

# Modélisation multi-échelle dans des micro-conduites

Van Huyen VU, Benoît TROUETTE\*, Quy-Dong TO, Éric CHÉNIER

Laboratoire MSME, UMR 8208 CNRS, Université Paris-Est Marne-la-Vallée, 77454 Marne-la-Vallée cedex 2, France

\*(auteur correspondant : benoit.trouette@u-pem.fr)

**Résumé** - Les transferts aux interfaces jouent un rôle déterminant dans de très nombreux problèmes physiques. A l'échelle macroscopique, l'interface est vue comme la limite entre deux milieux dont les propriétés sont différentes. Classiquement, les conditions de raccord entre ces milieux sont assurées par des relations de continuité ou de saut des variables primaires (vitesse, température...) ou secondaires (contraintes, flux de chaleur...). Lorsque les dimensions caractéristiques du problème deviennent très petites, ces conditions interfaciales classiques doivent être modifiées pour tenir compte des phénomènes physiques qui sont négligeables à plus grande échelle. Dans le cas d'un écoulement dans un micro ou nano système, l'interface définie entre les molécules du fluide et les atomes du solide doit être finement modélisée. Des modèles macroscopiques des interactions du fluide avec une paroi existent dans la littérature, par exemple par l'introduction des phénomènes de glissement dynamique, de glissement thermique et de pompage thermique. Cependant, ils dépendent toujours de paramètres physiques liés aux petites échelles et qu'il faut identifier dans chaque situation physique. De plus, ces approches ne modélisent qu'une partie de la complexité des transferts qui a lieu entre les atomes du solide et les molécules du gaz.

Dans ce travail, on s'intéresse à l'interaction d'un fluide avec une paroi solide. Nous cherchons à mettre en œuvre une description multi-échelle adaptée aux écoulements de fluides dans des micro et nano-conduites. Dans le cœur de l'écoulement, les équations de Navier-Stokes et de l'énergie sont résolues (NS), tandis que, localement et au voisinage des parois, une approche par la dynamique moléculaire (DM) est adoptée. Un aperçu de la configuration est présenté en figure 1. Un code de calcul permettant l'interaction entre un code de dynamique moléculaire et un code de résolution des équations de Navier-Stokes et de l'énergie est développé sur des machines parallèles. Cette approche couplée hybride permet d'envisager de traiter des conduites de grande longueur tout en simulant finement les transferts à la paroi. Le couplage est réalisé par un échange d'informations assurant la continuité des flux de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Après avoir validé le couplage DM/NS sur des solutions analytiques instationnaires, la faisabilité de notre méthode de couplage pour des systèmes de grande extension sera illustrée par des simulations hybrides de l'établissement dynamique et thermique dans un micro-canal.

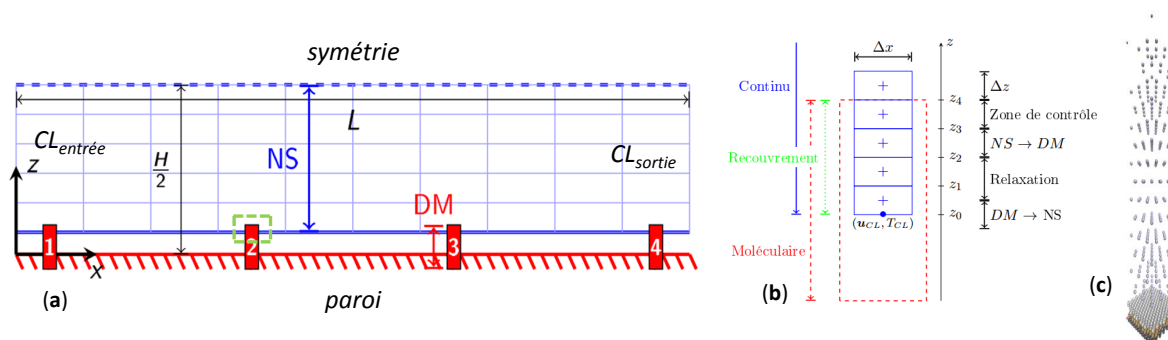


Figure 1 Schématisation de la méthode hybride multi-échelle dans une micro-conduite. (a) micro-conduite avec la discrétisation du voisinage de la paroi en "plots" dans lesquels sont effectuées des simulations moléculaires (c). Le cœur de la conduite est modélisé de façon continue. Les deux approches cohabitent et échangent des informations via une zone de recouvrement (b).

