

Extension du modèle hybride multi échelle à une masse volumique variable

Van Huyen Vu*, Benoît Trouette, Quy Dong To, Eric Chénier

Laboratoire de Modélisation et Simulation Multi Echelle, UMR 8208 CNRS, Université Paris-Est Marne-la-Vallée, 5 Boulevard Descartes, 77454 Marne-la-Vallée Cedex 2, FRANCE

*(auteur correspondant : van-huyen.vu@u-pem.fr)

Résumé - Une modélisation hybride *dynamique moléculaire/Volumes finis* est présentée pour simuler l'écoulement d'un gaz compressible dans un canal de grande longueur. La méthode de contrôle de la masse volumique est en particulier détaillée et étudiée.

1. Introduction

Dans les conduites de très faible diamètre hydraulique, les interactions du fluide avec la paroi jouent un rôle déterminant sur la dynamique ainsi que sur les transferts de chaleur. Bien que de nombreux modèles continus existent dans la littérature pour représenter ces interactions, ils ne rendent pas nécessairement compte de l'ensemble des phénomènes qui peuvent avoir lieu à l'échelle moléculaire (physisorption, changement des propriétés des parois par des films de très fines épaisseurs, ...).

Pour répondre à cette problématique, une méthode hybride multi-échelle dédiée à la simulation d'écoulements fluides dans des micro ou nano conduites de grandes longueurs a été développée [1, 2]. Pour cela, l'interface entre le fluide et la paroi a été discrétisée en domaines élémentaires dans lesquels une modélisation adaptée aux plus petites échelles a été utilisée. Ces sous-domaines sont tous connectés au cœur de l'écoulement qui est modélisé par une approche continue, apte à traiter les grandes échelles. La communication entre les grandes et petites échelles constitue l'aspect hybride de la méthode. Dans ce travail, les équations continues de Navier-Stokes et de l'énergie, utilisées dans le cœur de l'écoulement, ont été couplées à différentes simulations locales par dynamique moléculaire pour représenter avec précision les interactions entre le fluide et les atomes du mur constituant les parois de la conduite.

L'objectif de ce papier est d'étendre la méthode hybride multi-échelle d'un écoulement incompressible à celui d'un écoulement de gaz compressible. Le contrôle de la masse volumique est alors nécessaire. Une approche permettant de l'imposer de l'échelle continue vers l'échelle moléculaire est discutée dans cette communication.

2. Méthodologie

La méthodologie présentée ici reprend les travaux antérieurs [1]. Seuls les principaux aspects sont brièvement rappelés.

Une conduite de section rectangulaire (hauteur $2H$ et envergure $l \gg 2H$), de longueur $L \gg l$ est considérée. Les parois internes sont recouvertes d'une fine épaisseur de platine et de l'argon, gazeux ou liquide, est injecté dans la section d'entrée. Une modélisation bi-dimensionnelle est adoptée au niveau macroscopique. La simulation se réduit alors à un canal de longueur L , limité en $z = 0$ par une paroi isotherme à T_w et un plan de symétrie en $z = H$.

2.1. Décomposition du domaine

La géométrie rectangulaire du canal est divisée en trois sous-domaines :

1. Dans le cœur du canal (C), région de longueur L et de hauteur H_C située au-dessus des lignes pointillées en Fig. 1(a), l'écoulement et les transferts de chaleur sont gouvernés par les équations de Navier-Stokes et de l'énergie.
2. Dans les régions atomistiques, M_i ($i = 1, \dots, 4$ en Fig. 1(a)), une modélisation par dynamique moléculaire classique est utilisée pour rendre compte des interactions à petite échelle entre le fluide et le mur. La figure 1(b) est un agrandissement de l'un des plots rectangulaires numérotés en Fig. 1(a).
3. Une zone de recouvrement de hauteur H_0 est conçue pour permettre les communications entre le domaine continu et les différents plots moléculaires. Cette zone est sous-divisée en 4 sous-couches : deux d'entre-elles garantissent les échanges entre les domaines continu et moléculaire. Une couche tampon assure la relaxation des valeurs échangées. Enfin, la couche de contrôle permet d'atténuer les effets de bord et, lorsque c'est nécessaire, de piloter la valeur de la masse volumique locale.

