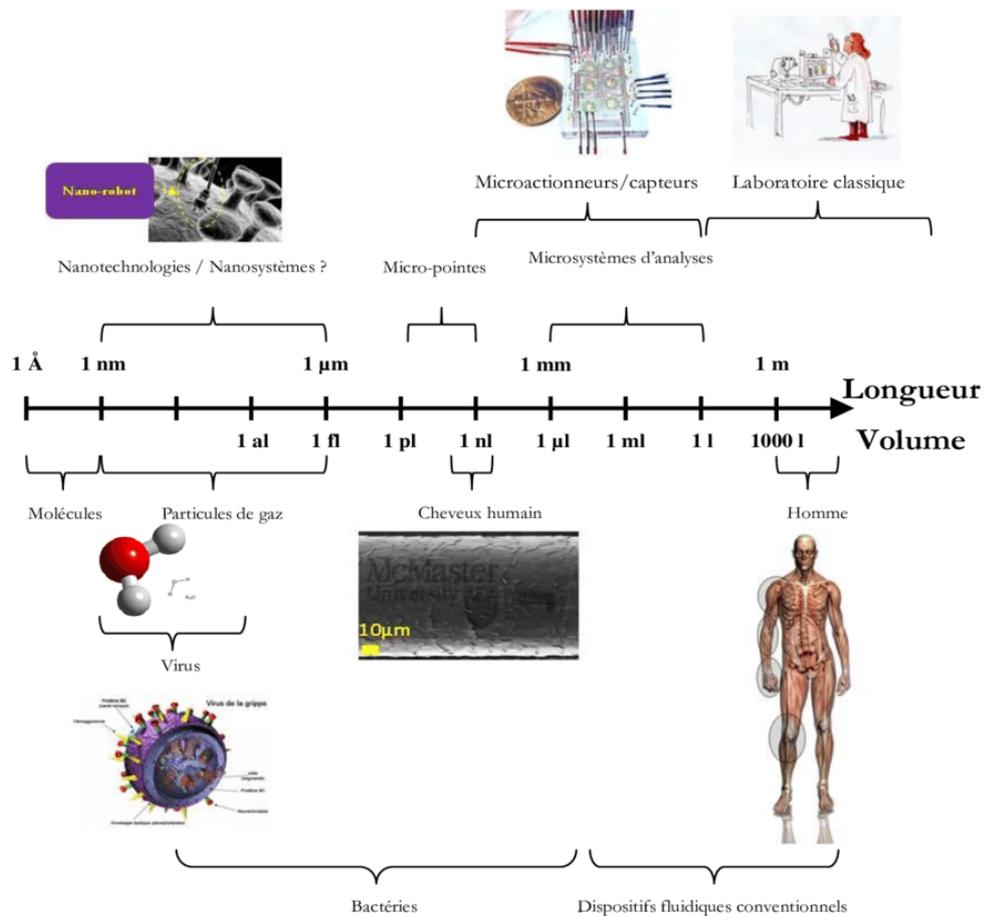


Figure I. 19 Dimensions caractéristiques des dispositifs micro-fluidiques [22].

Alors on peut définir la microfluidique comme la science et technologie des systèmes qui manipulent des fluides à l'échelle micrométrique, et dont au moins l'une des dimensions caractéristiques est de l'ordre du micromètre [23].

Du point de vue physique, on définira donc les écoulements microfluidiques comme des écoulements de fluides (gaz ou liquides) ayant au moins une dimension spatiale caractéristique de l'ordre du micromètre ( $L \sim 1 - 500 \mu\text{m}$ ) et des vitesses de l'ordre de ( $V \sim 100 \mu\text{m s}^{-1} - 1 \text{mm s}^{-1}$ ) [4].

### I.3.2 Propriétés des écoulements microfluidiques

#### I.3.2.1 Nombres adimensionnels en microfluidique gazeuse

Les nombres de Mach et de Reynolds sont les deux nombres adimensionnels les plus employés pour classifier les écoulements gazeux [24].

- *Le nombre de Reynolds*

Le nombre de Reynolds  $Re$  est un nombre sans dimension utilisé en mécanique des fluides. Il a été prouvé pour la première fois par Osborne Reynolds en 1883. Le nombre de Reynolds  $Re$  est défini par le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses au sein d'un fluide en mouvement.

$$Re = \frac{\rho UL}{\eta} \quad \begin{array}{l} \longleftarrow \text{ Terme convectif} \\ \longleftarrow \text{ Terme visqueux} \end{array}$$

Où  $\rho$  est la masse volumique du fluide,  $U$  est la vitesse caractéristique de l'écoulement,  $L$  est la longueur caractéristique de l'écoulement et  $\eta$  est la viscosité (dynamique) du fluide.

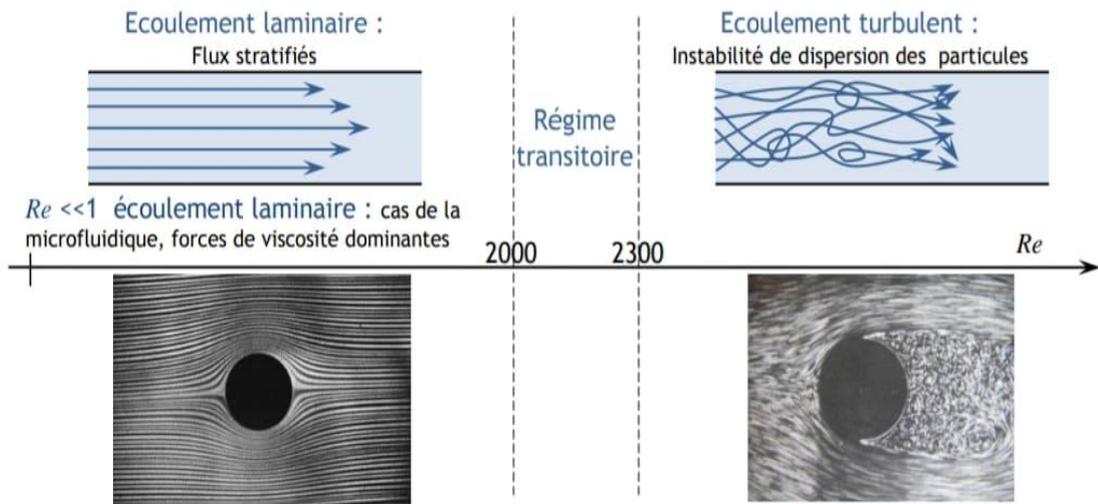
Trois types d'écoulement peuvent être distingués en fonction de l'ordre de grandeur de ce nombre, dans tous les cas, les transitions interviennent progressivement.

- $Re \leq 1$  : Les forces visqueuses sont prépondérantes, l'inertie est négligeable et l'écoulement du fluide est réversible. Il s'agit du régime d'écoulement laminaire, caractéristique de celui mis en œuvre dans les canaux microfluidiques.
- $1 \leq Re \lesssim 2\,000$  : Les forces d'inertie deviennent prépondérantes mais l'écoulement reste laminaire. Il s'agit d'un régime transitoire.
- $Re \gtrsim 2\,000$  : Les forces d'inertie sont très importantes et l'écoulement est dit turbulent.

la Figure I.20 représente les types d'écoulement en fonction de  $Re$ .

Dans un canal microfluidique, la vitesse de l'écoulement est de l'ordre de 0,01 m/s à 1 m/s. Pour un canal de dimension caractéristique de 100  $\mu\text{m}$  et de l'eau, le nombre de

Reynolds varie de 0,1 à 100 et le régime est laminaire [25]. Donc Les écoulements dans le domaine de la microfluidique sont principalement laminaires.



**Figure I. 20 Caractérisation du type d'écoulement en fonction du nombre de Reynolds  $Re$  [26].**

- *Le nombre de Mach*

Le nombre de Mach, noté  $Ma$ , exprime le rapport de la vitesse locale d'un fluide par rapport à la vitesse du son dans ce même fluide [27] :

$$Ma = \frac{U}{a}$$

Avec  $U$  la vitesse caractéristique du fluide et  $a$  la vitesse de propagation du son dans ce même fluide.

En général, on considère qu'un nombre de Mach inférieur à 0,3 nous indique que le fluide est incompressible. Dans beaucoup de cas, particulièrement en microfluidique et dans tous ces travaux, la vitesse d'écoulement est très inférieure à la vitesse de propagation du son dans les liquides. Les nombres de Mach sont faibles et les liquides peuvent être considérés incompressibles [27].

### I.3.2.2 Taux de Raréfaction

Pour caractériser le régime de l'écoulement en termes de continuité spatiale, il est nécessaire d'évaluer le taux de raréfaction à l'aide d'un nombre adimensionnel appelé nombre de Knudsen [28].

$$Kn = \frac{\lambda}{L}$$

Où  $\lambda$  : Libre parcours moyen des molécules et  $L$  : La longueur caractéristique de l'écoulement.

## Revue bibliographique

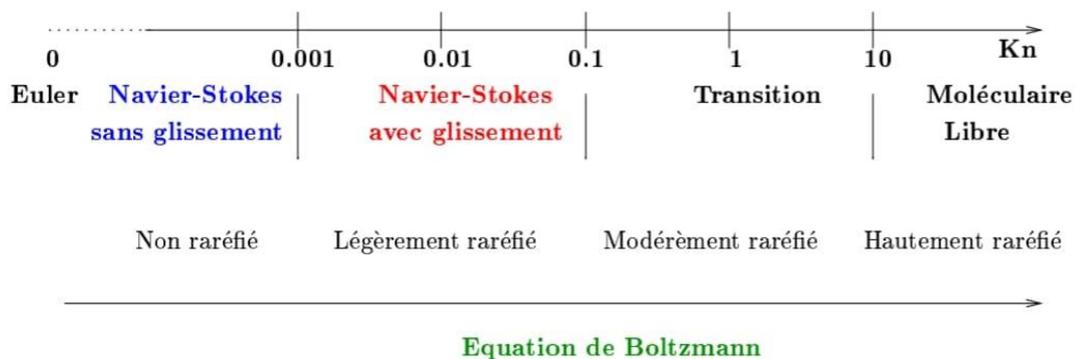
Le nombre de Knudsen, qui caractérise la raréfaction de l'écoulement, peut par ailleurs s'exprimer en fonction du nombre de Mach  $Ma$  et du nombre de Reynolds  $Re$ , par

$$Kn = \sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}} \frac{Ma}{Re}$$

Dans cette équation,  $\gamma$  représente le rapport des chaleurs spécifiques.

Ce qui montre le lien entre effets de raréfaction et de compressibilité, ces derniers doivent être pris en compte lorsque  $Ma > 0,2$  [29].

La raréfaction du gaz augmente lorsque les dimensions du système diminuent ou lorsque le libre parcours moyen des molécules augmente [30].



**Figure I. 21 Différents régimes d'écoulements gazeux en fonction de nombre de Knudsen [30].**

Comme nous le montre la figure ci-dessus, le nombre de Knudsen délimite plusieurs régimes d'écoulements. Quelle que soit la valeur de  $Kn$ , une description cinétique du gaz (équation de Boltzmann) est toujours disponible [30].

### I.3.2.3 Equation de Navier-Stokes

Les écoulements de fluides continus Newtoniens peuvent être représentés par l'équation de Navier-Stokes [31] :

$$\rho \frac{\partial \vec{u}}{\partial t} = -\underbrace{\rho \vec{u} \nabla \vec{u}}_{\text{Terme convectif}} - \underbrace{\nabla p}_{\text{Terme visqueux}} + \underbrace{\eta \Delta \vec{u}}_{\text{Terme visqueux}}$$

$-\vec{\nabla}p$  correspond au gradient de pression.

Dans certains cas, cette équation reste valable en microfluidique, mais elle peut être simplifiée pour un  $Re$  faible lorsque les forces visqueuses prennent l'avantage sur les forces inertielles. Si aucune force n'est appliquée sur le liquide (ex : gravité, électrostatique) l'équation devient l'équation de Stokes [31] :

$$\Delta p = \eta \Delta \vec{u}$$

### I.3.2.4 Perte de charge dans les micro-canaux fluidique

L'écoulement d'un fluide dans un micro-canal dépend essentiellement de la taille de ce dernier. Plus cette taille est petite, plus l'écoulement est difficile [32].

Un premier phénomène lié à la réduction de la taille des écoulements est la perte de charge. Elle correspond à la perte d'énergie due aux frottements du fluide sur les couches limites visqueuses des parois, notée  $\Delta p$  :

$$\Delta p = \frac{8\eta L}{\pi R^4} Q_v \quad (\text{Cas d'un tube})$$

$$\Delta p = \frac{3\eta L}{lh^3} Q_v \quad (\text{Cas d'un canal à section rectangulaire})$$

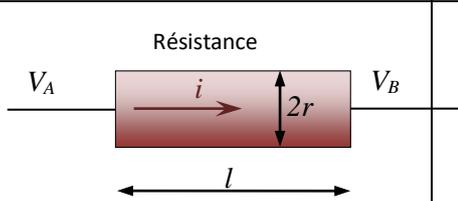
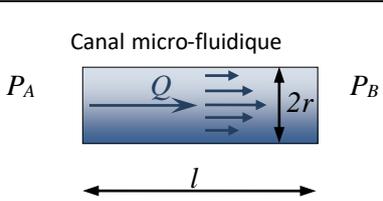
où  $\eta$  (Pa.s) est la viscosité dynamique du fluide,  $L$  (m) la longueur du canal,  $Q_v$  ( $m^3/s$ ) le débit du fluide,  $R$  (m) son diamètre dans le cas d'un tube. Dans le cas d'un canal de section rectangulaire,  $L$  représente la largeur et  $h$  la profondeur.

### I.3.2.5 Résistance hydraulique

Les écoulements en microfluidique trouvent des similitudes avec les lois de l'électronique. Les canaux microfluidiques possèdent une résistance hydraulique  $R_H$  [Pa.s/ $m^3$ ] et voient apparaître un écoulement de débit  $Q_v$  [ $m^3/s$ ] quand est appliquée une différence de pression à ses bornes  $\Delta P$  [Pa]. On retrouve l'analogie avec la loi de d'Ohm  $U=RI$ . Les canaux présentent une résistance fluïdique estimable par des équations dépendantes de leurs géométries [31].

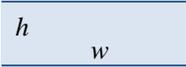
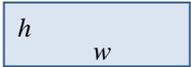
$$\Delta P = R_H \cdot Q_v$$

**Tableau 3 Analogie entre résistance électrique et résistance hydraulique [26].**

	Résistance électrique	Résistance hydraulique
Schémas		
Analogie des caractéristiques	Tension électrique $V$	Pression hydraulique $P$
	Courant $i$	Débit $Q$
Loi physique	Loi d'Ohm : $V_A - V_B = R \cdot i$	Loi de Poiseuille : $P_A - P_B = R_H \cdot Q$
Résistances	$R = \frac{\rho_{elec} l}{\pi \cdot r^2}$	$R_H = \frac{8\eta l}{\pi \cdot r^4}$

De manière plus classique, on prend les ordres de grandeur suivants pour le calcul de  $R_H$  :

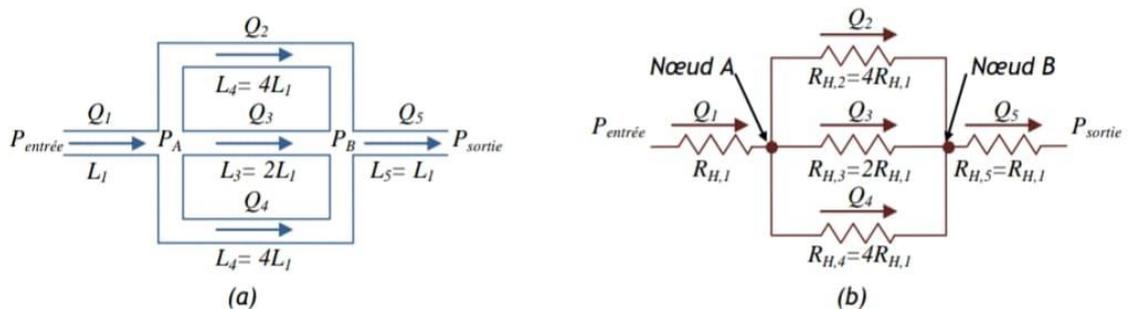
**Tableau 4 Formules simplifiées de la résistance hydraulique pour différents cas de section [26].**

	Cercle	2 plaques	Carré	Rectangle
Schémas				
Caractéristique	Rayon $a$	$h \ll w$	$h = w$	$0.2 < h/w < 1$
Résistance hydraulique $R_H$	$\frac{8}{\pi} \eta L \frac{1}{a^4}$	$12 \eta L \frac{1}{h^3 w}$	$28.4 \eta L \frac{1}{h^4}$	$\frac{12 \eta L}{1 - 0.63(h/w)} \frac{1}{h^3 w}$

L'analogie « électrique/hydraulique » simplifie le dimensionnement d'un réseau microfluidique et l'étude de son comportement [26].

Les lois applicables à l'électronique comme la loi de Kirchhoff (loi des nœuds, loi des mailles) et des équivalences sont aussi valables pour la microfluidique. Les valeurs des résistances hydrauliques sont certes approximatives mais permettent tout de même de dimensionner rapidement des circuits microfluidiques [31].