## Nomenclature

DM	Dynamique Moléculaire	$T$	température
NS	Navier–Stokes (et équation de l'énergie)	$\mathbf{u}$	vecteurs vitesse macroscopique
<i>Symboles romains</i>			
$c_v$	capacité thermique à volume constant	$u, w$	composantes de la vitesse macroscopique
$D_h$	diamètre hydraulique	$V$	énergie potentielle
$\mathbf{F}$	vecteur force	<i>Symboles grecs</i>	
$H$	hauteur	$\alpha$	constante de relaxation
$k_B$	constante de Boltzmann	$\delta t$	pas de temps DM
$L$	longueur	$\Delta t$	pas de temps NS
$m$	masse	$\lambda$	conductivité thermique
$N$	nombre de molécules	$\mu$	viscosité dynamique
$n_p$	nombre de processeurs	$\rho$	masse volumique
$p$	pression	$\sigma$	distance intermoléculaire
$\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, \ddot{\mathbf{r}}$	vecteurs position, vitesse et accélération	$\tau$	échelle de temps
$Re$	nombre de Reynolds	$\varepsilon$	énergie
$r_p$	raison	<i>Indices et exposants</i>	
		$i (j)$	quantité relative a la particule $i (j)$

## 1. Introduction

Dans le but de combiner les avantages de différents niveaux de modélisation, des approches couplées multi-échelles, combinant des descriptions macroscopique et microscopique, ont été développées pour simuler des écoulements fluides dans des micro systèmes. Pour traiter le couplage entre la méthode de Dynamique Moléculaire (DM) [1] et les équations de Navier-Stokes incompressibles et de l'énergie (NS), une méthode d'échange des variables primaires (vitesse et température) a été proposée afin d'assurer la continuité des variables et des flux entre les deux approches [2, 3, 4]. En se basant sur les travaux présentés dans [4], nous développons une méthode hybride DM/NS pour simuler les écoulements et les transferts dans des conduites de grand rapport de forme.

## 2. Méthode et Modélisation

Une méthode hybride couplant des approches microscopique et macroscopique est réalisée afin de traiter les écoulements de fluides dans des micro-conduites 2D de longueur  $L$  et hauteur  $H \ll L$  (cf. figure 1). Par symétrie, le domaine simulé est ramené à une demi conduite de hauteur  $H/2$  (cf. figure 1(a)). Dans la section d'entrée, le fluide pénètre à la température  $T_e$  connue avec un profil uniforme de vitesse ou un écart de pression uniforme à la pression de sortie. Dans la section de sortie, l'écoulement sera toujours supposé établi. Les parois sont fixes et isothermes à  $T_p$  qui peut être différent de  $T_e$ .

### 2.1. Décomposition de domaine

Bien que la dynamique moléculaire soit utilisée uniquement au voisinage des parois, la grande longueur de la conduite rend actuellement une telle simulation prohibitive en terme de coût de calcul. Pour palier à cette difficulté, la résolution fine à petite échelle est restreinte à des sous-domaines discrets de faible extension, appelés "plots" et numérotés de 1 à 4 sur la figure 1(a). Chacun de ces plots abrite une modélisation par dynamique moléculaire permettant de simuler l'interaction du fluide, ici de l'argon, avec la paroi (figure 1(c)). Cette dernière est modélisée par des atomes de platine organisés selon une structure cristalline cubique à face centrée. La distance  $d_i$  entre les plots  $i$  et  $i + 1$  suit une loi géométrique de raison  $r_p$  fixée. Les domaines moléculaires sont périodiques dans les directions transverses à l'écoulement, ce qui conduit à des transferts et à un couplage purement 1D.

Dans la zone centrale de l'écoulement, une description macroscopique est utilisée. La méthode hybride consiste à faire cohabiter les deux approches à l'aide d'une zone de recouvrement (figure 1(b)) afin d'assurer la continuité des variables et des flux. Pour se faire, cette zone est

divisée en quatre sous domaines dans la direction verticale. Les zones NS→DM et DM→NS permettent d'échanger les variables entre les deux approches. On choisira ici d'échanger les variables primaires : les composantes du vecteur vitesse et la température. La continuité des flux est assurée si les coefficients de transport sont égaux dans la zone de recouvrement. La zone de relaxation assure un découplage entre les régions de communication NS→DM et DM→NS, tandis que dans la zone de contrôle, une paroi supérieure fictive est introduite pour maintenir constant le nombre de molécules dans le domaine moléculaire, et donc la masse volumique.