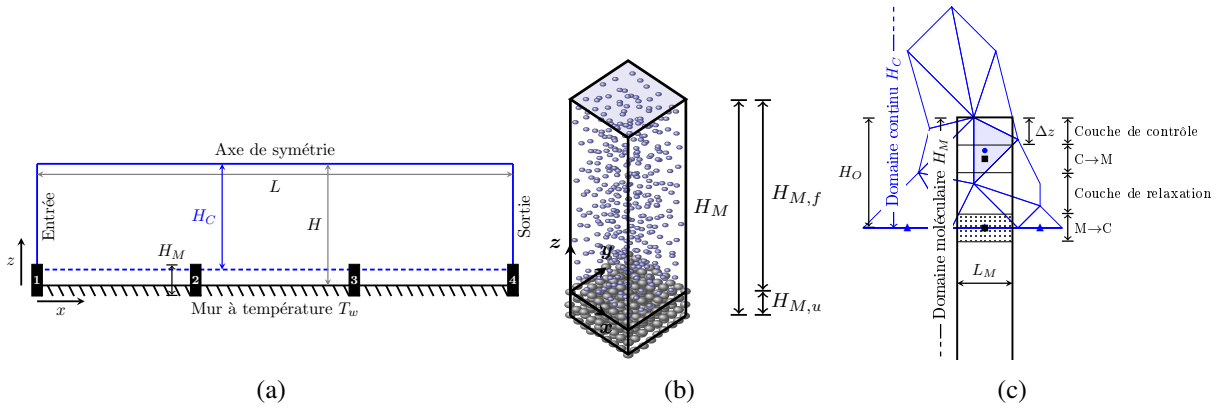


Figure 1 (a) : Croquis d'une conduite de hauteur H et de longueur L . La région fluide de hauteur H_C est gouvernée par les équations de Navier-Stokes et de l'énergie. Des descriptions atomistiques sont utilisées pour modéliser le mur et le fluide adjacent (plots rectangulaires numérotés et de hauteur H_M). (b) : plot de simulation moléculaire de hauteur H_M . (c) : Exemple de la zone de recouvrement garantissant la communication entre la région moléculaire et le domaine continu.

2.2. Approche moléculaire

Dans chaque plot moléculaire, le potentiel de Lennard-Jones est utilisé pour décrire les interactions binaires entre les atomes d'argon (fluide/fluide) et les atomes d'argon et de platine (fluide/paroi). Pour deux particules de type α et β distantes de r , le potentiel de paire $V_{\alpha\beta}(r)$ s'écrit :

$$V_{\alpha\beta}(r) = 4\varepsilon_{\alpha\beta} \left[\left(\frac{\sigma_{\alpha\beta}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{\alpha\beta}}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

où les indices $\alpha\beta$ désignent les interactions fluide/fluide ($\alpha\beta := ff$) ou fluide/solide ($\alpha\beta := fw$). Les paramètres $\varepsilon_{\alpha\beta}$ et $\sigma_{\alpha\beta}$ représentent la profondeur du puits de potentiel et le diamètre moyen des particules, respectivement. En utilisant l'argon comme élément de référence, les paramètres des couples Ar/Ar, Ar/Pt et leurs masses atomiques m_f et m_w peuvent s'exprimer dans les unités réduites de Lennard-Jones : $\varepsilon_{ff} = \bar{\varepsilon}$, $\sigma_{ff} = \bar{\sigma}$, $m_f = \bar{m}$, $\varepsilon_{wf} = 0,535\bar{\varepsilon}$, $\sigma_{wf} = 0,906\bar{\sigma}$, $m_w = 4,8833\bar{m}$ avec $\varepsilon = 1,656 \times 10^{-21}$ J, $\sigma = 3,405$ Å et $\bar{m} = 6,633 \times 10^{-26}$ kg. Les échelles de temps, de température et de vitesse sont $\tau = \sqrt{\bar{m}\sigma^2/\varepsilon} = 2,155 \times 10^{-12}$

s, $\varepsilon/k_B = 120$ K et $\sqrt{\varepsilon/\bar{m}} = 158,03$ m/s, respectivement. Avec ces grandeurs de référence, la masse volumique, la pression, la viscosité, la conductivité et la chaleur spécifique ont pour dimensions \bar{m}/σ^3 , ε/σ^3 , $\sqrt{\bar{m}\varepsilon}/\sigma^2$, $k_B\sqrt{\bar{m}\varepsilon}/\sigma^2$ et k_B/\bar{m} , respectivement. Dans la suite, toutes les variables ou paramètres seront, sauf précision contraire, présentés sans unité.

La paroi solide est modélisée par 3 couches d'atomes de platine organisées avec un réseau cristallin FCC(111), de densité $\rho_w = 12,76\bar{\rho}$. Chaque atome de platine est relié à ses plus proches voisins par un ressort de raideur $k = 3249,1\bar{\varepsilon}/\bar{\sigma}^2$ qui engendre un potentiel harmonique $V_{ww}(r) = kr^2/2$. La température du mur est contrôlée à T_w .