On représente un réseau microfluidique par son schéma équivalent électrique (Figure I.22).



**Figure I. 22 Exemple d'un réseau hydraulique(a), et de son schéma électrique équivalent (b) [26].**

### I.3.3 Application des micro-canaux

Dans le domaine de la microfluidique, les structures les plus essentielles dans les systèmes sont les micro-canaux. Leurs intérêts et leurs différentes applications sont divers comme pour des colonnes de séparation pour différents types de chromatographie, pour des échangeurs thermiques avec des microréacteurs, pour le refroidissement des puces électroniques (micro-caloducs) ou pour des connecteurs entre les systèmes micro-fluidiques (micro-valve, micro-réacteurs...) et de capteurs [33].

Nous exposerons maintenant quelques applications des micro-canaux qui ont connu un grand développement et ont eu un grand mérite en facilitant la vie quotidienne.

- **Micro canaux dans les imprimantes à jet d'encre**

Apparu dans les années 1990, incorpore un réservoir pour l'encre, un élément chauffant pour la mise en mouvement du fluide, et une buse. Aujourd'hui, des dizaines de millions d'imprimantes à jet d'encre utilisent des technologies micro-fluidiques et des milliards de documents sont écrits et lus grâce à la micro-fluidique [34].

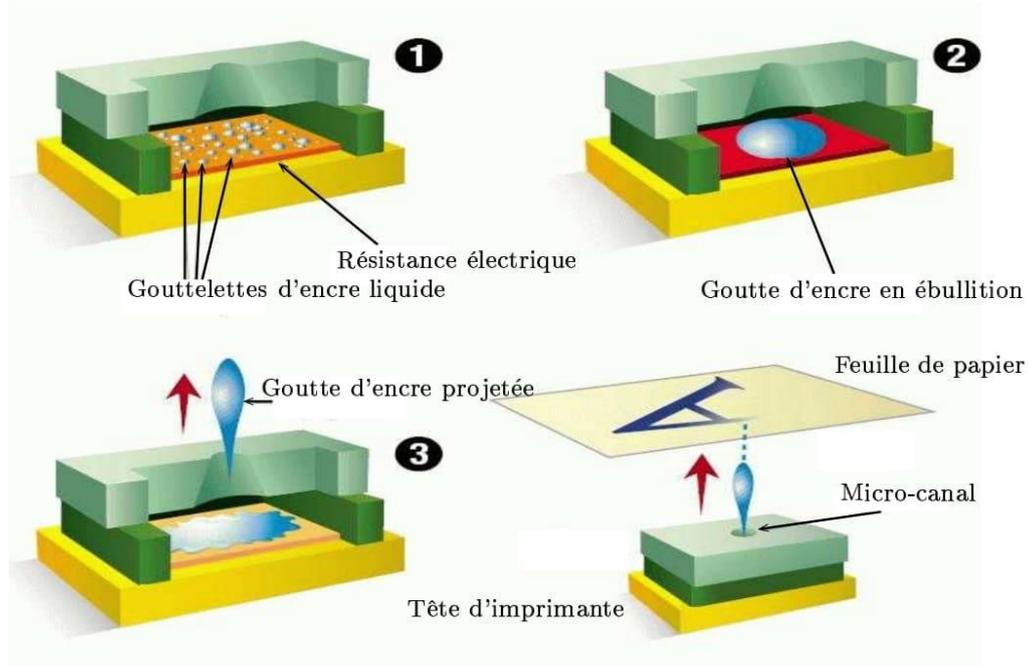


Figure I. 23 Imprimante à jet d'encre [30].

- **Micro canaux dans les micro-échangeurs**

Aujourd'hui, les progrès de l'usinage de précision des micro-canaux ont permis à la structure des micro-échangeurs de chaleur de transférer de grandes quantités de chaleur par unité de surface.

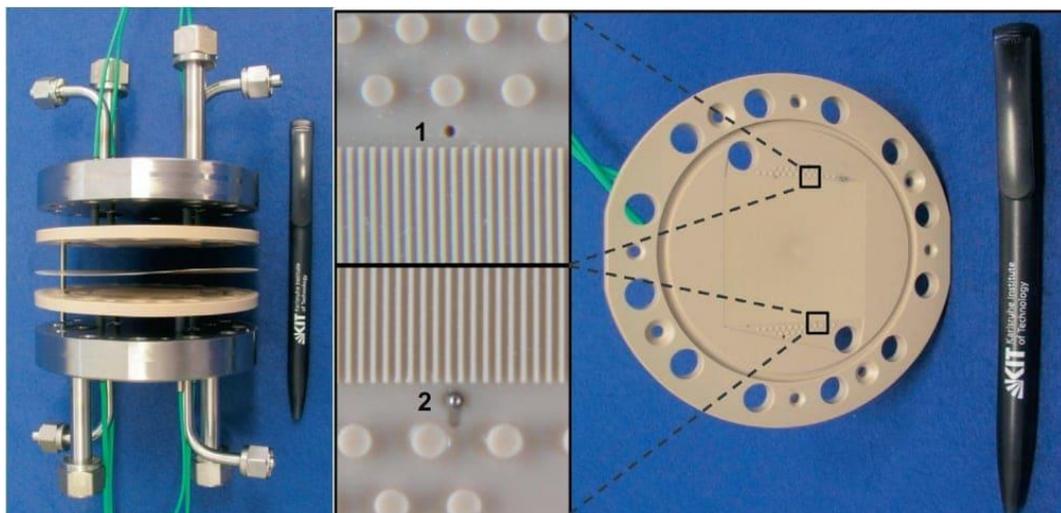


Figure I. 24 Micro-échangeur thermique [28].

- **Micro canaux dans les laboratoires sur puce**

Pour des systèmes permettant à partir d'une goutte de sang prélevée sur un malade de diagnostiquer la réalité d'une crise cardiaque. Les résultats de l'analyse sont donnés après le traitement sur un micro-ordinateur. Le diagnostic est délivré en 15 minutes, alors que les systèmes traditionnels nécessitaient d'une dizaine d'heures [34].

La plupart des laboratoires sur puces utilisent des composants micro-fluidique tels que micro-canaux, micro-réservoirs et micro-pompes. Les difficultés principales résident dans la miniaturisation et dans le dimensionnement de ces composants. En effet, à l'échelle microscopique, les forces de frottement et les forces de surface ont une influence importante. Les avantages principaux des laboratoires sur puces sont la facilité d'utilisation, le faible coût, la rapidité et la basse consommation d'échantillons [30].

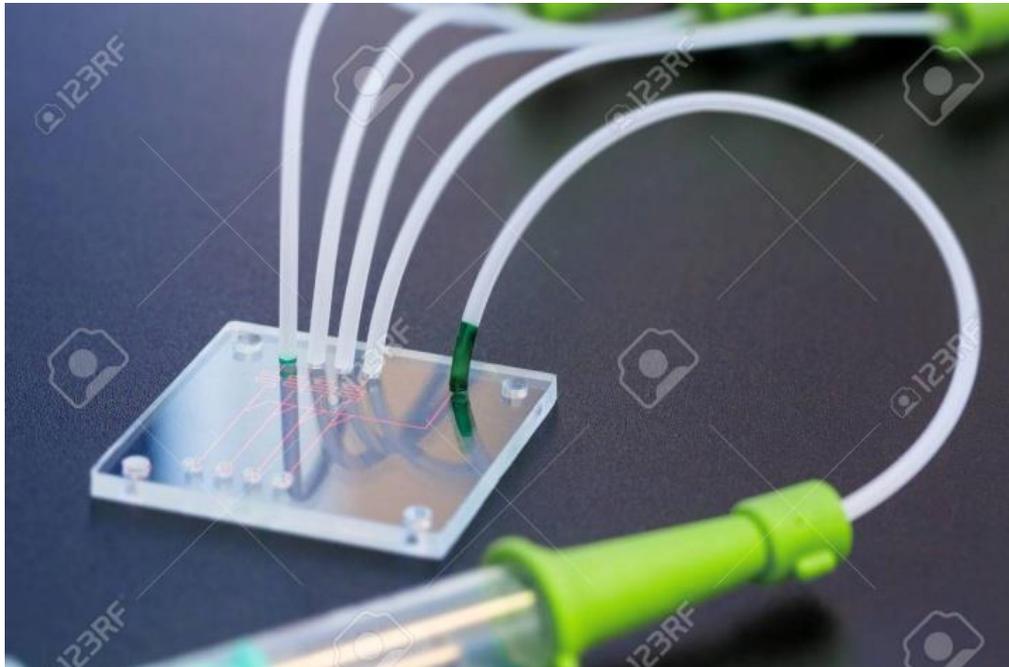


Figure I. 25 Laboratoire sur puce [20].

### I.4 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons fait une revue bibliographique qui a abordé plusieurs points. Nous en avons consacré une grande partie pour parler des systèmes micro-électromécaniques MEMS et leurs diverses applications, ces systèmes sont devenus considérés comme essentiels dans la vie en raison de sa grande importance. Ensuite nous avons abordé les écoulements microfluidiques et on à discuter aussi de leurs nombreuses propriétés.

---

## Chapitre II: La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

---

## II.1 La Méthode de Monte Carlo

### II.1.1 Introduction

De manière générale, la simulation numérique permet d'étudier un système donné dont on connaît les interactions complexes, de mesurer les effets de certaines variations des paramètres sur le comportement global du système, voire d'expérimenter de nouvelles situations. Lorsque dans la simulation intervient un élément aléatoire, on parle alors de simulation aléatoire (ou stochastique) [35].

Le terme méthode de Monte Carlo désigne toute méthode visant à calculer une valeur numérique en utilisant des procédés aléatoires, c'est à dire des techniques probabilistes [36, 37].

Les méthodes de Monte Carlo (MC) ont connu leur essor lors de la seconde guerre mondiale, notamment dans le cadre du projet américain Manhattan portant sur le développement de l'arme nucléaire [38]. Cette époque correspond également à la construction des premiers "ordinateurs". Ce projet ayant été classé "secret défense", il est difficile de savoir exactement qui parmi ses pionniers : Von Neumann, Ulam, Metropolis a proposé le nom de "Monte Carlo". Quoi qu'il en soit, ce terme fait référence aux jeux de hasard : la capitale de la principauté de Monaco, avec ses casinos, ayant d'es cette époque une solide réputation dans la société mondaine internationale [39].

La méthode de MC était très importante pour les différentes simulations exigées pour le projet de Manhattan, à l'époque la simulation était fortement limitée par les outils informatiques. Cependant, ce n'est qu'après l'invention des ordinateurs électroniques (1945), que la simulation Monte Carlo a commencé à être bien étudiée [40].

Accessibilité de l'ordinateur et facilité d'utilisation lors de la résolution des problèmes réalistes ont popularisé ces méthodes. Aujourd'hui, elles sont considérées l'un des outils les plus couramment utilisés par les ingénieurs. En physique la simulation probabiliste permet d'estimer la forme des particules du signal ou La sensibilité du détecteur et les problèmes de transmission ou de diffusion. En mathématiques financières, elles sont généralement utilisées pour calculer et développer des produits financiers.

Leur principe consiste à modéliser le problème considéré sous forme de l'intégrale d'une fonction en utilisant les outils du calcul des probabilités puis de la simuler numériquement en l'approchant par la moyenne de la fonction en des points pseudo-aléatoires [38].

Cette méthode consiste à échantillonner par une technique de simulation appropriée les paramètres aléatoires d'entrée puis un calcul déterministe est effectué pour chaque réalisation simulée des paramètres [41].

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

---

### II.1.2 Bref historique des méthodes de Monte Carlo (MC)

Les méthodes de Monte Carlo sont nées au Laboratoire national de Los Alamos dans les premières années qui ont suivi la seconde guerre mondiale.

Après la seconde guerre mondiale. Le premier ordinateur électronique des États-Unis venait d'être achevé (l'ENIAC), et les scientifiques de Los Alamos réfléchissaient à la manière de l'utiliser pour la conception d'armes thermonucléaires (la bombe H).

Fin 1946, Stanislaw Ulam a suggéré l'utilisation de l'échantillonnage aléatoire pour simuler les trajectoires de vol des neutrons, et John Von Neumann a élaboré une proposition détaillée au début de 1947. Cela a conduit à des simulations à petite échelle dont les résultats ont été indispensables pour mener à bien le projet. Metropolis et Ulam [1949] ont publié un article en 1949 décrivant leurs idées, qui a suscité de nombreuses recherches dans les années 1950.

Le nom de la méthode Monte Carlo vient d'une ville de Monaco, célèbre pour ses casinos (comme l'a suggéré Nick Metropolis, un autre pionnier de Monte Carlo).

Dans des cas isolés, l'échantillonnage aléatoire avait été utilisé bien plus tôt pour résoudre des problèmes numériques par exemple, en 1777, le Comte de Buffon a réalisé une expérience dans laquelle une aiguille est tombée plusieurs fois sur une planche marquée de lignes parallèles équidistantes,  $L$  étant la longueur de l'aiguille et  $d > L$  étant la distance entre les lignes, il a montré que la probabilité que l'aiguille croise une ligne est égale à

$$P = \frac{2L}{\pi d}$$

Des années plus tard, Laplace a fait remarquer que cela pouvait être utilisé comme un moyen grossier d'estimer la valeur de  $\pi$ .

De même, Lord Kelvin a utilisé ce que nous appellerions aujourd'hui une méthode de Monte Carlo pour examiner certains aspects de la théorie cinétique des gaz. Son générateur de nombres aléatoires consistait à tirer des bouts de papier d'un bocal en verre. La possibilité de biais était une préoccupation importante ; Il craignait que les papiers ne soient pas assez bien mélangés en raison de l'électricité statique. Un autre étudiant (pseudonyme de W. S. Gosset), qui a utilisé l'échantillonnage aléatoire pour deviner la forme de sa fameuse distribution T.

Une excellente référence sur les origines des méthodes de Monte Carlo est le numéro spécial de Los Alamos Science, publié à la mémoire de Stanislaw Ulam. Les livres de Kalos & Whitlock [1986] et Hammersley & Handscomb [1964] contiennent également de brèves histoires, y compris des informations sur les expériences d'échantillonnage aléatoire.

### II.1.3 Pourquoi la méthode de Monte Carlo ?

Pourquoi les techniques de Monte Carlo sont-elles si populaires aujourd'hui ? Nous identifions un certain nombre de raisons

- **Facile et efficace :** Les algorithmes de Monte Carlo ont tendance à être simples, flexibles et évolutifs. Lorsqu'elles sont appliquées à des systèmes physiques, les techniques de Monte Carlo peuvent réduire des modèles complexes à un ensemble d'événements et d'interactions de base, ouvrant la possibilité de coder le modèle comportement à travers un ensemble de règles qui peuvent être efficacement mises en œuvre sur un ordinateur. Cela permet à son tour de mettre en œuvre et d'étudier des modèles beaucoup plus généraux que ce qui est possible en utilisant des méthodes analytiques. Ces implémentations ont tendance à être hautement évolutif. Par exemple, la complexité d'un programme de simulation pour une machine l'installation de réparation ne dépendrait généralement pas du nombre de machines ou de réparateurs impliqué. Enfin, les algorithmes de Monte Carlo sont éminemment parallélisables, en particulier lorsque diverses parties peuvent être exécutées indépendamment. Cela permet aux pièces d'être exécutées sur différents ordinateurs et/ou processeurs, réduisant ainsi considérablement le calcul temps [42].
- **Le hasard comme force :** Le caractère aléatoire inhérent au MCM n'est pas seulement essentiel pour la simulation de systèmes aléatoires réels, il est également très utile pour le calcul numérique déterministe. Par exemple, lorsqu'il est utilisé pour l'optimisation aléatoire, le caractère aléatoire permet aux algorithmes stochastiques d'échapper naturellement aux optima-locaux, ce qui permet une meilleure exploration de l'espace de recherche. Cette qualité n'est généralement pas partagée par leurs homologues déterministes [42].
- **Aperçu du hasard :** La MCM a une grande valeur didactique en tant que véhicule pour explorer et comprendre le comportement des systèmes et des données aléatoires. En effet, nous ressentons qu'un ingrédient essentiel pour bien comprendre les probabilités et les statistiques est de réaliser des expériences aléatoires sur ordinateur et d'observer les résultats de ces expériences, c'est-à-dire d'utiliser la simulation de Monte Carlo. En outre, les statistiques modernes s'appuient de plus en plus sur des outils informatiques tels que le ré-échantillonnage et le MCMC pour analyser des ensembles de données très vastes et/ou de grande dimension [42].
- **Justification théorique :** Il existe un vaste (et en croissance rapide) corpus de mathématiques et les connaissances statistiques qui sous-tendent les techniques de Monte Carlo, permettant, par exemple, des déclarations précises sur l'exactitude d'un estimateur de Monte Carlo donné (par exemple, convergence racine carrée) ou l'efficacité des algorithmes de Monte Carlo. Une grande partie de la recherche actuelle sur les techniques de Monte Carlo est consacrée à la recherche d'ensembles améliorés de règles et/ou codages d'événements pour augmenter l'efficacité de calcul pour les problèmes difficiles d'échantillonnage, d'estimation et d'optimisation [42].