## 2.2. Approches locales

### 2.2.1. Dynamique moléculaire (DM)

La simulation par la méthode de dynamique moléculaire est basée sur la mécanique newtonienne. Cette approche est détaillée dans [1] et permet d'obtenir les trajectoires d'un ensemble de  $N$  particules ponctuelles. Pour la molécule  $i$ , les lois de la dynamique de Newton mènent à :

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i \equiv - \sum_{j=1, j \neq i}^N \nabla_r V_{ij}(r_{ij}) \quad (1)$$

où  $r_{ij} = \|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i\|$ ,  $\nabla_r(\bullet) \equiv \partial_r(\bullet)(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)/r_{ij}$  et  $V_{ij}$  est le potentiel de paire de Lennard-Jones qui est utilisé pour décrire l'ensemble des interactions entre les particules fluide/fluide ou fluide/solide :

$$V_{ij}(r) = 4\varepsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right] \quad (2)$$

Les paramètres  $\varepsilon_{ij}$  et  $\sigma_{ij}$  sont respectivement l'intensité de l'interaction entre les particules  $i$  et  $j$  et la distance à laquelle ce potentiel est nul (diamètre atomique moyen). Au sein du mur, les interactions solide/solide sont modélisées par des atomes qui vibrent autour de leur position d'équilibre. L'intégration temporelle des équations du mouvement est réalisée avec l'algorithme Verlet-Vitesse. Dans la suite, les différentes échelles (temps, longueur,...) sont construites à partir des propriétés atomiques du fluide ainsi que de la constante de Boltzmann  $k_B$ . Pour l'argon, on a  $m = 6,633 \times 10^{-26}$  kg,  $\varepsilon = 1,656 \times 10^{-21}$  J et  $\sigma = 3,405$  Å. D'un point de vue pratique, il n'est pas envisageable de traiter toutes les interactions entre molécules. On choisit de tronquer le potentiel de Lennard-Jones au-delà du rayon de coupure  $r_c = 2,5 \sigma$ .

Le code de calcul est parallélisé avec la norme MPI. Chaque processus ( $n_p = 32$ ) effectue une simulation du problème avec une initialisation propre issue d'un tirage aléatoire. Cette technique permet d'augmenter artificiellement le nombre global de molécules ( $n_p$  échantillons de  $N$  molécules) et conduit à des grandeurs moyennées plus précises, principalement lors de problèmes stationnaires.

### 2.2.2. Équations de Navier-Stokes et de l'énergie (NS)

Dans la zone continue, l'écoulement est bi-dimensionnel et le fluide est décrit par les équations de Navier-Stokes incompressibles et l'équation de l'énergie avec prise en compte des termes de dissipation visqueuse :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T &= \frac{\lambda}{\rho c_v} \nabla^2 T + \frac{\mu}{\rho c_v} \left[ 2 \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \left( \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (3)$$

où,  $\rho$  la masse volumique,  $\mu$  la viscosité dynamique,  $\lambda$  la conductivité thermique et  $c_v$  la capacité calorifique à volume constant, sont des propriétés physiques constantes du fluide. Les inconnues discrètes sont le vecteur vitesse  $\mathbf{u} = ue_x + we_z$ , le champ de pression  $p$  et le champ de température  $T$ . Elles sont approchées par une méthode de Volumes-Finis collocalisés sur des maillages non structurés [5]. Le schéma de discrétisation garantit que les variables discrètes vérifient des bilans d'énergie similaires aux bilans continus.

Les conditions aux limites sur la frontière inférieure sont reconstruites à partir des grandeurs moyennées dans le domaine microscopique.

### 2.3. Conditions de couplage

Comme évoqué précédemment, les deux approches doivent échanger des informations qui, dans notre cas, sont les variables primaires vitesse et température. Dans le sens moléculaire vers continu (DM→NS), les conditions aux limites sur la frontière inférieure du domaine macroscopique sont reconstruites à partir d'une interpolation linéaire basée sur les calculs moléculaires dans chaque plot.

Dans le sens inverse (NS→DM), on contraint les valeurs des vitesses et de la température dans un sous volume du domaine moléculaire plutôt que sur une frontière (voir figure 1(b)). Pour la contribution dynamique, on utilise une méthode de dynamique sous contrainte [3] dans la zone d'échange pour imposer le vecteur vitesse  $\mathbf{u}_{\text{NS} \rightarrow \text{DM}}$  déterminé par l'approche macroscopique. La contribution supplémentaire s'ajoute aux forces issues des interactions de paires données par (1) :

$$\ddot{\mathbf{r}}_i(t) = \ddot{\mathbf{r}}_i^*(t) - \frac{1}{m_i N_{\text{NS} \rightarrow \text{DM}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{NS} \rightarrow \text{DM}}} \mathbf{F}_j + \frac{1}{\delta t} \left( \mathbf{u}_{\text{NS} \rightarrow \text{DM}} - \frac{1}{N_{\text{NS} \rightarrow \text{DM}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{NS} \rightarrow \text{DM}}} \dot{\mathbf{r}}_j(t) \right) \quad (4)$$

avec  $\ddot{\mathbf{r}}_i^*(t)$  l'accélération au temps  $t$  issue de l'équation (1),  $N_{\text{NS} \rightarrow \text{DM}}$  le nombre de molécules dans la cellule NS→DM et où  $\mathbf{F}_i$  est la force d'interaction de la particule  $i$  avec ses voisines (issue du potentiel de Lennard–Jones).