Avec le potentiel et les positions $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ d'un ensemble de N particules ponctuelles, on peut déterminer la force \mathbf{F}_i appliquée sur un atome i puis son accélération $\ddot{\mathbf{r}}_i$ à l'aide de l'équation de Newton :

$$m_i\ddot{\mathbf{r}}_i(t) = \mathbf{F}_i(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} V_{tot}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (2)$$

où V_{tot} désigne toutes les interactions possibles (ex. fluide/fluide, fluide/solide ou solide/solide). Une force de type volumique \mathbf{F}_{ext} est également appliquée aux particules fluides pour modéliser la contribution de pression provenant du domaine continu.

L'intégration temporelle des équations du mouvement est réalisée par l'algorithme Verlet-Vitesse et avec un pas de temps microscopique $\delta t = 5 \times 10^{-3} \bar{\tau}$. D'un point de vue pratique, il est inutile de traiter toutes les interactions : seuls les couples de particules distantes d'une longueur inférieure à $2,5\bar{\sigma}$ interviennent dans le calcul de V_{tot} .

Les conditions aux limites sont périodiques dans les directions horizontales x et y ce qui implique que le flux moyen de masse à travers une section horizontale est nul. Le contrôle de la température de la paroi solide à T_w est effectué via un thermostat de Langevin.

Dans la sous-couche C→M de la zone de recouvrement, la dynamique des particules fluides doit être contrainte de sorte à ce que la vitesse moyenne $\langle \dot{\mathbf{r}} \rangle(z)$ et la température $\langle \bar{m}[\dot{\mathbf{r}}(z) - \langle \dot{\mathbf{r}} \rangle(z)]^2 \rangle / 3k_B$ soient les mêmes que les profils linéaires instantanés reconstruits à partir de la vitesse macroscopique $\mathbf{u}_{C \rightarrow M}(z)$ et de la température $T_{C \rightarrow M}(z)$ issues des équations continues.

Dans un premier temps, une méthode de dynamique sous contrainte est utilisée pour les molécules de la zone C→M de sorte à imposer un profil de vitesse macroscopique :

$$m_f\ddot{\mathbf{r}}_i^* = \mathbf{F}_i(t) - \langle \mathbf{F}(t) \rangle + \xi \frac{m_f}{\delta t} (\mathbf{u}_{C \rightarrow M}(z) - \langle \dot{\mathbf{r}}(t) \rangle(z)) \quad (3)$$

où $\langle \phi \rangle$ désigne la valeur moyenne de la variable ϕ et $\langle \phi \rangle(z)$ se réfère à la variation de $\langle \phi \rangle$ par rapport à l'ordonnée z [1]. L'accélération intermédiaire calculée $\ddot{\mathbf{r}}_i^*$ est ensuite corrigée par l'utilisation d'un thermostat de Langevin pour contrôler la température :

$$m_f\ddot{\mathbf{r}}_i(t) = m_f\ddot{\mathbf{r}}_i^*(t) - m_f\alpha (\dot{\mathbf{r}}_i(t) - \langle \dot{\mathbf{r}}(t) \rangle(z)) + \mathbf{R}_i(T_{C \rightarrow M}) \quad (4)$$

où $\mathbf{R}_i(T_{C \rightarrow M})$ est une source aléatoire gaussienne de moyenne nulle et d'écart type basé sur la température $T_{C \rightarrow M}$. Les paramètres intervenants dans les Eqs. (3) et (4) sont $\alpha = 1\bar{\tau}^{-1}$ et $\xi = 2 \times 10^{-2}$ pour une phase liquide ou $\xi = 5 \times 10^{-3}$ pour une phase gazeuse.

Le schéma de couplage hybride est basé sur l'échange des variables primaires \mathbf{u} , T ainsi que de la masse volumique ρ . Pour le couplage de moléculaire (M) vers continu (C), les composantes macroscopiques $\mathbf{u}_{M \rightarrow C} = \langle \dot{\mathbf{r}} \rangle$ et $T_{M \rightarrow C} = \langle \bar{m} [\dot{\mathbf{r}} - \mathbf{u}_{M \rightarrow C}]^2 \rangle / 3k_B$ sont calculées dans

la couche M→C. L'imposition des valeurs au niveau de la frontière du domaine continu est détaillée dans la section suivante. Par construction, ce schéma de couplage assure la continuité des variables primaires. La continuité des flux est également assurée pour peu que les coefficients de transport soient identiques dans la zone de recouvrement. De plus, la masse volumique du domaine continu doit également être compatible avec celle du domaine moléculaire. Pour cela, une méthode de contrôle de la masse volumique est développée.