### II.1.4 Applications de la méthode de MC dans diverse disciplines

La simulation de Monte Carlo a réussi principalement dans les domaines liés à la modélisation de systèmes complexes en recherche biologique, ingénierie, géophysique, météorologie, applications informatiques publiques études de santé et finances.

- **Biologie et Biochimie** : Dans la biologie et la biochimie, La simulation de Monte Carlo est largement utilisée pour modéliser l'activité moléculaire. Berney et Danuser (2003) ont décrit leur utilisation de la simulation Monte Carlo lors de la modélisation de la fluorescence transfert d'énergie de résonance (FRET) technique, qui mesure les interactions entre deux molécules. Leblanc et al. (2003) ont décrit l'utilisation de la simulation Monte Carlo pour des molécules systèmes appartenant à des paysages énergétiques complexes, et ont offert une nouvelle approche pour améliorer la convergence de ces simulations. Autres domaines de l'utilisation de la simulation Monte Carlo liée à la biologie sont dans les domaines de génétique et des études d'évolution. En génétique, Korol et al. (1998) ont utilisé une simulation de Monte Carlo pour démontrer les avantages de l'analyse multi-traités dans la détection des effets de traits quantitatifs. Un défi dans le domaine des études évolutives est l'assemblage d'un « Arbre de Vie », une arbre phylogénétique complet utilisé pour mieux comprendre processus évolutifs. Salamin et al. (2005) ont utilisé la simulation de Monte Carlo pour reconstruire de grands arbres comme l'arbre de vie, avec des paramètres inférés à partir de quatre grands angiospermes matriciels d'ADN, qui pourraient radicalement aider les chercheurs à créer cet arbre [43].
- **Engineering** : Dans le domaine de l'ingénierie et de la conception informatique, Bhanot et al. (2005) ont décrit l'utilisation de la simulation lors de l'optimisation du problème de disposition du supercalculateur Blue Gene®/L d'IBM. En géophysique d'ingénierie, l'analyse Monte Carlo a été utilisée pour prédire stabilité des pentes pour une variété de facteurs (El-Ramly, Morgenstern et Cruden, 2002). En génie maritime, Santos et Guedes Soares (2005) ont décrit une méthodologie probabiliste qu'ils ont développée pour évaluer la capacité de survie du navire endommagé par la simulation de Monte Carlo. Lei et al. (1999) ont expliqué leur utilisation de la simulation Monte Carlo en ingénierie aérospatial à modéliser géométriquement un ensemble de vaisseau spatial et sa charge utile, en utilisant Le modèle de masse intégrale [43].
- **Processus et structures physiques** : La simulation directe du processus de transport des neutrons a été la première application de la MCM à l'ère moderne, et les techniques de Monte Carlo poursuivent d'être importantes pour la simulation des processus physiques en chimie, L'étude de la cinétique chimique par simulation stochastique ces méthodes sont apparues dans les années 1970. En plus des problèmes de transports classiques, les techniques de Monte Carlo ont permis la

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

---

simulation du transport de photons à travers les tissus biologiques - - une structure multicouche complexe et inhomogène avec diffusion et absorption. Les techniques de Monte Carlo jouent désormais un rôle important dans la science des matériaux, où elles sont utilisées dans le développement et l'analyse de nouveaux matériaux et structures, comme les LED organiques, les cellules solaires organiques et les batteries Lithium-Ion. En particulier, les techniques de Monte Carlo jouent un rôle clé dans la conception de matériaux virtuels, où les données expérimentales sont utilisées pour produire des modèles stochastiques de matériaux. Les réalisations de ces matériaux peuvent ensuite être simulées et des expériences numériques peuvent être effectuées sur eux. Le développement physique et l'analyse de nouveaux matériaux est souvent très coûteux et prend beaucoup de temps. L'approche de conception de matériaux virtuels permet de générer plus de données que ce qui peut être facilement obtenu à partir d'expériences physiques et permet également la production et l'étude virtuelle des matériaux en utilisant de nombreux paramètres de production différents [42].

- ***Economie et Finances*** : Alors que les produits financiers continuent de se complexifier, les techniques de Monte Carlo sont devenues des outils de plus en plus importants pour les analyser. Les MCM sont non seulement utilisées pour évaluer les instruments financiers, mais jouent également un rôle essentiel dans l'analyse des risques. Ces techniques sont particulièrement efficaces pour résoudre des problèmes impliquant un certain nombre de différentes sources d'incertitude (par exemple, les options de panier d'évaluation, qui sont basées sur un portefeuille d'actions). Récemment, il y a eu quelques avancées significatives dans les techniques de Monte Carlo pour les équations différentiel stochastique, qui sont utilisées pour modéliser de nombreuses séries temporelles financières, et les articles suivants. Les MCM s'ont également avérées particulièrement utiles dans l'analyse du risque des grands portefeuilles de produits financiers (tels que les prêts hypothécaires). Une grande force des techniques de Monte Carlo pour l'analyse des risques est qu'elles peuvent être facilement utilisées pour exécuter une analyse de scénario - c'est-à-dire qu'elles peuvent être utilisées pour calculer les résultats du risque selon un certain nombre d'hypothèses de modèle différentes [42].
- ***Autres disciplines*** : En météorologie, la simulation Monte Carlo est utilisée pour les modèles de systèmes météorologiques et leurs résultats. Par exemple, Gebremichael et al. (2003) ont utilisé l'analyse de Monte Carlo pour évaluer l'incertitude d'échantillonnage pour les réseaux de pluviomètres sélectionnés dans les précipitations mondiales Projet de Climatologie (GPCP). En santé publique, la simulation a été utilisée pour estimer le coût direct de la prévention du diabète de type 1 utilisant de l'insuline nasale s'elle devait être utilisée dans le cadre d'un système de santé de routine (Hahl et al, 2003). Phillips (2001) a soutenu que La simulation de Monte Carlo devrait être utilisée par les organismes de recherche pour déterminer si oui ou non les futures recherches possibles sont valent vraiment le coût et l'effort, par modélisation des résultats possibles de la recherche. Boyske

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

---

(2003) simulation de Monte Carlo d'occasion en planification financière personnelle, surtout lors de l'estimation combien d'argent il faut pour la retraite et combien on peut dépenser une fois par an la retraite a commencé [43].

### II.2 Simulation directe par la méthode de Monte Carlo

#### II.2.1 Présentation de la méthode DSMC

Les dispositifs microscopiques, comme les micro-turbines ou les échangeurs de chaleur à micro-canaux, sont couramment utilisés dans l'industrie. Les écoulements dans les micro-canaux ont ainsi été discutés dans un grand nombre de travaux aussi bien d'un point de vue théorique que numérique ou expérimental. Pour étudier les écoulements gazeux dans ces tubes microscopiques, les méthodes DSMC sont adaptées mais coûteuses en temps de calcul [30, 44].

La méthode de simulation directe Monte Carlo (DSMC) a été introduite pour la première fois par Graeme Bird en 1961. La méthode DSMC est la plus utile pour analyser des flux cinétiques de gaz hors d'équilibre [45]. DSMC méthode est basée sur des concepts physiques de gaz raréfiés et sur des hypothèses physiques qui forment la base de la dérivation de l'équation de Boltzmann [46].

L'idée fondamentale de cette méthode c'est de suivre des milliers ou des millions de particules sélectionnées, statistiquement représentatives, et d'utiliser leurs mouvements et interactions pour modifier leurs positions et états de manière appropriée dans le temps. Chaque particule simulée représente un certain nombre de molécules réelles [30]. Le calcul DSMC est lancé à partir de certaines conditions initiales et suivies par petits pas de temps qui peuvent être lié au temps physique [47].

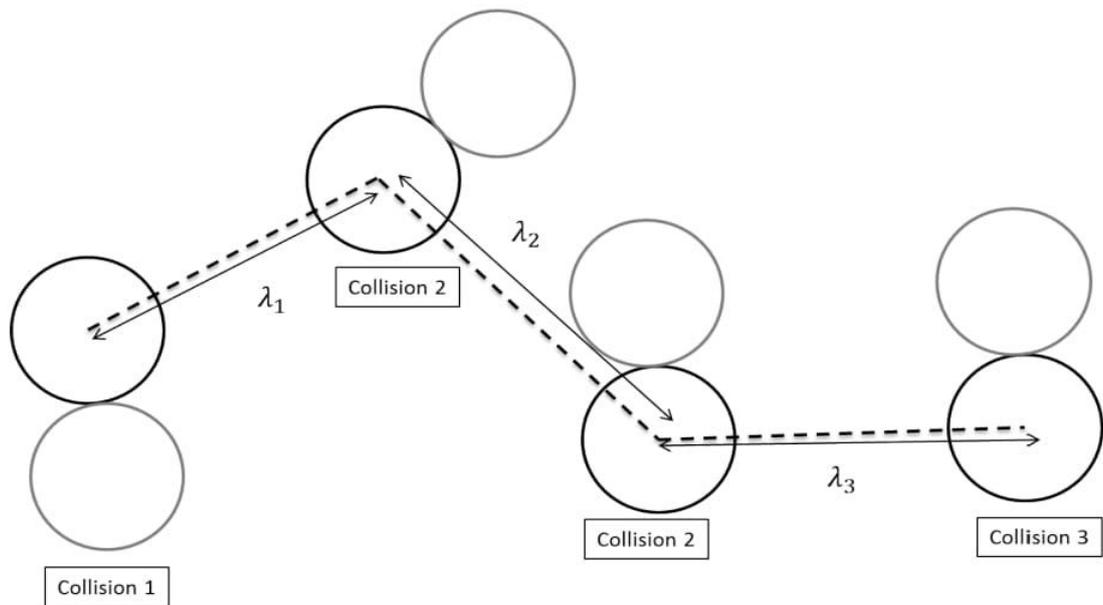
Les quantités macroscopiques associées aux molécules simulées (positions, vitesses, énergies) évoluent dans le temps suivant une série d'étapes. Chacune de ces étapes est subdivisée en deux phases : une phase de mouvement libre et une phase de collisions ponctuelles et instantanées [30, 48].

La simulation directe par la méthode de monte Carlo (DSMC) est l'une des techniques numériques les plus courantes qui a été largement utilisé pour modéliser les flux gazeux dans divers régimes de raréfaction. DSMC est une méthode probabiliste basée sur les particules pour résoudre l'équation de Boltzmann basée sur la théorie cinétique [49].

La méthode de DSMC adopte un point de vue différent des codes de "Computational Fluid Dynamics" (CFD) traditionnels qui traitent le fluide comme un milieu continu. DSMC traite les trajectoires de manière stochastique. Elle est donc basée sur un principe de moyennisation pour obtenir les grandeurs physiques [50].

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

La plupart de temps nous utilisons la méthode de DSMC dans les milieux raréfiés. La raréfaction d'un milieu sera distinguée du libre parcours moyen  $\lambda$  représenté sur la figure II.1. La distance parcourue par la particule entre chaque collision, c'est ce qu'on appelle le libre parcours moyen  $\lambda$ . Et comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent la raréfaction du gaz augmente lorsque le libre parcours moyen des molécules augmente.



**Figure II. 1 Libre parcours moyen : moyen des distances parcourues par une particule entre chaque collision [50].**

Le nombre adimensionné de Knudsen découverte par le physicien Danois Martin Knudsen, détermine le domaine de validité des équations et méthodes numériques.

$$Kn = \frac{\lambda}{L}$$

$\lambda$  : Libre parcourt moyen des molécules.

$L$  : La longueur caractéristique de l'écoulement.

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

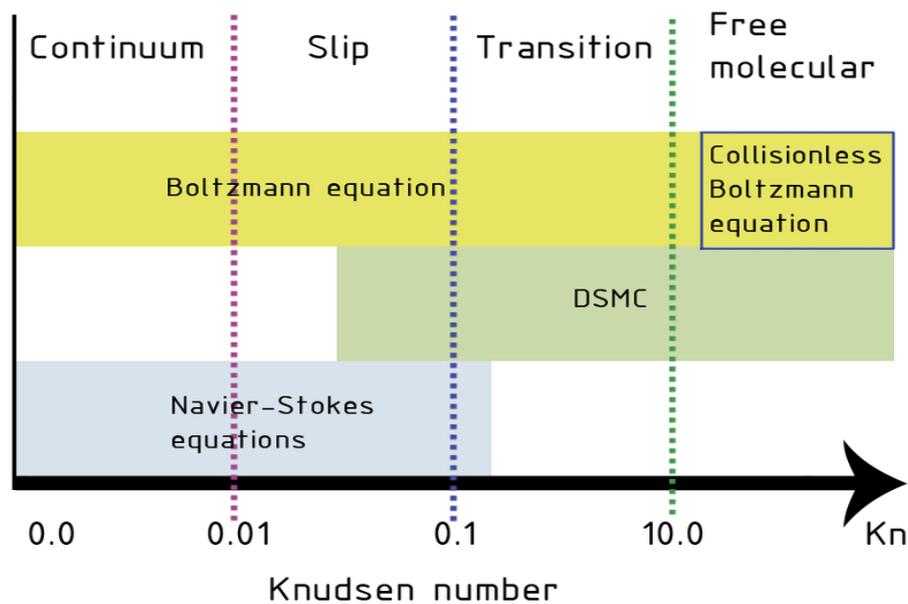


Figure II. 2 Classification des régimes d'écoulement [51].

- **Le régime continu :**  $\text{Kn} \leq 10^{-3}$ , dans ce cas les effets de raréfaction sont négligeables, l'écoulement est alors correctement modélisé par les équations de Navier–Stokes associées aux conditions classiques de continuité de la température et de la vitesse à la paroi [29, 30].
- **Le régime de glissement (slip flow regime) :**  $10^{-3} < \text{Kn} < 10^{-1}$ , régime dans lequel les effets de raréfaction sont localisés près de la paroi. Les équations de Navier-Stokes avec des conditions de glissement aux parois ou les équations de Burnett [30, 48].
- **Le régime de transition :**  $10^{-1} < \text{Kn} < 10^{+1}$ , les équations de Navier-Stokes ne sont plus valables. Dans ce cas, les modélisations basées sur les équations de Boltzmann ou les simulations directes par la méthode de Monte Carlo sont plus adaptées [28,30].
- **Le régime moléculaire libre :**  $\text{Kn} > 10^{+1}$ , les collisions entre molécules sont alors d'occurrence négligeable, comparées aux collisions entre molécules et parois [29, 30].

Bien sûr, dans cette classification, les bornes en Kn sont approximatives et elles vont dépendre du type de micro-système étudié [28, 30].

La technique DSMC est applicable dans tous les régimes. Elle peut capturer correctement tous les effets de raréfaction sans utiliser de paramètres d'ajustement. En plus, il est relativement facile d'inclure des éléments physiques supplémentaires, tels que les réactions de surface et l'ionisation. Bien que DSMC soit un allié de calcul intensif, il peut être efficacement parallélisé et les délais d'exécution pratiques peuvent être atteints [52].

### II.2.2 Principe de la méthode DSMC

Le gaz peut être décrit comme un groupe des molécules faiblement liées et presque indépendantes, ces molécules sont en vol libre ou en collision [30, 64, 65].

Le principe de la méthode DSMC consiste à faire une expérience numérique dans laquelle on simule un nombre limité de molécules tests, chacune d'elle étant représentative d'un grand nombre de molécules réelles, comme le montre la figure II.3 [30].

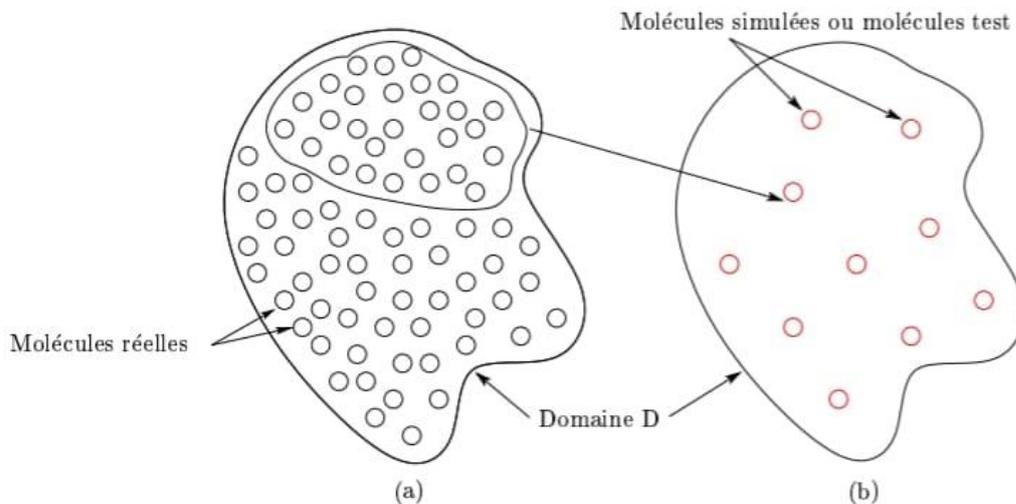


Figure II. 3 Molécules réelles (a) et les molécules simulées (b) [30, 64, 65].