2.3. Approche continue

Dans le domaine continu, les équations de Navier-Stokes et de l'énergie [3] sont utilisées et couplées à une équation d'état $f_{\text{eos}}(p, \rho, T) = 0$ qui lie les champs de masse volumique, de pression et de température :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \end{array} \right. \quad (5a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau} \end{array} \right. \quad (5b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} c_p \left(\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} T) \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla p \right) + \bar{\tau} : \nabla \mathbf{u} \end{array} \right. \quad (5c)$$

où $\mathbf{u} = u\mathbf{e}_x + w\mathbf{e}_z$, p et T sont respectivement les champs de vitesse à deux dimensions, de pression et de température; $\bar{\tau}$ est le tenseur des contraintes visqueuses; ρ , μ , λ et c_p sont respectivement la masse volumique, la viscosité dynamique, la conductivité thermique et la chaleur spécifique du fluide. L'équation d'état est issue de [4]. Les auteurs fournissent une loi analytique obtenue à partir de simulations de dynamique moléculaire d'un fluide de Lennard-Jones. Elle donne une expression analytique qui dépend de la masse volumique, de la température et du facteur de compressibilité Z utilisé dans la relation suivante : $f_{\text{eos}} \stackrel{\text{def}}{=} p - Z(\rho, T)\rho\mathcal{R}T$ avec \mathcal{R} est la constante spécifique des gaz parfaits. Pour un fluide de Lennard-Jones, les coefficients μ et λ sont des fonctions de ρ et de T obtenues à partir des corrélations issues de [5] et [6], respectivement. Les chaleurs spécifiques à pression constante c_p et à volume constant c_v sont données par les lois de thermodynamique classique.

Une condition de symétrie est utilisée en $z = H$. En sortie l'écoulement est supposé établi et la pression p_{out} est connue. Le fluide entre à la température T_{in} avec avec une pression $p_{\text{in}} > p_{\text{out}}$. Au niveau de l'interface avec les domaines moléculaires, la condition à la limite est reconstruite de la façon suivante :

$$z = z_{M \rightarrow C}, \quad \mathbf{u}(x) = u_{M \rightarrow C}^{\text{macro}}(x)\mathbf{e}_x, \quad T(x) = T_{M \rightarrow C}^{\text{macro}}(x)$$

où $z_{M \rightarrow C}$ désigne l'ordonnée de la frontière inférieure du domaine continu et coïncide avec l'ordonnée du centre de la sous-couche M→C du domaine moléculaire. Les fonctions $u_{M \rightarrow C}^{\text{macro}}(x)$ et $T_{M \rightarrow C}^{\text{macro}}(x)$ sont linéaires par morceaux. En définissant $u_{M_i \rightarrow C}^{\text{macro}}$ la valeur moyenne des vitesses des particules dans la sous-couche $M_i \rightarrow C$ du $i^{\text{ème}}$ plot moléculaire M_i , la vitesse macroscopique s'écrit

$$u_{M \rightarrow C}^{\text{macro}}(x) = \sum_{i=1}^{n_b-1} \left(u_{M_i \rightarrow C}^{\text{macro}} + \frac{u_{M_{i+1} \rightarrow C}^{\text{macro}} - u_{M_i \rightarrow C}^{\text{macro}}}{x_{M_{i+1} \rightarrow C} - x_{M_i \rightarrow C}} (x - x_{M_i \rightarrow C}) \right) \times \mathcal{H}(x, x_{M_{i+1} \rightarrow C}, x_{M_i \rightarrow C})$$

avec $x_{M_i \rightarrow C}$ l'abscisse du centre de la sous-couche $M_i \rightarrow C$ du $i^{\text{ème}}$ plot moléculaire M_i , $\mathcal{H}(x, a, b) = H(a - x) \times H(x - b)$ où $H(x)$ est la fonction de Heaviside, et n_b le nombre total de plots. La même démarche est suivie pour exprimer le profil de température $T_{M \rightarrow C}^{\text{macro}}(x)$, ce qui permet de construire des conditions continues à la limite en $z = z_{M \rightarrow C}$.

Les solutions des équations de Navier-Stokes et de l'énergie (5) sont approximées par une méthode de Volumes Finis utilisant des variables co-localisées et des maillages non-structurés [7]. L'algorithme est du second ordre en espace. Les équations non-linéaires, couplant implicitement l'ensemble des variables, sont résolues par un algorithme de Newton-Raphson.

3. Résultats

3.1. Contrôle de masse volumique

L'algorithme de contrôle de la masse volumique est présenté et illustré sur un problème de condensation. Dans ce travail, nous supposons uniquement un couplage de la masse volumique du domaine continu vers le domaine moléculaire. Cette hypothèse est justifiée par exemple dans des micro ou nano-conduites pour lesquelles le champ de la masse volumique résulte principalement des conditions aux limites d'entrée et de sortie qui sont appliquées pour créer le mouvement à grande échelle.

Le transfert d'informations du domaine continu au moléculaire se fait dans la couche C→M pour les variables \mathbf{u} et T . Afin de contrôler la masse volumique, on modifie localement le nombre de molécules. Il est donc essentiel que l'insertion et le retrait de particules préservent les valeurs moyennes de la vitesse et de la température imposées depuis le domaine continu. Cette condition est difficile à respecter en utilisant à la fois la dynamique sous contrainte (Eq. (3)) et le thermostat (Eq. (4)), puisque toutes les particules insérées ou retirées perturbent sensiblement les équilibres locaux. L'approche adoptée dans ce travail est alors de piloter le nombre des particules, non pas dans la sous-couche C→M, mais dans la couche de contrôle. L'algorithme général est divisé en deux étapes : une évaluation locale de la masse volumique moyenne sur n pas de temps microscopique(s), suivi d'une insertion ou d'un retrait instantané de particules dans la couche de contrôle. Cela peut être exprimé de la façon suivante :

1. la masse volumique moyenne $\langle \rho \rangle_{\nu, n}$ dans la sous-couche ν du domaine moléculaire est calculée sur l'intervalle de temps $[t - n \times \delta t; t[$;
2. à l'instant t , la différence entre $\langle \rho \rangle_{\nu, n}$ et la masse volumique désirée ρ_{target} est convertie en un nombre d'atomes $|N|$ tel que $N = \text{int}[(\rho_{target} - \langle \rho \rangle_{\nu, n})\nu]$, où $\text{int}(x)$ retourne la valeur entière la plus proche du réel x . En fonction de la valeur algébrique N , $|N|$ atomes sont insérés ($N > 0$) ou retirés ($N < 0$) dans la couche de contrôle.

Le calcul de $\langle \rho \rangle_{\nu, n}$ est assez simple : la moyenne est effectuée sur l'espace ν et le nombre d'itérations n . Deux sous-couches ν ont été testées pour évaluer la masse volumique : la sous-couche C→M, où les valeurs de la vitesse horizontale et de température sont contrôlées, et la couche de contrôle.

L'insertion de particules ($N > 0$) repose sur l'algorithme USHER [8]. Si $N < 0$, les N particules les plus proches de la limite supérieure du domaine moléculaire sont simplement désactivées.

Le problème de condensation est maintenant examiné. Les paramètres de simulation sont les suivants : la hauteur du domaine moléculaire est $H_{M,f} = 139, 21$, la masse volumique est $\rho_{init} = \rho_{target} = 0, 05$, ce qui correspond à un fluide en phase gazeuse, et la température est $T_{init} = T_w = 1, 1$. Le gradient de pression choisi est $\partial_x p = -3, 11 \times 10^{-6}$, la vitesse horizontale et la température dans la sous-couche C→M sont respectivement maintenues à $u_{C \rightarrow M} = 0, 8$ et $T_{C \rightarrow M} = 1, 12$. Après le processus d'initialisation du système, la température du mur est portée à $T_{C \rightarrow M} = 0, 925$ et l'état stationnaire est recherché.

La figure 2 présente les profils de la masse volumique dans le domaine moléculaire pour l'algorithme de contrôle appliqué chaque pour $n = 1, 10, 100, 1000$ et 10000 itérations. Quand

l'évaluation et le contrôle de la masse volumique sont effectués dans la zone de contrôle (voir Fig. 2(a)), la position de l'interface évolue significativement avec le paramètre n contrôlant la fréquence de mise à jour de la masse volumique.