L'hypothèse essentielle de la méthode DSMC est la possibilité de découpler le déplacement des molécules de la collision intermoléculaire (pour la phase de collision, on a deux situations: la collision molécule-molécule et la collision molécule-paroi) sur un laps de temps très court, qui correspond au pas de temps de la simulation. Durant chaque pas de temps  $\Delta t$  d'une simulation DSMC, on doit effectuer deux opérations [30, 53]:

- Le déplacement à vitesse constante (propre à chaque molécule) de toutes les molécules sur une durée  $\Delta t$ . Dans le cas où une collision entre les molécules et la paroi interviendrait dans cet intervalle de temps, la vitesse des molécules concernées doit être recalculée avec la loi de réémission.
- Le calcul d'un nombre représentatif de collisions intermoléculaires, nombre adapté au choix du pas de temps  $\Delta t$ .

### II.2.3 Procédure et techniques de DSMC

Le cœur de l'algorithme DSMC se compose de cinq processus principaux : Initialisation, mouvement des particules, l'indexation et le suivi des particules, simulation de collisions de particules et propriétés des particules d'échantillonnage.

Ces étapes seront discutées plus en détail ci-dessous [30, 64, 65] :

#### II.2.3.1 Initialisation

Une simulation DSMC garde une trace du mouvement dépendant du temps d'une énorme quantité de molécules. Comme un calcul CFD continu, la simulation DSMC procède d'un ensemble de condition initiale prescrite. Les molécules sont initialement distribuées dans le domaine de calcul.

Ces molécules simulées, représentant chacune un grand nombre de molécules de gaz réelles, se voient attribuer des vitesses aléatoires, généralement basées sur la distribution d'équilibre. Les molécules sont initialement distribuées dans le domaine de calcul. Ces molécules simulées, représentant chacune un grand nombre de molécules de gaz réelles, se voient attribuer des vitesses aléatoires, généralement basées sur la distribution d'équilibre. Des tailles et des poids moléculaires physiquement corrects sont utilisés dans le calcul des propriétés du gaz. La position, vitesse, section efficace de collision et température des molécules, et les conditions aux limites déterminent l'évolution ultérieure du système. Par conséquent, pour les problèmes non stationnaires, la solution peut dépendre du choix particulier de la frontière initiale et de l'entrée [47].

#### II.2.3.2 Mouvement des particules

Cette étape dans DSMC consiste à faire évoluer la position de toutes les particules vers l'avant dans le temps en fonction de leur vitesse au début du pas de temps. La longueur du pas de temps est choisie être inférieure au temps moyen de collision  $\Delta t_c$ , qui est le rapport du libre parcours moyen à la vitesse moléculaire efficace. Lorsque  $\Delta t_c$  est calculé, il est généralement de l'ordre de  $10^{-10}$  secondes pour la plupart des flux [13].

Au cours de son déplacement, la molécule peut rencontrer quatre situations [30] :

- Collision avec les parois.
- Collision avec une autre molécule.
- La molécule sort du domaine de calcul : elle sera éliminée
- La molécule ne rencontre aucune des trois possibilités ci-dessus : elle change uniquement de position pendant son déplacement. Dans ce cas cette phase se résout sans difficultés particulières, seules les positions des particules sont modifiées, les vitesses et les énergies internes restent inchangées [30].

### II.2.3.3 Indexation des particules

Après avoir défini la position et la vitesse, toutes les particules sont déplacées sur des distances adaptées à leurs composantes de vitesse et à la taille du pas de temps. Après avoir déménagé les particules, leur emplacement dans le domaine de calcul est déterminé. Cela peut être obtenu de différentes manières. Pour les grilles cartésiennes, la nouvelle position des particules est facilement identifiée, et la cellule de destination est calculée en utilisant le schéma d'indexation défini par Bird [46].

Pour des calculs plus efficaces, le volume de l'écoulement simulé est divisé en cellules, chacune mesurant approximativement un tiers du libre parcours moyen du gaz. Au cours de la deuxième étape, les particules peuvent quitter une cellule et entrer dans une autre cellule. Parce que potentiellement des millions de particules sont suivies, il est important que cette étape soit efficace [18].

### II.2.3.4 Collision des particules

Le processus de collision moléculaire est modélisé statistiquement, ce qui est différent à partir de méthodes de simulation déterministes telles que MD. Seules les particules dans une cellule de calcul sont considérées comme des partenaires de collision possibles. Avec chaque cellule, un ensemble représentatif de collisions est pris en compte et des paires de collisions sont sélectionnées au hasard [54]. Les vitesses post-collision sont déterminées avant que les particules ne soient autorisées à déplacer pour le pas de temps suivant. Le découplage des mouvements moléculaires et la collision intermoléculaire nécessitent que  $\Delta t$  soit inférieur au temps moyen de collision [47]. Une explication plus détaillée de cette phase est suivie :

On considère un volume de gaz qui est complètement isolé de toute influence extérieure. Si ce gaz reste non perturbé pendant un temps qui est suffisamment long en comparaison avec le temps moyen de collision, alors il peut être considéré comme étant dans un état d'équilibre (Bird 1994) [30].

Considérer les molécules de classe  $\vec{c}$  avec une densité numérique supposée  $\Delta n$ . La vitesse relative de la molécule test par rapport aux molécules de champ de classe  $\vec{c}$  est [54].

$$\vec{c}_r = \vec{c}_t - \vec{c}$$

Une telle collision est possible si le centre des molécules de classe  $\vec{c}$  se trouve dans le cylindre de volume ' $\sigma_t c_r \Delta t$ ' figure II.5 avec  $\sigma_t$  est la section efficace de collision, et  $c_r = \|\vec{c}_r\|$  [30].

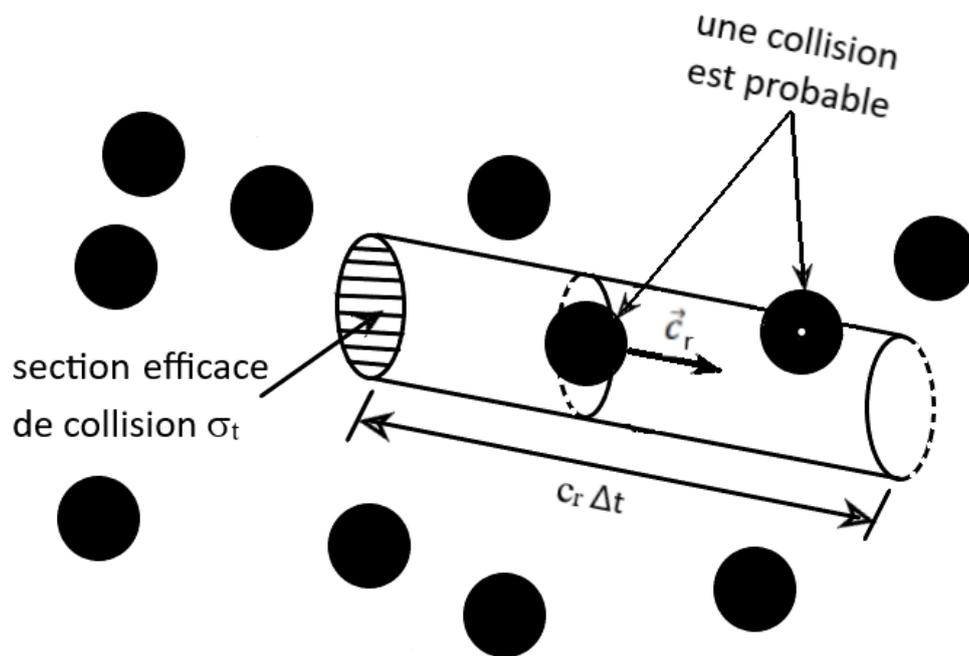


Figure II. 4 Collision entre molécules [64, 65]

En supposant que les molécules soient des sphères rigides de diamètre  $d$ , deux molécules se rapprochant entrent en collision lorsque la distance entre les centres diminue à  $d$ , comme illustré à la Figure II.6. La section efficace totale de collision,  $\sigma_t$ , pour de telles collisions entre deux molécules de sphères rigides est

$$\sigma_t = \pi d^2$$

Avec  $d$ : le diamètre de la molécule

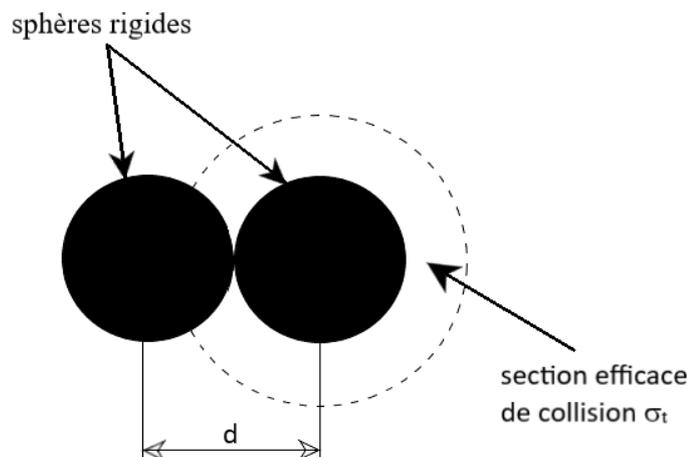


Figure II. 5 Collisions binaires de molécules de sphère rigide de diamètre  $d$  [64, 65]

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

---

Donc la molécule test entrerait en collision avec n'importe quelle molécule de champ de classe  $\vec{c}$  qui a son centre dans le cylindre de volume ' $\sigma_t c_r \Delta t$ '. Le nombre de ces molécules est ' $\Delta n \sigma_t c_r \Delta t$ ', qui est juste la probabilité d'une collision entre la molécule à tester et une molécule de classe  $\vec{c}$  dans l'intervalle de temps  $\Delta t$ . Le taux de collision avec une molécule de classe  $\vec{c}$  est alors ' $\sigma_t c_r \Delta n$ ' [64].

Maintenant nous allons calculer le nombre de collisions entre molécules simulées, tout en respectant la fréquence de collision  $\nu$  du gaz réel. L'inverse de cette fréquence  $\nu$  est notée  $\tau=1/\nu$  : c'est le temps moyen de vol qui correspond au temps moyen écoulé entre deux collisions.

La fréquence de collision (taux moyen de collision) est donc obtenue en sommant sur toutes les vitesses possibles :

$$\nu = \sum (\Delta n \sigma_t c_r) = n \sum \left( \frac{\Delta n}{n} \sigma_t c_r \right)$$

$n$  : la densité numérique de gaz réel

$\Delta n$  : la fraction des molécules dont la vitesse est comprise entre  $\vec{c}$  et  $\Delta \vec{c}$ .

et  $\nu = n \overline{(\sigma_t c_r)}$ ; Une barre au-dessus d'une quantité ou d'une expression indique la valeur moyenne de toutes les molécules dans l'échantillon.

Avec  $\overline{(\sigma_t c_r)} = \sum \left( \frac{\Delta n}{n} \sigma_t c_r \right)$

La section efficace de collision  $\sigma_t$  est constante, pour les sphères rigides identiques. On peut écrire :

$$\nu = n \sum \left( \frac{\Delta n}{n} \sigma_t c_r \right) = n \sigma_t \sum \left( \frac{\Delta n}{n} c_r \right) = n \sigma_t \bar{c}_r = n \pi d^2 \bar{c}_r$$

avec  $\bar{c}_r = \sum \left( \frac{\Delta n}{n} c_r \right)$ .

Le nombre total de collision par unité de volume dans échantillon est donné par la relation suivante :

$$N_c = \frac{1}{2} n \nu = \frac{1}{2} n^2 \overline{(\sigma_t c_r)}$$

Le facteur de symétrie de moitié est introduit pour éviter un double comptage de collision car chaque collision implique deux molécules.

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

---

Plusieurs schémas de modélisation de collision différents ont été formulés et appliqués dans le Méthode DSMC. Parmi elles, la technique Time-Counter (TC), Null-Collision (NC) technique, No-Time-Counter (NTC) proposé par (Bird 1994). Le modèle actuellement préféré est la technique sans compteur de temps (NTC) [46].

- **Méthode Non Compteur de Temps**

Diverses procédures d'échantillonnage aléatoire des collisions au sein d'une cellule ont été développées au fil des ans. Mais ici seule la technique la plus efficace et la plus largement utilisée est décrite, à savoir la méthode compteur sans temps (NTC) proposée par G.A Bird et validée par M.A. Gallis et al [55].

On considère une cellule de volume  $V_{\text{cell}}$  occupée par  $N_S$  particules de simulation qui chacune, représente  $N_R$  molécules. La probabilité  $P_{\text{col}}$  de collision entre deux particules simulées durant un intervalle de temps  $\Delta t$  est égale à [56]. :

$$P_{\text{col}} = N_R \sigma_t c_r \Delta t / V_{\text{cell}}$$

La vitesse relative  $c_r$  varie avec le choix de la paire de molécules simulées et la section efficace de collision  $\sigma_t$  est généralement une fonction de la vitesse relative, mais les autres quantités dans l'équation sont indépendantes de ce choix. Le nombre moyen de molécules dans la cellule  $nV_{\text{cell}}$  et le nombre moyen de molécules simulés est [30] :

$$N_S = nV_{\text{cell}} / N_R$$

L'ensemble complet des collisions pourrait être calculé en sélectionnant toutes les  $N_S(N_S-1)/2$  paires dans la cellule et calculer les collisions avec une probabilité  $P_{\text{col}}$ . Ceci est inefficace car le nombre de collisions potentielles est proportionnel au carré de  $N_S$  et la probabilité  $P_{\text{col}}$  est souvent très petite, donc beaucoup de temps de calcul sera perdu en calculant des paires qui ne se heurteront pas. C'est ici qu'apparaît la procédure NTC [57].

Parmi toutes les paires, la valeur maximale de  $\sigma_t c_r$  est estimée. Cela donne la probabilité maximale qu'une collision se produise :

$$P_{\text{col(max)}} = N_R (\sigma_t c_r)_{\text{max}} \Delta t / V_{\text{cell}}$$

En divisant la probabilité  $P_{\text{col}}$  par la probabilité  $P_{\text{col(max)}}$ , nous obtenons la probabilité qu'une collision résulte de la paire sélectionnée, et elle est donnée par le rapport suivant :

$$\frac{(\sigma_t c_r)}{(\sigma_t c_r)_{\text{max}}}$$

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

---

La quantité  $(\sigma_t c_r)_{\max}$  est une estimation par excès de la valeur maximale de la quantité  $(\sigma_t c_r)$  [30]. Le paramètre  $(\sigma_t c_r)_{\max}$  doit être stocké pour chaque cellule (ce paramètre est préférable d'être défini initialement comme une petite valeur) et est automatiquement mis à jour si une valeur plus élevée est obtenue pour lui lors de l'échantillonnage. Le temps de calcul de cette méthode est linéairement proportionnel au nombre de molécules [58].

$(\sigma_t c_r)_{\max}$  est un majorant plausible de la quantité  $\sigma_t c_r$ . On majore la quantité  $\sigma_t c_r$  par  $2\sigma_t \bar{c}_r$ , où  $\bar{c}_r$  est une valeur moyenne de la vitesse relative proposée par Bird (1994). Le nombre de paires à sélectionner s'obtient en multipliant l'équation de  $P_{\text{col(max)}}$  par  $N_s^2/2$  qui est une bonne approximation de  $N_s(N_s - 1)/2$ . Cette quantité étant fluctuante au cours de la simulation, Bird (1994) a proposé de la remplacer par le produit de la valeur instantanée de  $N_s$  et de sa valeur moyenne temporelle  $\bar{N}_s$ . La méthode «NTC» consiste à restreindre les collisions aux particules ainsi sélectionnées [56],

$$N_{\text{sel}} = \frac{1}{2} N_s \bar{N}_s N_R (\sigma_t c_r)_{\max} \Delta t / V_{\text{cell}}$$

$N_{\text{sel}}$  : est le nombre de paires de particules sélectionnées dans la cellule durant un pas de temps.

### II.2.3.5 Evaluation des propriétés des particules d'échantillonnage

La cinquième et dernière étape consiste à calculer les quantités d'écoulement macroscopiques (ex., vitesse à l'intérieur de la cellule) à partir des quantités microscopiques (par exemple, la vitesse des particules individuelles) dans chaque cellule. Cela peut être fait dans un processus similaire à celui utilisé dans MD. À ce point, la simulation peut se terminer ou peut revenir à la première étape. Une certaine quantité d'itérations est nécessaire, même avec des flux constants, pour atteindre l'état d'équilibre après la période transitoire de démarrage initial.

#### II.2.3.5.1 Grandeurs macroscopiques dérivées de DSMC

Dans un code basé sur une méthode DSMC, les grandeurs macroscopiques telles que la densité, la vitesse, ou la pression d'un gaz sont obtenues à partir de moyennes des grandeurs microscopiques associées aux molécules. Les valeurs moyennées sont notées à l'intérieur du signe  $\langle \rangle$  [50].

Veillez noter que chaque molécule simulée représente en fait un groupe de molécules. On parle de la représentativité ou du poids de cette molécule numérique qu'on distingue de la molécule réelle présente physiquement.

Soit donc une maille de volume  $V$  constituée à une itération  $k$  d'un ensemble de  $N$  particules de même masse  $m$ . Les caractéristiques macroscopiques dans cette maille à

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

---

l'instant correspondant vont être déterminée à partir des moyennes des grandeurs microscopiques et de l'application des lois de Newton de la manière suivante :

- **Densité Numérique et masse volumique de gaz :**

La densité numérique du gaz se calcule avec la relation suivante :

$$n = \frac{N}{V}$$

N représente le nombre de molécules ou (la représentativité) et V représente le volume de la cellule.

La masse volumique  $\rho$  correspond à la somme des masses de chacune des molécules de l'élément de volume. Si l'on considère que toutes les molécules ont la même masse, la somme des masses vaut Nm

$$\rho = \frac{(\sum_i^N m_i)}{V} = \frac{Nm_i}{V} = nm$$

$m$  : La masse d'une molécule.

- **La vitesse macroscopique de gaz :**

La vitesse macroscopique  $\vec{U}$  correspond à la vitesse moyenne des particules :

$$\vec{U} = \frac{(\sum_i^N \vec{c}_i)}{N}$$

- **La pression et la température de gaz :**

La moyenne de l'énergie cinétique associée au mouvement thermique ou de translation d'une molécule est  $\frac{1}{2}mc^2$  et l'énergie spécifique associée à ce mouvement est

$$e_{tr} = \frac{1}{2} \langle \vec{c}^2 \rangle$$

On donne la loi des gaz parfait par  $PV = nRT$ , avec  $R = r.M$  la constante universelle des gaz parfait, donc  $PV = mrT$ .

On a  $\rho = \frac{m}{V} = n.m$ , donc  $P = \rho rT = nkT$ .

Ici k est la constante de Boltzmann qui est liée à la constante universelle des gaz R par  $k = R/N_A$ . Aussi  $m = M/N_A$  et la constante spécifique de gaz  $r = R/M$ , de sorte que  $k = m.r$ .

La température thermodynamique T est essentiellement une propriété de gaz d'équilibre, mais la comparaison ci-dessus montre que l'équation d'état des gaz parfaits

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

---

s'appliquera à un gaz dilué, même en situation de non-équilibre, pour une température cinétique de translation  $T_{tr}$ , [59] définie par :

$$\frac{3}{2}rT_{tr} = e_{tr} = \frac{1}{2} \langle \vec{c}^{*2} \rangle$$

Donc

$$\frac{3}{2}kT_{tr} = \frac{1}{2}m \langle \vec{c}^{*2} \rangle$$

Où  $T_{tr}$  est la température translationnelle du gaz.  $\vec{c}^*$  représente la vitesse d'agitation de la molécule. Elle est égale à la différence entre la vitesse moléculaire  $\vec{c}$  et la vitesse macroscopique du gaz  $\vec{U}(u, v, w)$  :  $\vec{c}^* = \vec{c} - \vec{U}$

Nous nous limitons dans ce qui suit à l'étude des gaz mono et diatomique avec un mode purement translationnel. A partir de l'égalité précédente on déduit que :

$$T_{tr} = \frac{m}{3k} \langle \vec{c}^{*2} \rangle$$

Avec :  $\langle \vec{c}^{*2} \rangle = ((\sum c_x^2 + \sum c_y^2 + \sum c_z^2) - U^2)$

Où  $U = \|\vec{U}\|$

- ***L'Energie Interne de Gaz :***

On peut généralement supposer que les molécules monoatomiques ne possèdent qu'une énergie translationnelle. Par conséquent, dans un gaz monoatomique, la température de translation peut être considérée simplement comme la température  $T$ . Cependant, les molécules diatomiques et poly-atomiques possèdent également une énergie interne associée aux modes d'énergie rotationnelle et vibrationnelle. Puisque trois degrés de liberté sont associés au mode de translation, une température  $T_{int}$  pour les modes internes peut être définie de manière cohérente avec la température de translation tel que [59, 60].

$$\langle e_{int} \rangle = \frac{\zeta_{in}}{2} kT_{int}$$

Où  $\zeta_{in}$  est le nombre de degrés de liberté correspondant à cette énergie et  $T_{int}$  est la température interne, qui peut être rotationnelle ou vibrationnelle. Pour un mode rotationnelle la valeur de  $\zeta_{in}$  dépend du rapport des chaleurs spécifique  $\gamma$  :

$$\zeta_{in} = \frac{5 - 3\gamma}{1 - \gamma}$$

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

---

Dans le cas des molécules monoatomique,  $\gamma$  prend la valeur  $3/5$ , d'où  $\zeta_{in} = 0$ , et Dans le cas des molécules diatomiques,  $\gamma$  est égale à  $7/5$ , par conséquent  $\zeta_{in} = 2$ . Dans notre cas, les deux modes internes de vibration et de rotation sont négligés [30].

- **Nombre de Reynold et Nombre de Mach :**

Le nombre de mach se rapporte à plusieurs grandeurs qui sont la vitesse macroscopique  $U$ , la pression  $P$ , la masse volumique  $\rho$  et le rapport des chaleurs massiques  $\gamma$  :

$$Ma = \frac{U}{\sqrt{\gamma \frac{P}{\rho}}}$$

Comme on a vu au premier chapitre il y a une relation entre les trois nombre adimensionnels  $Kn$ ,  $Ma$ , et  $Re$ .

Ils existent plusieurs cas :

Dans le cas des sphères rigides :

$$\frac{Ma}{Re} = \sqrt{\frac{2}{\gamma\pi}} Kn$$

Le cas d'un gaz monatomique :

$$Re = \sqrt{\frac{5\pi}{6}} \frac{Ma}{Kn}$$

Le cas d'un gaz diatomique :

$$Re = \sqrt{\frac{7\pi}{10}} \frac{Ma}{Kn}$$

### II.2.4 Collision binaire élastique

Les collisions moléculaires sont le processus le plus fondamental dans les gaz. Des collisions moléculaires se produisent fréquemment. Il peut y avoir n'importe quel nombre de molécules impliqué dans une collision. La cinématique et la dynamique d'une collision qui n'implique que deux molécules, ou collision binaire, sera introduite. La collision binaire est la plus pertinente pour la plupart des analyses de micro-flux avec des effets de gaz raréfié [47].

Habituellement, dans les gaz dilués, les collisions intermoléculaires sont considérées comme un binaire traiter. De plus, une collision élastique est définie comme une collision dans laquelle il n'y a pas d'échange d'énergie entre les modes translationnel et interne. Les vitesses de pré-collision de deux particules en collision peuvent être désignées par  $c_1$  et  $c_2$ . Si les propriétés physiques et les trajectoires de ces particules sont connues, les vitesses post-collision  $c_1^*$  et  $c_2^*$  peut être déterminé. Afin de déterminer les vitesses post-collision, la courbe linéaire de la quantité de mouvement et de l'énergie doivent être conservées pendant la collision [46],

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

---

$$m_1 c_1 + m_2 c_2 = m_1 c_1^* + m_2 c_2^* = (m_1 + m_2) c_m \dots \dots \dots (a)$$

$$m_1 c_1^2 + m_2 c_2^2 = m_1 c_1^{*2} + m_2 c_2^{*2} \dots \dots \dots (b)$$

Où  $m_1$  et  $m_2$  sont la masse des deux particules sélectionnées pour le processus de collision, et  $c_m$  est la vitesse du centre de masse des deux particules comme suit,

$$c_m = \frac{m_1 c_1 + m_2 c_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1 c_1^* + m_2 c_2^*}{m_1 + m_2} \dots \dots \dots (c)$$

L'équation (a) montre que la vitesse du centre de masse ne change pas avec le processus de collision. De cette façon, les valeurs pré- et post-collision de la vitesse relative entre les particules peut être définie par :

$$c_r = c_1 - c_2 \quad c_r^* = c_1^* - c_2^* \dots \dots \dots (d)$$

Les équations (a) et (d) peuvent être combinés pour fournir les expressions suivantes :

$$c_1 = c_m + \frac{m_2}{m_1 + m_2} c_r \quad c_2 = c_m - \frac{m_2}{m_1 + m_2} c_r \dots \dots \dots (e)$$

De même, les composantes post-collisions sont définies par :

$$c_1^* = c_m + \frac{m_2}{m_1 + m_2} c_r^* \quad c_2^* = c_m - \frac{m_2}{m_1 + m_2} c_r^* \dots \dots \dots (f)$$

On suppose que les particules sont des centres de force, c'est-à-dire que la force entre elles agit seulement entre leurs centres. De ce fait, tout au long de la collision, intermoléculaire la force et les trajectoires restent dans le même plan qui a été précédemment déterminé par les vitesses de pré-collision.

L'équation de conservation de l'énergie (b), peut être réécrite en utilisant les équations (e) et (f) comme suit,

$$m_1 c_1^2 + m_2 c_2^2 = (m_1 + m_2) c_m^2 + m_r c_r^2 \dots \dots \dots (g)$$

$$m_1 c_1^{*2} + m_2 c_2^{*2} = (m_1 + m_2) c_m^2 + m_r c_r^{*2} \dots \dots \dots (h)$$

où  $m_r$ , appelé masse réduite, est donné par,

$$m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dots \dots \dots (i)$$

Une comparaison entre les équations. (g) et (h) avec l'équation (b), montre que l'amplitude de la vitesse relative ne change pas dans le processus de collision, c'est-à-dire,

$$c_r = c_r^* \dots \dots \dots (j)$$

### II.2.5 Les Interactions gaz-paroi

Dans le cas des gaz raréfiés l'autre situation qui conduit au changement de vitesse moléculaire est l'interaction avec une paroi [48].

Seuls deux modèles théoriques d'interaction moléculaire gaz-surface, spéculaire et les réflexions diffuses sont illustrées sur la figure II.7. Elles sont généralement utilisées dans les applications DSMC. Ces deux modèles ont été initialement proposés par Maxwell en 1879. Les conditions aux limites sont directement appliquées aux molécules individuelles interagissant avec une surface spécifique [54].

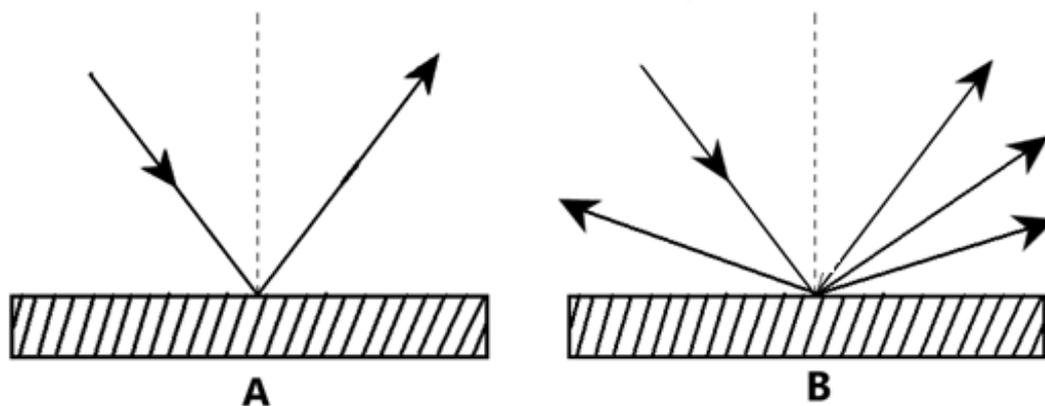


Figure II. 6 Modèles de réflexion spéculaire (A) et diffuse (B) pour les interactions gaz-surface

#### II.2.5.1 Modèle de réflexion spéculaire

Pour le modèle de réflexion spéculaire, l'interaction gaz-surface est traitée comme parfaitement élastique. De plus, la surface est lisse, comme un miroir idéal, et l'incidente molécule est réfléchi de telle sorte que sa composante de vitesse normale à la surface est inversée, tandis que la composante parallèle est conservée. Ce type d'interaction est parfaitement élastique et ne représente pas de véritables interactions molécule gaz-surface. Il est utilisé principalement pour les frontières où la conservation du nombre de molécules est requise et pour les lignes de symétrie. Lors de l'utilisation du modèle de réflexion spéculaire, les couches limites visqueuses et thermiques adjacentes aux limites sont absentes [54].

#### II.2.5.2 Modèle de réflexion diffuse

Pour le modèle de réflexion diffuse, l'interface moléculaire gaz-surface n'est pas lisse. Les composantes de vitesse des molécules réfléchies sont distribuées selon une distribution d'équilibre appliquée à la moitié d'un angle solide. L'équilibre de la distribution est basée sur une température réfléchi,  $T_r$ , qui n'est pas nécessairement la

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

---

même comme la température de paroi  $T_w$  [54]. Il est naturel de penser que le gaz réfléchi, par rapport à celui incident, aura tendance à ajuster sa température à la température de surface. L'étendue de cet ajustement est donnée par le coefficient d'accommodation thermal [57].

### II.2.5.3 Coefficient d'accommodation

On appelle coefficient d'accommodation  $\sigma_Q$  d'une grandeur  $Q$  (énergie cinétique normale, tangentielle, totale, énergie interne, quantité de mouvement normale et tangentielle) le nombre adimensionnel défini par Bird (1994) et Lengrand (2003) et à la suite des travaux d'Ameur et al. [64, 65] :

$$\sigma_Q = (Q_i - Q_r)/(Q_i - Q_w)$$

Donc :

$$Q_r = (1 - \sigma_Q)Q_i + \sigma_Q Q_w$$

Avec :  $Q_i$  : la densité de flux incident de la grandeur  $Q$ .

$Q_r$  : la densité de flux réfléchi effectivement.

$Q_w$  : la densité de flux qui serait réfléchi si les molécules subissaient une réflexion diffuse avec accommodation parfaite.

### II.2.6 Les modèles moléculaires pour DSMC

Il existe plusieurs approches pour modéliser les molécules et leurs interactions dans un gaz. Le choix du modèle moléculaire va jouer un rôle dans les collisions par le biais de la surface de collision [50].

Le modèle moléculaire est également nécessaire pour calculer la section efficace totale, ce qui est nécessaire pour calculer la fréquence des collisions. La fréquence de collision est un paramètre clé pour définir le pas de temps de la simulation. Un modèle implique toujours un certain degré d'approximation et le but ici est d'utiliser un modèle qui conduit à un accord suffisant entre la théorie et l'expérience. Ici seront présentés seulement cinq modèles qui sont couramment utilisés dans DSMC. Ce sont le modèle de loi de puissance inverse (IPL), le modèle de sphère rigide (HS), le modèle de sphère rigide variable (VHS), le modèle de sphère molle variable (VSS) et le modèle de sphère rigide général (GHS).

#### II.2.6.1 Modèle en loi de puissance inverse (Inverse Power Law IPL)

Un modèle plus approprié d'écoulements à haute température, où intermoléculaire la répulsion prévaut, est le modèle de loi de puissance inverse (IPL).

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

---

Ce modèle est appelé aussi le modèle de force répulsive en puissance (El Fadili 1987).

D'après Bird (1994) et kandlikar et al (2005) ce modèle est défini par :

$$F = \frac{\vartheta}{d^\eta}$$

Où le terme de potentiel :

$$\Phi = \frac{\vartheta}{(\eta - 1)d^{\eta-1}}$$

La force F représente la force répulsive par laquelle deux molécules séparées d'une distance d peuvent interagir,  $\vartheta$  et  $\eta$  représente des constantes.

A partir de cette expression, l'angle de déviation peut être calculé. Un inconvénient pratique important de ce modèle est que pour un  $\eta$  fini le champ de force s'étend à l'infini et l'intégrale pour le total de la section transversale diverge. Cela signifie que deux molécules ont toujours une collision d'une sorte d'interaction. Cependant, la plupart de ces interactions impliquent des déflexions extrêmement légères parce que les molécules sont éloignées les unes des autres [57]. En pratique, une coupure finie sur le champ de force est utilisée donc une section transversale finie peut être calculée. Mais comme cette coupure est arbitraire, la section efficace totale résultante ne convient pas pour régler la fréquence de collision effective ou le libre parcours moyen. Le modèle de loi de puissance inverse est le modèle le plus réaliste du point de vue analytique. Il est donc utile pour les études analytiques. Cependant, ce n'est pas un modèle approprié pour les collisions de simulation directe [55, 57].

### II.2.6.2 Modèle de sphère rigide (Hard Sphère HS)

Le modèle de la sphère dure (HS) est un cas particulier du modèle IPL avec  $\eta = \infty$ . Un autre cas particulier est le modèle Maxwell avec  $\eta = 5$ . La valeur de  $\eta$  pour le HS modèle et le modèle de Maxwell sont généralement acceptés comme les cas limitant pour les molécules « rigides » et « molles », respectivement. Pour une vraie molécule monoatomique, l'efficacité de la valeur de  $\eta$  est d'environ 10 [54].

Pour le modèle HS, il a été montré que la section efficace totale  $\sigma_t$  est constante, comme indiqué précédemment avec l'équation suivante  $\sigma_t = \pi d^2$ . La diffusion moléculaire est isotrope de sorte que la vitesse post-collision est uniforme dans l'angle solide. Le modèle HS est simple et facile à intégrer dans les procédures DSMC. Cependant, sa principale lacune est que cette loi de dispersion n'est pas réaliste. Pour un gaz réel, « $\sigma_t$  est une fonction forte de  $c_r$  et l'énergie de translation relative  $e_{tr}$ , donnée par

$$e_{tr} = \frac{1}{2} m c_r^2$$

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

---

Dans le modèle HS, le coefficient de viscosité  $\mu$  est proportionnel à  $T^{0.5}$ , au lieu de la Variation  $T^{0.75}$  plus réaliste (Bird 1994) [54].