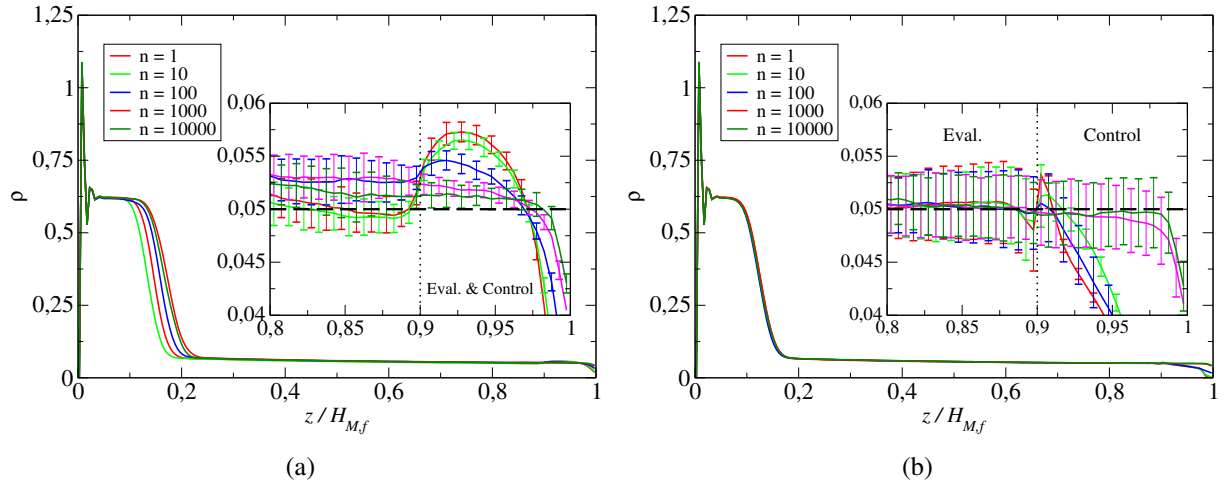


Figure 2 Problème de condensation. Les profils de masse volumique dans le domaine moléculaire, pour l'algorithme d'insertion/retrait appliqué toutes les n itération(s). La masse volumique ciblée ρ_{target} est indiquée par la ligne discontinue. (a) : L'évaluation et le contrôle de la masse volumique sont faits dans la couche de contrôle. (b) : L'évaluation de la masse volumique a lieu dans la sous-couche $C \rightarrow M$ tandis que la gestion de la masse volumique est toujours réalisée dans la zone de contrôle.

Bien que la masse volumique du gaz loin de la paroi semble être insensible à n , un examen approfondi de son comportement dans la sous-couche $C \rightarrow M$ montre que le profil est en fait ni uniforme, ni réellement contrôlé à la valeur désirée ρ_{target} (ligne horizontale discontinue). Ainsi, la difficulté du contrôle local de la masse volumique dans une région de l'écoulement peut avoir des conséquences plus globales, comme ici sur la position de l'interface gaz/liquide. Ces aspects peuvent être expliqués par la stratification parasite de la masse volumique qui se développe près de la frontière fictive supérieure de la couche de contrôle. Il en résulte un gradient de densité significatif ainsi qu'une mauvaise estimation de la masse volumique à $z/H_{M,f} = 0,9$, ce qui correspond à l'interface entre la couche de contrôle et la couche $C \rightarrow M$ où sont imposées les contraintes dynamique et thermique. Même si la dispersion de la masse volumique dans la couche $C \rightarrow M$ est petite ($\leq 1,4\%$), l'écart relatif entre $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$ et ρ_{target} varie de façon non monotone de $-0,4\%$ à environ 6% en fonction de n .

Lorsque l'évaluation de la masse volumique n'est plus effectuée dans la couche de contrôle, mais dans la couche $C \rightarrow M$ ($\nu = C \rightarrow M$), les résultats semblent être beaucoup plus satisfaisants (Fig. 2(b)). Dans ce cas, le profil de masse volumique $\rho(z)$ est à peu près uniforme dans la couche ν et il est bien contrôlé à la valeur désirée ρ_{target} , quelle que soit la valeur de n . La position et l'épaisseur de l'interface gaz/liquide ne dépendent presque pas de la période n et la masse volumique s'écarte de moins de $0,7\%$ par rapport à la valeur ciblée ρ_{target} .

Il convient de noter que, quand l'évaluation et le contrôle de la masse volumique ont lieu dans des couches séparées, l'insertion ou le retrait des particules n'influence pas immédiatement la valeur de la masse volumique $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$. En effet, il existe un temps de retard t_D qui correspond au temps nécessaire pour diffuser les informations de la couche de contrôle vers la couche d'évaluation.