### II.2.6.3 Modèle de sphère rigide variable (Variable Hard Sphère VHS)

Le modèle VHS prend le meilleur de deux modèles IPL et HS, en reproduisant une loi de viscosité en puissance assez réaliste comme le fait le modèle IPL et un calcul de collision assez simple comme le fait le modèle HS. Les molécules VHS sont considérées comme des sphères rigides dont le diamètre s'adapte suivant la vitesse relative en module  $c_r$  de la partenaire de collision [30].

Le modèle VHS est actuellement le modèle le plus utilisé en direct simulation Monte Carlo (DSMC), en raison de sa simplicité et son approximation effective du potentiel intermoléculaire réel.

A partir de la théorie de Chapman-Enskog appliquée à la solution de l'équation de Boltzmann, on peut calculer l'expression du coefficient de viscosité pour un gaz simple

$$\mu_{VHS} = \frac{15 m \sqrt{\pi r T}}{8 \left(\frac{5}{2} - \omega\right)^{\omega - \frac{1}{2}} \Gamma\left(\frac{9}{2} - \omega\right) \sigma_{t0}} \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\omega - \frac{1}{2}}$$

La fonction gamma est définie par :

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt$$

La section efficace de collision  $\sigma_{t0}$  est calculée sous la température de référence  $T_0$ .

Et :

$$\lambda_{VHS} = \frac{8}{15 m n \sqrt{2\pi r T}} \frac{\mu_{VHS}}{\Gamma\left(\frac{5}{2} - \omega\right)} \Gamma\left(\frac{9}{2} - \omega\right)$$

Or :

$$\begin{cases} \Gamma(x + 1) = x! & \text{Pour } x \text{ entier} \\ \Gamma(x + 1) = x\Gamma(x) & \text{Dans le cas général} \end{cases}$$

## Chapitre II : La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC)

---

### II.2.6.4 Modèle de sphère molle variable (Variable Soft Sphere VSS)

Un modèle plus complet que le modèle précédent VHS, proposé par Koura et Matsumoto [(1991) (1992)] c'est le modèle de Sphère Molle Variable (VSS). Ce modèle permet une meilleure modélisation physique.

Le modèle VSS est une extension du modèle VHS, il nécessite d'introduire dans l'expression du libre parcours moyen  $\lambda$ , et de la fréquence de collision  $\nu$  un paramètre  $\alpha$  lié à l'angle de la molécule après collision [30].

Des explications détaillées sont données dans Lengrand (2003).

### II.2.6.5 Modèle de sphère rigide généralisée (The Generalized Hard Sphere GHS)

Le modèle de sphère dure généralisée (GHS) (Hash et Hassan 1993) est une extension des modèles VHS et VSS. Il porte la même relation avec la classe de potentiel Lennard-Jones (L-J) que les modèles VHS et VSS conventionnels portent au potentiel IPL. La distribution de diffusion est celle de la sphère dure ou molle, mais la variation de la section efficace totale en fonction de l'énergie de translation relative mime celle de la potentiel attractif-répulsif correspondant. Il est mis en œuvre à travers les paramètres qui décrivent les potentiels intermoléculaires, et peuvent donc utiliser la base de données existante qui a été constituée à partir des mesures propriétés de transport des gaz réels [54, 47, 59, 60].

## II.3 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons présenté un aperçu de la simulation de Monte Carlo dans sa forme générale. Après cela, nous avons alloué la plus grande part afin d'introduire la simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC) (définition, principe et procédure). Nous avons également cité quelques concepts et définitions dont dépend la simulation numérique au cours du troisième chapitre.

---

## **Chapitre III: Modélisation et résultats numériques**

---

### III.1 Introduction

Les recherches sur les microsystèmes électromécaniques (MEMS) est de plus en plus répandue, à la fois dans les recherches scientifique que dans les applications commerciales. Les échelles de longueur caractéristiques qui régissent le transport de la quantité de mouvement et d'énergie entre les MEMS et leur environnement sont généralement de l'ordre du micron. Avec la demande croissante de dispositifs mécaniques de taille micron il est très important de comprendre le comportement des écoulements micro-fluides. Les simulations numériques permettent de prédire l'écoulement des fluides et le transfert de chaleur dans les dispositifs mécaniques et d'évaluer les performances d'un nouveau micro-dispositif avant la fabrication du matériel. Les majorités des méthodes de dynamique des fluides numériques (CFD) pour étudier l'écoulement des fluides sont basées sur les équations d'Euler ou de Navier-Stokes. Les MEMS, cependant, sont souvent utilisés dans des environnements gazeux aux conditions atmosphériques, où le libre parcours moyen des molécules est d'environ 70 nm [61]. Le rapport entre le libre parcours moyen ( $\lambda$ ) et la dimension caractéristique ( $L$ ) peut être appréciable. Ce rapport, connu sous le nom de nombre de Knudsen ( $Kn = \lambda/L$ ), est utilisé pour indiquer le degré de raréfaction de l'écoulement. Lorsqu'il augmente, l'échange de quantité de mouvement et d'énergie entre les systèmes et l'environnement présente un comportement qui peut être attribué à la composition moléculaire discrète de l'environnement [61].

En général, lorsque  $Kn=0.01$ , l'effet de raréfaction tend à être significatif. Par conséquent, la CFD devient imprécis lorsqu'elle simule l'écoulement autour des dispositifs présentant de taille micrométrique.

Dans le cadre de la dynamique des gaz raréfiés, de nombreuses études théoriques, numériques et expérimentales, en régime continu, glissant, de transition et moléculaire libre, se sont focalisées sur ces écoulements. Les simulations directes de Monte Carlo (DSMC) sont bien adaptées à la gestion des écoulements microfluidiques, et donnent d'excellents résultats dans le cas des régimes de transition [62].

La simulation directe par la méthode de Monte Carlo (DSMC) est une technique de modélisation numérique à base de particules mise au point par G.Bird. Elle permet de calculer les trajectoires d'un grand nombre de particules et calcule les quantités macroscopiques par échantillonnage des propriétés des particules. Le seul inconvénient de la méthode DSMC est le coût du temps de calcul très élevé.

Dans ce chapitre, nous présentons une modélisation de l'écoulement de gaz de monoxyde de carbone (CO) dans un micro-canal, en utilisant la simulation directe par la méthode de Monte Carlo, dans le but de vérifier une loi de Darcy à travers le micro-canal étudié.

### III.2 Position de problème

Pour la présente étude, l'écoulement de gaz de monoxyde de carbone (CO) à travers un micro-canal se connecte entre deux réservoirs (voir Figure III.1). L'écoulement est stationnaire et plan. Pour simplifier, nous supposons que la molécule est monoatomique ; Le cas des molécules diatomiques est pensé naturellement.

Les deux réservoirs sont identiques avec les dimensions suivantes : Longueur  $\ell' = 7 \mu\text{m}$  et hauteur  $H = 5 \mu\text{m}$ . La géométrie du micro-canal qui relie les deux réservoirs est : Longueur  $\ell = 10 \mu\text{m}$  et hauteur  $h = 1 \mu\text{m}$ .

Le tracé BCDE représente la paroi solide du micro canal, c'est-à-dire la paroi sur laquelle les conditions aux limites de réflexion diffuse sont appliquées. La géométrie inclut deux régions l'une est la région d'entrée de longueur ( $AB = \ell'$ ) et l'autre est la région de sortie de longueur ( $EF = \ell'$ ). Des conditions de symétrie sont appliquées sur les surfaces (AB), (EF) et sur l'axe (X1X2). On introduit un repère orthonormé (O,x,y), l'origine  $O = x_0$  étant au centre de micro-canal comme montre la Figure III.1 et l'axe (O, x) étant un axe de symétrie.

Les conditions aux limites sur la surface de sortie ( $x_2F$ ) sont la pression constante  $P_{\text{out}} = 1\text{bar}$ . On suppose que l'écoulement est isotherme à la température 300K à l'entrée et à la sortie et sur la paroi solide la température est la même et fixée à 300K. Sur la paroi solide, le coefficient d'accommodation est égal à un ( $\sigma = 1$ ), cela signifie que nous avons une accommodation parfaite.

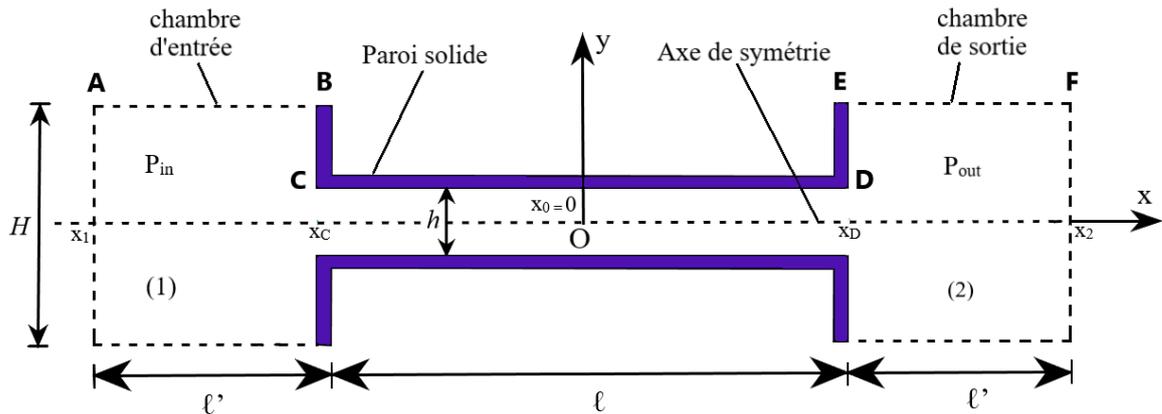
L'écoulement est créé dans le domaine par les gradients de pression. Le débit est dirigé de la gauche vers la droite pression.  $P_{\text{in}}$  représente la pression à l'entrée du premier réservoir (1) et  $P_{\text{out}}$  est la pression à la sortie du deuxième réservoir (2). Pour tous les calculs, nous avons fixé  $P_{\text{out}} = 1\text{bar}$  dans la région de sortie et nous avons varié  $P_{\text{in}}$  dans la région d'entrée, pour que la différence de pression entre l'entrée et la sortie varie de 0.1 bar à 5 bar.

Le programme utilisé pour toutes les simulations numériques est appelé code DS2V et est donné par Bird dans la version 3.4.01 (Bird 2005).

Le gaz étudié est le monoxyde de carbone (CO), ses propriétés moléculaires sous les conditions standards de température et de pression :  $T_0 = 273\text{K}$  et  $P_0 = 1.013 \times 10^5 \text{Pa}$ , sont indiquées dans le tableau suivant :

**Tableau 5 Les propriétés moléculaires du gaz de monoxyde de carbone.**

$d_p$ [m]	$m_p$ [kg]
$4.19 \times 10^{-10}$	$4.65 \times 10^{-26}$



**Figure III.1 Géométrie du micro-canal pour les simulations DSMC.**

### III.3 Modélisation et paramètres

La méthode DSMC est une méthode statistique qui suit les principes fondamentaux décrits par Bird (1994). Cette méthode est composée d'expériences numériques qui simulent un nombre limité de molécules test, chaque molécule test étant représentative d'un grand nombre de molécules réelles [63].

La méthode DSMC est basée sur la séparation des deux principaux phénomènes qui déterminent le mouvement de la molécule : Le déplacement et la collision [64]. Numériquement, ces deux phases sont traitées séparément. Cette séparation exige que le pas de temps soit choisi pour être plus petit que la durée moyenne de vol des molécules. Pendant chaque pas de temps, une particule subit un vol libre sans collision avec d'autres particules, les molécules qui quittent le domaine de calcul sont éliminées.

Si au cours de son vol libre, la particule heurte une surface solide, sa vitesse est modifiée selon un modèle d'interaction avec la paroi. Dans cette étude une réflexion diffuse avec accommodation parfaite a été utilisée, c'est-à-dire que le coefficient d'accommodation est égal à un [65].

Si les molécules entrent en collision entre elles, les partenaires de collision sont sélectionnés dans la même cellule par la technique NTC (No Time Counter) qui permet de respecter la fréquence réelle de collision du gaz [30].

La phase de collision représente l'étape de simulation la plus importante. Le modèle de collision VHS (Variable Hard Sphere) est utilisé : Les molécules sont supposées être des sphères rigides dont le diamètre s'adapte en fonction de la vitesse de leurs partenaires de collision [64, 65]. Le modèle VHS est un compromis entre le modèle IPL (Inverse Power Law) et le modèle HS (Hard Sphere), car il prend le meilleur des deux modèles en reproduisant une Loi de puissance réaliste de la viscosité comme le modèle IPL, tout en gardant un calcul simple des collisions comme dans le du modèle HS:

$$\mu = \mu_0 (T/T_0)^\omega$$

où  $\omega$  est une constante et  $T_0$  une température de référence sous les conditions standards de température et de pression.

Le libre parcours moyen  $\lambda$  est donné par la relation :

$$\lambda = \frac{\mu_{VHS}}{\rho\sqrt{2\pi rT}} \frac{2(7-2\omega)(5-2\omega)}{15}$$

où  $\rho$  est la masse volumique du gaz,  $T$  sa température, et  $R$  la constante massique des gaz parfaits. La viscosité dynamique de référence  $\mu_0$  est calculée sous les conditions standards de pression et de température.

### III.4 Résultats numériques

#### III.4.1 Etude de la pression

La Figure III.2 montre l'évolution de la pression le long du micro-canal pour différentes valeurs de l'ordonnée  $y$  dans le cas de  $P_1=1.5e5$  Pa. Afin de voir le comportement de l'écoulement lorsqu'on s'approche de la paroi solide, nous avons choisi deux valeurs de  $y$ , sur l'axe de symétrie du micro-canal ( $y=0$ ) et très proche de la paroi horizontale ( $y=0.5 e-6$  m) afin de voir l'influence de la proximité par rapport à la paroi sur le comportement de la pression. Les résultats montrent clairement que la pression est quasi-indépendante de l'ordonnée  $y$ .

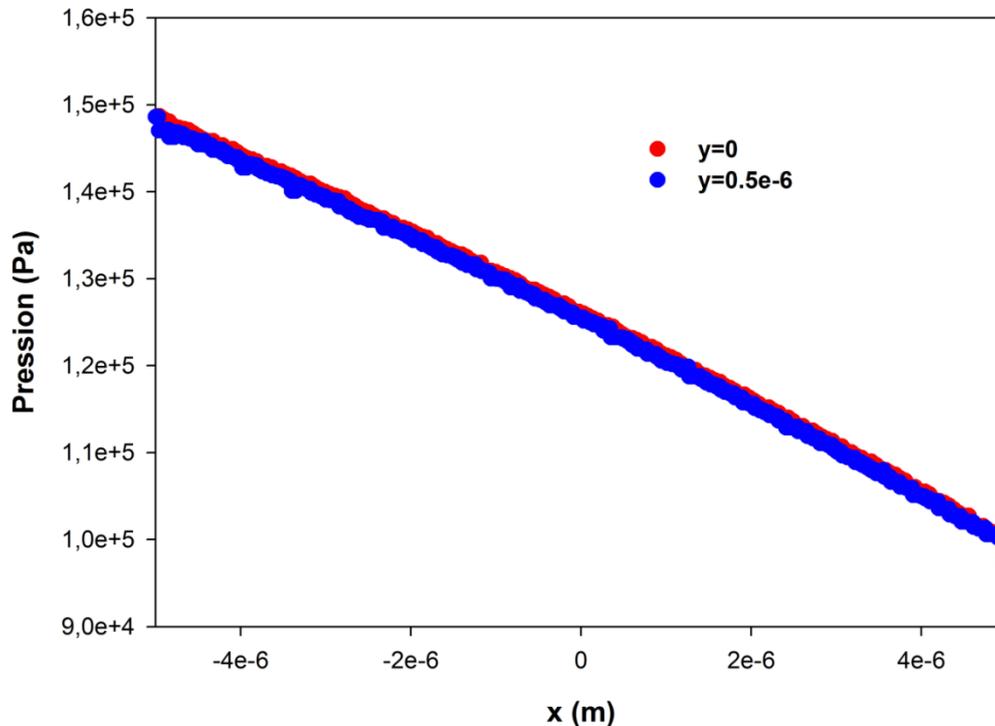
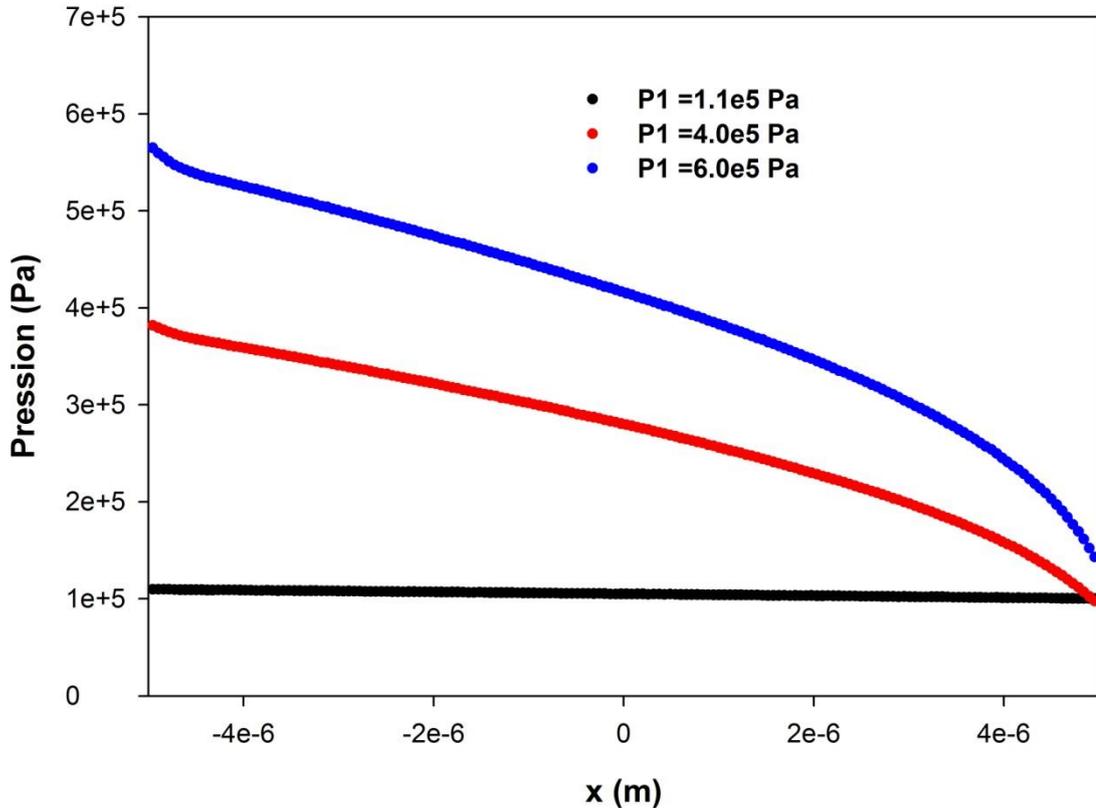


Figure III. 2 Pression en fonction de l'abscisse  $x$  dans le micro-canal pour différentes ordonnées.

La Figure III.3 représente la variation de la pression le long de l'axe de symétrie pour différentes valeurs de pression d'entrée  $P_1$ .



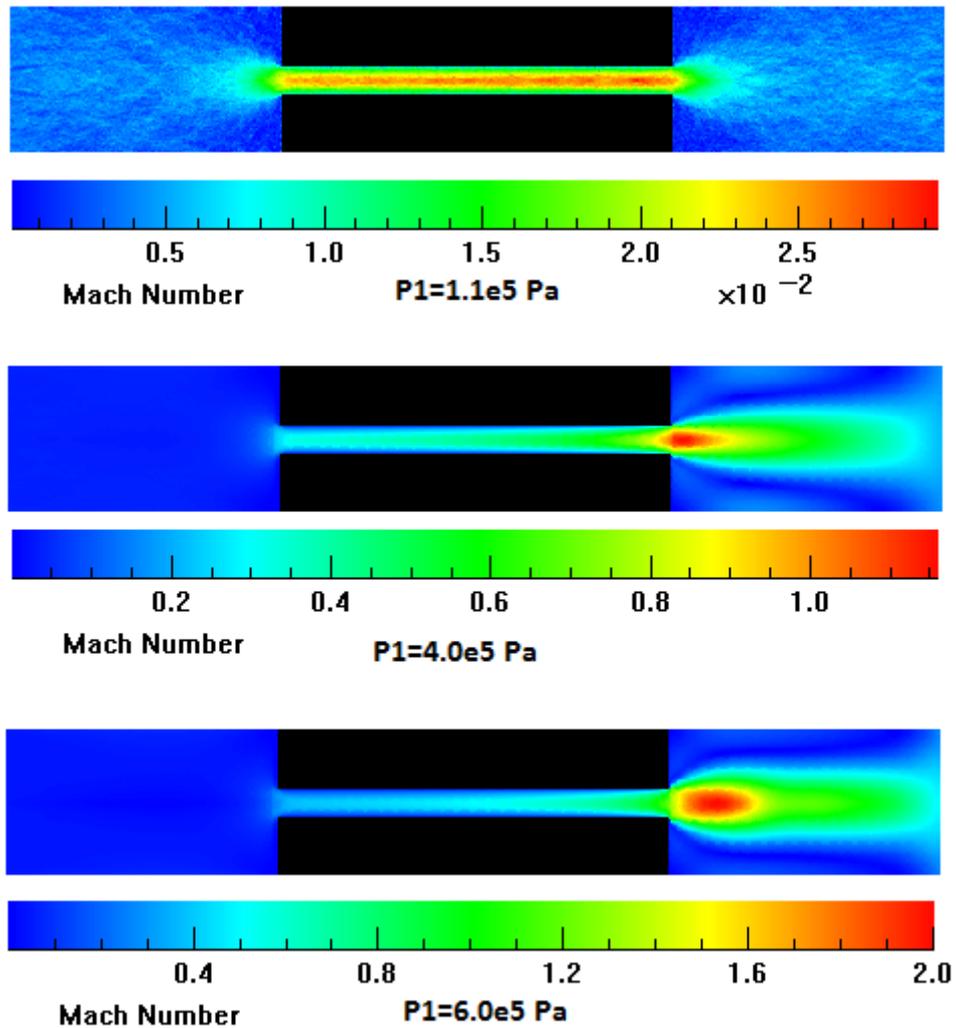
**Figure III. 3** Variation la pression le long du micro-canal à  $y=0$  pour trois valeurs de pression d'entrée  $P_1=1.1 \times 10^5$  Pa,  $P_1=4.0 \times 10^5$  Pa et la pression  $P_1=6.0 \times 10^5$  Pa

On observe sur ce graphique que pour des  $P_1 < 4.0 \times 10^5$  Pa correspondant à des différences de pression inférieures à  $3.0 \times 10^5$  Pa, le profil de la pression est quasi-linéaire le long du micro-canal. Pour des valeurs de différences de pression supérieures ou égales à  $3.0 \times 10^5$  Pa, le profil de la pression le long du micro-canal devient de plus en plus non linéaire.

### III.4.2 Etude de nombre de mach et du libre parcours moyens

Nous présentons dans la Figure III.4, la variation du nombre de Mach pour trois valeurs de pression  $P_1$  différentes. Les résultats montrent que pour des faibles pressions ( $1.1 \times 10^5$  Pa), l'écoulement est subsonique traduit par un Mach faible de l'ordre de  $10^{-2}$ . Au-delà d'une pression de  $4 \times 10^5$  Pa, la valeur critique de  $Ma=1$  est dépassée, et la limite des écoulements supersonique est franchie et traduit clairement par un disque de Mach visible dans le cas de  $P_1=6.0 \times 10^5$  Pa.

Pour des  $Ma < 1$  la raréfaction augmente également. Si le nombre de Mach est supérieur à un, ( $Ma > 1$ ) on est en présence d'un écoulement compressible supersonique, ce qui conduit à une diminution de la raréfaction.



**Figure III. 4 Variation du nombre de Mach dans les cas de pression d'entrée  $P_1=1.1e5$  Pa,  $P_1=4.0e5$  Pa et la pression  $P_1=6.0e5$  Pa**

La Figure III.5 représente une variation du libre parcours moyen pour les trois pressions,  $1.1e5$  Pa,  $4.0e5$  Pa et  $6.0e5$  Pa. Ce nombre varie progressivement dans la direction de l'écoulement. Dans la chambre d'entrée et de sortie et dans la direction transversale cette variation est négligeable. Nous constatons que plus la différence de pression augmente plus la raréfaction diminue vu que le nombre de Knudsen (respectivement le libre parcours moyen) est inversement proportionnelle à la pression.

Donc on a une relation antagoniste entre la différence de pression et la raréfaction, et

- Le libre parcours moyen c'est-à-dire : (Augmentation : ↗, Diminution ↘)
- La différence de pression  $\Delta P$  ↗ ; la raréfaction ↘
- La différence de pression  $\Delta P$  ↘ ; la raréfaction ↗

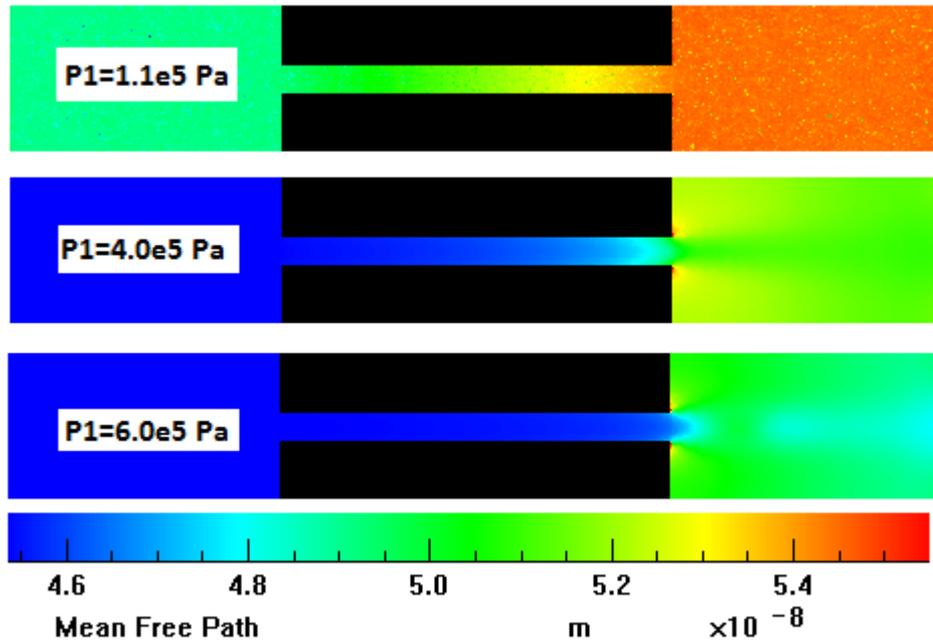


Figure III. 5 Variation du nombre du LPM pour trois valeurs de pression d'entrée  $P_1=1.1e5$  Pa,  $P_1=4.0e5$  Pa et la pression  $P_1=6.0e5$  Pa

### III.4.3 Etude du débit massique

Afin d'illustrer l'influence de la différence de la pression sur le débit massique, nous avons calculé le débit dans une section verticale du micro-canal.

Plaçons nous dans une section droite d'abscisse  $x_0$  du micro-canal. Le debit massique numérique est calculé de la façon suivante :

$$Q = \int_{-d}^{+d} \rho u (y) dy$$

ou encore :

$$Q = \sum_{j=1}^n \rho(y_j) u(y_j)(y_{j+1} - y_j)$$

Où  $\rho (y_i)$  et  $u (y_i)$  représentent respectivement la masse volumique et la vitesse de l'écoulement au centre de la cellule d'ordonnée  $y_i$  ( $j= 1, 2, 3, \dots, n$ ).

Nous remarquons d'après le Tableau 6 que plus la différence de pressions augmente, plus le débit massique augmente.

**Tableau 6 Valeurs numériques du débit massiques en fonction de la différence de pression calculés dans la section verticale au centre du micro-canal.**

$\Delta P$ ( $\times 10^5$ Pa)	Q (Kg/s)
0.1	3.731100E-06
0.5	2.156953E-05
1.0	4.178935E-05
1.4	6.07168E-05
1.6	7.031323E-05
2.0	9.334109E-05
3.0	1.078283E-04
4.0	1.514259E-04
5.0	1.984017E-04

D'après la Figure III.6, on remarque une variation quasi-linéaire du débit massique en fonction de la différence de pression. Cette variation semble prendre un caractère linéaire passant par l'origine pour des faibles nombre de différence de pression ( $\Delta P < 3 \times 10^5$  Pa). Néanmoins, pour des valeurs supérieures à cette valeur limite ( $\Delta P > 3 \times 10^5$  Pa), cette linéarité n'est plus assurée.

Nous pouvons conclure que pour des faibles valeurs de différences de pression correspondant à un écoulement subsonique, on a l'impression qu'une loi de Darcy est vérifiée. Pour des différences de pression plus élevées, les premiers effets de compressibilités apparaissent et l'écoulement prend un caractère supersonique traduit par un comportement non linéaire de la courbe ( $\Delta P$ , Q) et la loi de Darcy n'est plus vérifiée.

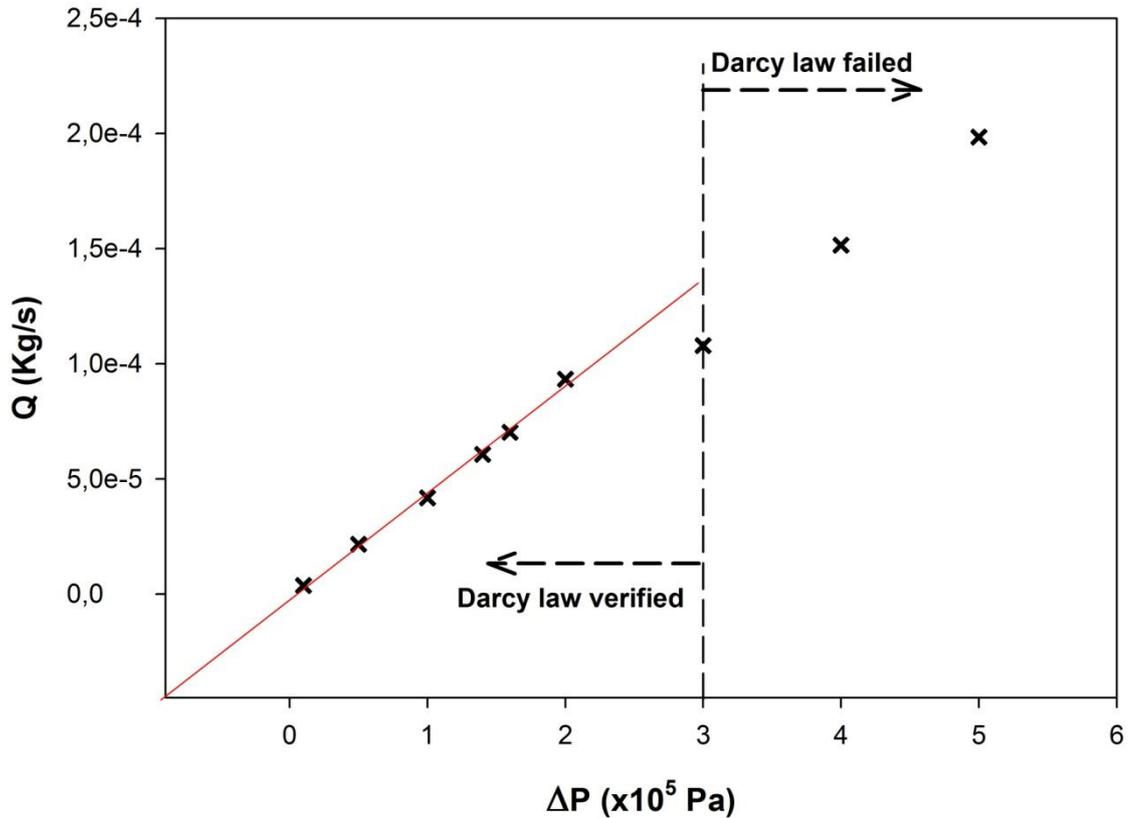


Figure III. 6 Débit massique  $Q$  dans la section verticale au centre du micro-canal en fonction de la différence de pression  $\Delta P$

### III.5 CONCLUSION

Nous concluons à travers ce chapitre, plusieurs points dont le plus important est que les premiers effets de compression apparaissent suite à la diminution des effets de vide. Nous avons également appris que le débit et la différence de pression sont proportionnels. Pour des faibles valeurs de différences de pression la loi de Darcy est vérifiée. Pour des différences de pression plus élevées, la loi de Darcy n'est plus vérifiée.

---

## Conclusion et perspectives

---

## Conclusion générale et perspectives

---

A travers ce travail, nous avons réalisé une étude numérique de la dynamique d'écoulement d'un gaz monoxyde de carbone traversant un micro-canal. Nous dirigeons l'écoulement en faisant une différence de pression entre l'entrée et la sortie. Au cours du premier chapitre, nous avons mené une étude bibliographique, suivie dans le deuxième chapitre d'une exposition des techniques de base de la simulation directe par la méthode de Monte Carlo. Au cours du troisième chapitre, nous faisons une modélisation numérique de l'écoulement, basé sur la DSMC, les résultats obtenus durant cette étude montrent la validité de la loi de Darcy. Nous discutons d'abord de l'évolution de la pression le long du petit canal pour différentes valeurs de l'ordonnée  $y$ , les résultats montrent que l'évolution de la pression est totalement indépendante de l'ordonnée  $y$ . Ensuite, nous avons discuté de l'évolution de la pression le long du petit canal, où les résultats ont révélé une relation linéaire entre la pression et la longueur du canal. Nous avons également conclu d'après les résultats de l'étude de Variation du nombre de Mach et Variation du nombre du LPM que Les premiers effets de compressibilité apparaissent pour suite à la diminution des effets de raréfaction, et L'incompressibilité de l'écoulement est accompagnée d'un caractère subsonique représenté par des nombres de Mach inférieurs à 1. Enfin nous avons extrait que Pour des valeur de  $\Delta P < 3.10^5$  Pa, l'étude de la variation du débit massique en fonction de  $\Delta P$  nous a permis de mettre en évidence une loi de Darcy approchée.