Ce temps pourrait être lié au coefficient d'auto-diffusion D du fluide et à l'échelle de longueur de la couche de contrôle Δz . En supposant que les particules sont insérées à une dis-

tance moyenne $\Delta z/2$ à partir de la couche $C \rightarrow M$, une approximation du temps de retard est $t_D = (\Delta z)^2/(4D)$. Sachant que $\Delta z = 13,9$ et $D = 2,5425$ (pour un fluide Lennard-Jones à $\rho = 0,055$ et $T = 1$) [9], on obtient $t_D \simeq 19$ ou $n_D = t_D/\Delta t \simeq 3800$ itérations temporelles dans le domaine microscopique. Si $n \ll n_D$, l'inhomogénéité et les changements abrupts dans le profil de masse volumique (Fig. 2(b)) sont dus au fait qu'une modification soudaine du nombre de particules n'a pas le temps de diffuser de la zone de contrôle vers la couche $C \rightarrow M$. Malgré ces profils de masse volumique perturbés dans la couche de contrôle, la valeur moyenne $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$ reste très proche de ρ_{target} et les fluctuations relatives sont négligeables : $\sigma_{\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}} / \langle \rho \rangle_{C \rightarrow M} \leq 1,3\%$.

Nous trouvons que seul l'algorithme utilisant des couches séparées pour l'évaluation et le contrôle de la masse volumique est réellement efficace pour piloter la masse volumique dans la couche $C \rightarrow M$. Les solutions obtenues sont alors peu sensibles à la période n entre deux mises à jour successives de la masse volumique. De plus, une bonne valeur indicative de la limite inférieure de n peut être donnée par un raisonnement simple basé sur le temps de diffusion construit avec le coefficient d'auto-diffusion du fluide.

3.2. Écoulement compressible

La méthode est maintenant utilisée dans le cadre d'un écoulement dans un micro-canal de grande longueur. Afin d'avoir un temps de calcul raisonnable, le nombre de plots moléculaires est fixé à 8. Leurs positions sont obtenues grâce à un modèle analytique [1].

Un écoulement de fluide compressible dans un canal de hauteur $H = 203,42$ et de longueur $L = 200H$ est considéré. La température du mur est choisie à $T_w = 1,5$. Le fluide entre en phase gazeuse à la même température que le mur $T_{in} = T_w$ et à la masse volumique $\rho = 0,3$, ce qui conduit à la pression $p_{in} = 0,22$. Le rapport des pressions entre les sections d'entrée et de sortie est $p_{in}/p_{out} = 2$. Le nombre d'atomes d'argon dans le premier plot moléculaire est $N = 3312$, ce qui correspond à la masse volumique dans la section d'entrée. Le rapport $H_C/H_{M,f}$ est de 3.

La figure 3 présente les profils de vitesse, de température et de masse volumique pour les

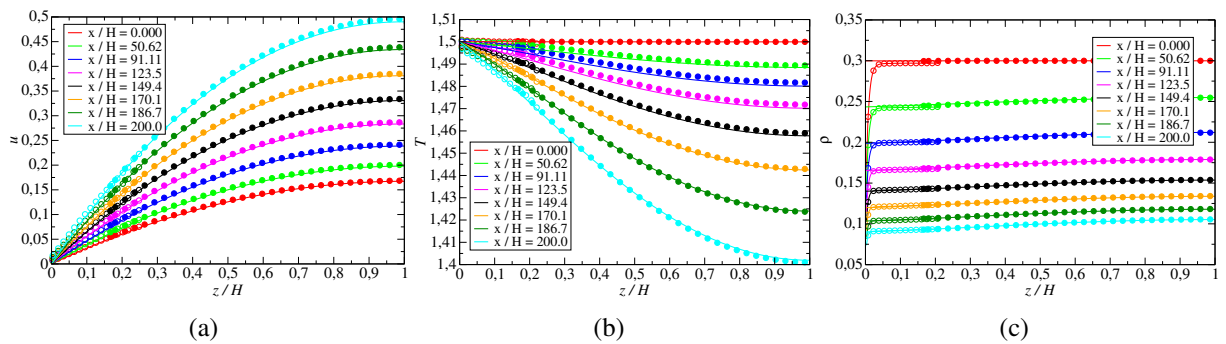


Figure 3 Profils de vitesse (a), de température (b) et de masse volumique (c) dans les sections positionnées aux abscisses x_i des 8 plots.

différentes abscisses des plots, pour la solution hybride multi-échelle et la solution purement continue calculée dans l'ensemble du domaine fluide. La continuité entre la solution moléculaire (symboles creux) et la solution continue hybride (symboles pleins) dans la zone de recouvrement est satisfaisante. La comparaison entre la solution hybride multi-échelle (symboles) et celle complètement continue (lignes continues) présente également un bon accord.

L'analyse de la solution hybride moléculaire et multi-échelle indique que le glissement de

vitesse (Fig. 3(a)) et le saut de température (Fig. 3(b)) sont petits, inférieurs à 2,5%. Comme prévu pour des écoulements de fluides compressibles, l'écoulement est modérément refroidi de la section d'entrée à la sortie de la conduite, d'environ 6,6% de T_w (Fig. 3(b)). Pour les écoulements compressibles dans les micro-/nano-conduites, deux contributions s'opposent dans le bilan thermique (Eq. (5c)) : d'une part le terme de production de chaleur lié à la dissipation des frottements visqueux $[\bar{\tau} : \nabla \mathbf{u}]$ et d'autre part le travail des forces de pression $[-(\partial \ln \rho)/(\partial \ln T) \mathbf{u} \cdot \nabla p]$ qui prélève une partie de l'énergie. Dans le cas de micro-conduites la contribution de pression est généralement d'intensité plus importante que le terme de dissipation visqueuse : la température décroît en s'éloignant de la section d'entrée (Fig. 3(b)). La dissipation visqueuse participe principalement au chauffage au voisinage des parois (gradients importants) alors que l'effet endothermique du travail des forces de pression est plutôt localisé au centre de la conduite (la vitesse y est plus grande). Il résulte un léger gradient de masse volumique des parois vers le milieu du canal (Fig. 3(c)).

La baisse importante de la masse volumique est provoquée par les valeurs imposées des pressions, p_{in} et p_{out} , dans les sections d'entrée et de sortie (Fig. 3(c)). Il est intéressant de constater que le rapport de 3, entre les masses volumiques à l'entrée et la sortie de la conduite, est plus grand que la valeur attendue $p_{in}/p_{out} = 2$ que nous aurions eu pour un modèle de gaz parfait isotherme ; la prise en compte de la décroissance de la température viendrait encore réduire ce rapport. Les effets correctifs à la loi des gaz parfaits sont donc non négligeables dans la loi d'état d'un gaz de Lennard-Jones. Enfin, l'augmentation de la vitesse le long de la conduite (Fig. 3(a)) est bien proportionnelle à la diminution de la masse volumique comme la conservation du débit massique l'impose.

4. Conclusion

La modélisation hybride multi-échelle a été enrichie d'un algorithme de contrôle de la masse volumique afin traiter des écoulements de gaz compressibles dans des micro conduites de grande extension. Le contrôle proposé permet de piloter la masse volumique du macroscopique vers le microscopique. Une rétroaction vers le macroscopique doit cependant être envisagée dans l'optique de traiter des configurations où pression et température ne sont pas constantes sur une section.

Références

- [1] V.-H. Vu, B. Trouette, Q.-D. To, E. Chénier, Multi-scale modelling and Hybrid atomistic-continuum simulation of non-isothermal flows in microchannel. *Microfluid Nanofluid*, (2016)
- [2] V.-H. Vu, B. Trouette, Q.-D. To, E. Chénier, Approche multi-échelle pour l'étude de la condensation dans des micro-conduites. *Congrès français de thermique 2016*, (2016)
- [3] R.B. Bird, W.E. Stewart, E.N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons, Inc. 2nd edition (2006).
- [4] J. Kolafa, I. Nezbeda, The Lennard-Jones fluid : An accurate analytic and theoretically-based equation of state, *Fluid Phase Equilib.*, 100 (1994)
- [5] G. Galliéro, C. Boned, A. Baylaucq, Molecular dynamics study of the Lennard-Jones fluid viscosity : Application to real fluids, *Ind. Eng. Chem. Res.*, (2005)
- [6] M. Bugel, G. Galliéro, Thermal conductivity of the Lennard-Jones fluid : an empirical correlation *Int. Chem. Phys.*, (2008)
- [7] E. Chénier, R. Eymard, O. Touazi, Numerical results using a colocated finite-volume scheme on unstructured grids for incompressible fluid flows. *Numer. Heat Tr. B-Fund* 49(3), (2006)
- [8] R. Delgado-Buscalioni, P.V. Coveney, Continuum-particle hybrid coupling for mass, momentum, and energy transfers in unsteady fluid flow. *Phys. Rev. E* 67, (2003)
- [9] K. Meier, Computer Simulation and Interpretation of the Transport Coefficients of the Lennard-Jones Model Fluid, *PhD thesis, University of the Federal Armed Forces, Hamburg, Germany*, (2002)