Concernant les perspectives de ce travail, nous le résumons dans les points suivants :

- Etude d'un écoulement de gaz dans un pore cylindrique avec un calcul axisymétrique est plus réaliste. En cas de réalisation, la relation linéaire entre débit et  $\Delta P$  peut être de nouveau analysée.
- D'autres gaz peuvent être étudiés pour voir l'influence des propriétés thermodynamiques sur la loi de Darcy.
- Etude de l'influence de la rugosité de la paroi sur la perméabilité.
- Dans l'ensemble de notre étude, nous n'avons utilisé qu'un seul gaz (CO). Il sera intéressant d'étudier le comportement d'un ou plusieurs mélanges gazeux dans le micro-canal.
- Dans ce travail, nous utilisons le modèle VHS pour simuler les collisions entre molécules, et dans une large mesure le modèle de réflexion diffuse pour simuler les interactions gaz-paroi. Il serait intéressant d'utiliser d'autres modèles de (comme le modèle VSS et le modèle CLL).
- La méthode de Monte Carlo est très utile pour les simulations des phénomènes présentant une incertitude importante mais son inconvénient est le coût plus élevé du temps.

## ***BIBLIOGRAPHIE***

- [1] index.html. <http://physique.unice.fr/>. [En ligne] 2012.  
<http://physique.unice.fr/sem6/2013-2014/PagesWeb/PT/Microfluidique/index.html>.
- [2] **Patrick.Tabeling** (2005). *Introduction to Microfluidics*. Oxford University Press.
- [3] **ABDELAZIZ,KHALDI**. *Contribution à l'étude d'écoulements traversant les microcanaux*, Oran : These de Doctorat Université des Sciences et de la Technologie d'Oran Mohamed Boudiaf.
- [4] **CHOFFRUT, Olivier** (2018/2019). *MICROFLUIDIQUE : Mémoire M2*.
- [5] *An Introduction to MEMS (Micro-electromechanical Systems)* . Loughborough : PRIME Faraday Partnership, 2002. 1-84402-020-7.
- [6] **BRIXI, NIGASSA Mohammed El Amine** (2019). *Introduction aux microsysteme (MEMS)*.
- [7] **Hélène HORSIN.MOLINARO, FRANÇAIS. Olivier** (2014). *Les Technologies MEMS*. PARIS : CACHAN
- [8] **BOUDJELLA.SABRIA** (2014). *ETUDE ET SIMULATION DES MICROSYSTEMES A BASE DE LA TECHNOLOGIE MEMS*. Mostaganem : Thèse de Doctorat Université Abdel Hamid Ibn Badis de Mostaganem.
- [9] **Feynman. Richard. P** (1992). *There's Plenty of Room at the Bottom* : Journal of Microelectromechanical Systems, Vol. 1, pp. 60–66.
- [10] **Basu. Joydeep, Tarun Kanti. Bhattacharyya** (2011). *Microelectromechanical Resonators for Radio Frequency Communication Application*, Kharagpur : Springer-Verlag, Microsystem Technologies, Vol. 17, pp. 1557–1580.
- [11] museum-story-of-intel-4004.html. [www.intel.la](http://www.intel.la). [En ligne] [Citation : 09 04 2021.]  
<https://www.intel.la/content/www/xl/es/history/museum-story-of-intel-4004.html>.
- [12] *History of MEMS* : Southwest Center for Microsystems Education (SCME), May 2017.
- [13] **Nam-Trung. Nguyen , , Steven T. Wereley** (2006). *Fundamentals and Applications of Microfluidics*. 2e édition. Boston-London : ARTECH HOUSE, 1-58053-972-6.
- [14] **C. Y. Chang, S. M. Sze** (2000). *ULSI devices* . New York : Wiley.
- [15] **KURT E. PETERSEN** (1982). Silicon as a Mechanical Material, PROCEEDINGS OF THE IEEE, Vol. 70, pp. 420–457.

- [16] **A.Manz, N.Grabner, H. M. Widmer** (1990). *Miniaturized Total Chemical Analysis Systems: A Novel Concept for Chemical Sensing*. Basel (Switzerland) : Sensors and Actuators B1, Vol. 1, pp. 244–248.
- [17] **P.Gravesen, J.Branebjerg, O. S. Jensen** (1993). *Microfluidics-a review*, Nordborg, Denmark, Journal of Micromechanics and Micro-engineering, Vol. 3, pp. 168–182.
- [18] **Nam-Trung. Nguyen, Steven T. Wereley, Seyed Ali Shaegh. Mousavi** (2019). *Fundamentals and Applications of Microfluidics*, 3e édition, Boston-London : Artech House. 978-1-63081-364-2.
- [19] **Tawfiq. CHEKIFI** (2015/2016). *MICROGOUTTES : ETUDE DE LA PRODUCTION ET LA MANIPULATION DES MICROGOUTTES DANS LES ECOULEMENTS FLUIDIQUES, DANS LES MICROCANAU, AUX PROFITS DU GENIE DES PROCEDES*. Béchar : These de Doctorat Université Tahri Mohammed Béchar .
- [20] 123rf. <https://fr.123rf.com/>. [En ligne] [Citation : 18 04 2021.] [https://fr.123rf.com/photo\\_39942679\\_un-laboratoire-sur-puce-est-le-dispositif-int%C3%A8gre-plusieurs-proc%C3%A9s-de-laboratoire-dans-un-seul-appareil.html](https://fr.123rf.com/photo_39942679_un-laboratoire-sur-puce-est-le-dispositif-int%C3%A8gre-plusieurs-proc%C3%A9s-de-laboratoire-dans-un-seul-appareil.html).
- [21] **Ali. Abou-Hassan** (2011). *Les microréacteurs Un nouvel outil pour la chimie inorganique*, Paris.
- [22] **Rémy. Fulcrand** (2009). *Etude et développement d'une plateforme microfluidique dédiée à des applications biologiques Intégration d'un actionneur magnétique sur substrat souple*, TOULOUSE : These DOCTORAT DE L'UNIVERSITE PAUL-SABATIER TOULOUSE III.
- [23] **Alexandre. Antoniotti, Jason. Koubi** (2014). *Calibration d'un système microfluidique pour la fabrication de gouttes monodisperses*, Nice : Rapport de stage en laboratoire Physique de la Matière Condensée Université Nice Sophia-Antipolis.
- [24] **PITAKARNNOP. Jeerasak**, (2009). *Analyse expérimentale et simulation numérique d'écoulements raréfiés de gaz simples et de mélanges gazeux dans les microcanaux*, TOULOUSE : THESE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE.
- [25] **HE. Peiyuan** (2009). *Conception et réalisation d'un système microfluidique pour la production de gouttes calibrées et leur encapsulation*, COMPIEGNE : These de Doctorat UNIVERSITE DE TECHNOLOGIE DE COMPIEGNE.
- [26] **FRANÇAIS. Olivier, Hélène HORSIN. MOLINARO** (2016). *La microfluidique : principes physiques et mise en œuvre d'écoulements continus*, Paris : CACHAN.
- [27] **Roux-Marchand. Thibaut** (2013) . *Système microfluidique à onde élastique de surface : vers la duplication d'ADN par PCR*, LORRAINE : These de Doctorat L'UNIVERSITÉ DE LORRAINE.

- [28] **Chahinez. Tchekiken** (2014). *Modélisations et simulations numériques d'écoulements compressibles dans des micro-conduites planes*, PARIS : These de Doctorat de l'Université PARIS-EST.
- [29] **Stéphane. Colin, Lucien. Baldas** (2004). *Effets de raréfaction dans les micro-écoulements gazeux*, Toulouse : Laboratoire de génie mécanique de Toulouse, Elsevier SAS, Vol. 5, pp. 521–530.
- [30] **Djilali. Ameer** (2008). *Modélisation analytique et simulation numérique par le méthode de Monte Carlo d'un écoulement de gaz dans des micro-canaux*, Paris : These de Doctoarat Université Pierre et Marie Curie Paris 6.
- [31] **Charles-Louis. Azzopardi** (2018). *Dispositifs microfluidiques pour l'injection de fluides à travers un réseau de gouttes : Application biocapteur*. Besançon : THESE DE DOCTORAT DE L'ETABLISSEMENT UNIVERSITE BOURGOGNE FRANCHE-COMTE PREPAREE A L'INSTITUT DE RECHERCHE FEMTO-ST.
- [32] **Nathalie. Tarchichi** (2013). *Microfluidique diphasique accordable*, Franche-Comté : These de Doctorat L'université de Franche-Comté.
- [33] **I. BOUHADDA, O. DE SAGAZAN, F. LE BIHAN** (2011). Réalisation de micro-canaux sur substrats de Silicium, Rennes.
- [34] Comprendre-la-microfluidique. <https://www.institut-pgg.fr>. [En ligne] Institut Pierre-Gilles de Gennes. [Citation : 19 Avril 2021.] [https://www.institut-pgg.fr/Comprendre-la-microfluidique\\_65.html](https://www.institut-pgg.fr/Comprendre-la-microfluidique_65.html).
- [35] **Joulin, Aldéric** (2019-2020). *Méthodes de Monte Carlo*, Toulouse : Département GMM - 4ème année INSA Toulouse.
- [36] **Rima. BENMICIA, Fatiha. FEDALA** (2016). *LA METHODE MONTE CARLO ET SES APPLICATIONS*, Mila : Mémoire de Master en Mathématiques Centre Universitaire de Mila-Algérie.
- [37] **ABDERRAZAK. TOUAM** (2018). *Méthodes Monte Carlo, application Bayésienne*, TIZI OUZOU : Mémoire de MASTER EN MATHEMATIQUES UNIVERSITE MOULOUD MAMMERI DE TIZI OUZOU.
- [38] **FAKHEREDDINE, Rana** (2013). *Méthodes de Monte Carlo stratifiées pour l'intégration et la simulation numériques*, GRENOBLE : These de Doctorat à L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE.
- [39] **Michel. ROGER** (2010). *Méthodes de Monte Carlo*, Saclay : Service de Physique de l'Etat Condensé CEA Saclay.
- [40] **OKAP ARLETTE MICHELLE. EDZANGO** (2008). *APPLICATION D'UN MODÈLE DE SIMULATION ET D'ANALYSE DE SENSIBILITÉ À L'ÉVALUATION D'UN PROJET DE CRÉATION*

*D'UN CENTRE DE LOGISTIQUE DANS UN CENTRE HOSPITALIER, MONTRÉAL : MÉMOIRE PRÉSENTÉ COMME EXIGENCE PARTIELLE DE LA MAÎTRISE EN ADMINISTRATION DES AFFAIRES UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À MONTRÉAL.*

[41] **Mbarka. SELMI, Mounir. LTIFI, Nizar. BEL HADJ ALI** (2006). *APPLICATION DE LA METHODE DE MONTE CARLO DANS L'ANALYSE DE LA STABILITÉ DES PENTES*, Lyon, Journées Nationales de Géotechnique et de Géologie de l'Ingénieur - JNGG, pp. 89-96.

[42] **Dirk P. Kroese, al** (2014). *Why the Monte Carlo method is so important today*, New York : Wiley Periodicals, WIREs Comput Stat, Vol. 6, pp. 386–392.

[43] **Young Hoon. Kwak, Lisa. Ingall** (2009) *Exploring monte carlo simulation applications for project management*, IEEE Engineering Management Review, Vol. 37, pp. 83-91.

[44] **C. CROIZET, R. GATIGNOL** (2017). *Écoulement d'un mélange de deux gaz dans un micro-canal circulaire sous l'effet d'un gradient de température pariétal et d'un gradient de pression*, 23ème Congrès Français de Mécanique.

[45] **Iain D. Boyd** (2009). *Direct Simulation Monte Carlo for Atmospheric Entry 2. Code Development and Application Results*, Michigan : NATO OTAN.

[46] **Rodrigo Cassineli. Palharini** (2014). *Atmospheric Reentry Modelling Using an Open-Source DSMC Code*, Glasgow, Scotland : These de Doctorat à L'University de Strathclyde.

[47] **William. Liou, Yichuan. Fang** (2005). *Microfluid Mechanics: Principles and Modeling. 1*, Michigan : McGraw-Hill Companies. pp. 350-369. 0071443223.

[48] **Hacene SI HADJ. MOHAND** (2015). *Micro-vélocimétrie par marquage moléculaire adaptée aux écoulements gazeux confinés*, Toulouse : These de Doctorat de L'Université de Toulouse, 2 décembre 2015.

[49] **Amin. Ebrahimi, Ehsan. Roohi** (2017). *DSMC investigation of rarefied gas flow through diverging micro- and nanochannels. 18*, Mashhad, Iran, Microfluidics and Nanofluidics, Vol. 21, pp. 01-25.

[50] **Hélène. MERTZ** (2019). *Modélisation des réactions chimiques dans un code de simulation par la méthode Monte Carlo*, Paris : These de Doctorat de l'Université Paris-Saclay.

[51] **Angelos G. Klothakis, Georgios N. Lygidakis, Ioannis K. Nikolos** (5–10 June 2016). *NUMERICAL ANALYSIS OF RAREFIED GAS FLOWS USING THE*, Greece : ECCOMAS Congress.

[52] **Ozgur. Aktas, N.R. Aluru, Ravaioli. Umberto** (2001). *Application of a Parallel DSMC Technique to Predict Flow Characteristics in Microfluidic Filters*, JOURNAL OF MICROELECTROMECHANICAL SYSTEMS, Vol. 10, pp. 538-549.

- [53] **Ye. WANG** (2013). *Ecoulement dans une pompe à vide turbomoléculaire : modélisation et analyse par voie numérique*, GRENOBLE : These de Doctorat DE L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE.
- [54] **Yichuan. Fang** (2003). *PARALLEL SIMULATION OF MICROFLOWS BY DSMC AND BURNETT EQUATIONS*, Michigan : These de Doctorat de L'University Western Michigan.
- [55] **Angelos. Klothakis** (2015). *DSMC simulations of rarefied hypersonic flows*, Chania : Mémoire de Master de Technical University of Crete School of Production Engineering and Management.
- [56] **Timothée. Ewart** (2007). *Etude des écoulements gazeux isothermes en microconduits : du régime hydrodynamique au proche régime moléculaire libre*, Marseille : These de Doctorat de L'Université de Provence - Aix-Marseille.
- [57] **MATÍAS. WARTELSKI** (2009). *Simulation of Plume-Spacecraft Interaction*, Stockholm : Mémoire de Master de School of Electrical Engineering Royal Institute of Technology Stockholm, Sweden.
- [58] **F. KHAMOUSHI ABARGHOUEI, O. ABOUALI, R. KAMALI** (2014). *NUMERICAL INVESTIGATION OF IMPINGING JETS IN RAREFIED CONDITION USING DSMC METHOD*. M1, Iran, IJST, Transactions of Mechanical Engineering, Vol. 38, pp. 69-78.
- [59] **G. A. Bird** (1994). *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*, New York : Clarendon Press.Oxford. Vol. 1. 0198561954.
- [60] **Ching. Shen** (2005). *Rarefied Gas Dynamics Fundamentals, Simulations and Micro Flows*. 1er édition. Berlin : Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 3-540-23926-X.
- [61] **H. XUE, Q. FAN, C. SHU** (2000). Prediction of micro-channel flows using direct simulation Monte Carlo. Probabilistic Engineering Mechanics, vol. 15, no 2, p. 213-219.
- [62] **Renée. GATIGNOL, Cédric. CROIZET** (2011). Modélisation asymptotique des écoulements de gaz dans des micro canaux-Comparaison avec des simulations DSMC. In : Congrès français de mécanique. AFM, Maison de la Mécanique, 39/41 rue Louis Blanc, 92400 Courbevoie, France (FR).
- [63] **Mehrnaz. REYHANIAN MASHHADI, Cédric. CROIZET, Renée. GATIGNOL** (2011). Longueur du mélange dans un micro-canal. In : Congrès français de mécanique. AFM, Maison de la Mécanique, 39/41 rue Louis Blanc, 92400 Courbevoie, France (FR).
- [64] **Djilali. AMEUR, Cédric. CROIZET, Fadila. MAROTEAUX, al** (2008). STUDY OF SLIP BOUNDARY CONDITIONS AND EFFECTS OF THE ACCOMMODATION COEFFICIENT IN MICROCHANNEL WITH DSMC METHOD.

[65] **Djilali. AMEUR, Cédric. CROIZET, Renée. GATIGNOL, al** (2007). Modélisation des écoulements dans des micro-filtres par la méthode DSMC. La Houille Blanche, no 6, p. 45-50.

[66] keranews.org [En ligne] [Citation : 12 07 2021.] <https://www.keranews.org/health-science-tech/2014-09-12/on-this-day-in-1958-a-ti-engineer-invented-a-chip-that-changed-the-world>



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° : TAM63/2021

**1<sup>st</sup> 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 Ameer**

presented an Oral communication entitled:

Study of a Darcy law for a gas flow by Numerical Direct Simulation Monte Carlo in a Micro-System

Co-author (s): Joanna Dib, Rachid Saim and Alae Eddine Aziz

Dean of the Faculty  
 Pr. Djamel BECHKI