Pour contraindre le système à la température souhaitée, on utilise un thermostat de Langevin [4] qui modifie l'accélération donnée par l'équation (4) (notée également  $\ddot{\mathbf{r}}_i^*(t)$ ) via l'équation (5) :

$$\ddot{\mathbf{r}}_i(t) = \ddot{\mathbf{r}}_i^*(t) - \alpha \left( \dot{\mathbf{r}}_i(t) - \frac{1}{N_{\text{NS} \rightarrow \text{DM}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{NS} \rightarrow \text{DM}}} \dot{\mathbf{r}}_j(t) \right) + \frac{\mathbf{R}_i(t)}{m_i} \quad (5)$$

où  $\mathbf{R}_i(t)$  représente une force aléatoire, issue d'une gaussienne de moyenne nulle et d'écart type  $\sqrt{2\alpha m k_B T_{\text{NS} \rightarrow \text{DM}} / \delta t}$  avec  $T_{\text{NS} \rightarrow \text{DM}}$  la température vers laquelle le système doit être relaxé. La constante de relaxation pour le fluide est choisie telle que  $\alpha = 1,0 \tau^{-1}$  avec  $\tau = \sqrt{m\sigma^2/\varepsilon}$  (2, 15 ps) l'échelle de temps microscopique. Pour le solide,  $\alpha = 168 \tau^{-1}$  [4]. Le pas de temps microscopique est  $\delta t = 0,005 \tau$ . On peut noter que l'ordre d'imposition des contraintes dynamique et du thermostat n'importe pas.

Pour limiter les oscillations locales de la densité et de la température dans la zone de contrôle, dont l'origine est liée à la présence d'une paroi fictive (cf. fig. 1(b)), une force qui modélise l'interaction des molécules de la zone de contrôle avec un réservoir imaginaire est appliquée [6].

### 2.4. Couplage temporel

Pour un problème stationnaire, les échelles de temps continu et moléculaire sont totalement découplées. En revanche dans l'étude d'un écoulement instationnaire, les pas de temps des approches microscopique,  $\delta t$ , et macroscopique,  $\Delta t$ , doivent être synchronisés pour maintenir une correspondance des temps physiques :  $\Delta t = n\delta t$ , où  $n$  est le rapport des pas de temps. Plusieurs

schémas de couplage temporels sont référencés dans la littérature (voir [7]). Le schéma que nous avons utilisé est représenté sur la figure 2. Les intégrations temporelles microscopiques et macroscopiques sont décalées d'un demi pas de temps macroscopique. En considérant que toutes les variables sont connues aux instants discrets  $t \leq t^{n+1/2}$ , l'intégration temporelle en DM, de  $t^{n+1/2}$  à  $t^{n+3/2}$ , s'effectue à partir des conditions issues de NS à l'instant  $t^n$ . La résolution dans la zone NS utilise ensuite les conditions aux limites provenant des moyennes réalisées dans le domaine microscopique et centrées sur le temps  $t^{n+1}$ .

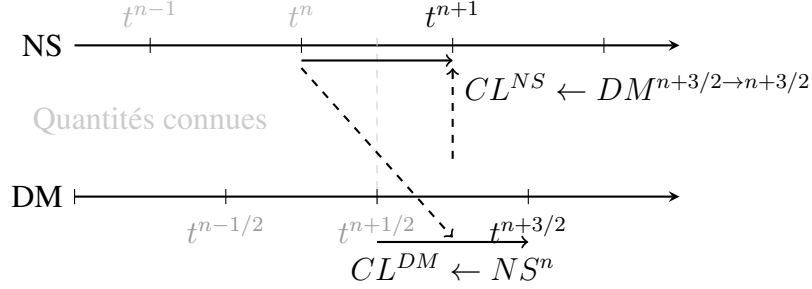


Figure 2 Schématisation du couplage temporel. Toutes les quantités grisées sont supposées connues. Durant l'intégration temporelle au niveau moléculaire entre  $t^{n+1/2}$  et  $t^{n+3/2}$ , la condition issue de NS à l'instant  $t^n$  est gardée constante dans la zone NS→DM (Fig. 1(b)). Les grandeurs moléculaires sont ensuite moyennées sur l'intervalle  $\Delta t$  afin de reconstruire la condition à la limite NS au temps  $t^{n+1}$ .

### 3. Résultats

#### 3.1. Validations

Avant d'étudier des micro-conduites, nous avons validé la méthode de couplage et son implémentation sur deux problèmes classiques 1D possédant des solutions analytiques : les problèmes instationnaires de Couette (partie dynamique) et de conduction thermique. La configuration diffère légèrement de celle présenté en figure 1(a) : la conduite est modélisée sur toute sa hauteur  $H$  et l'écoulement est établi dans la direction  $x$ .

Le fluide considéré est de l'argon liquide dont la masse volumique est  $\rho = 0,81 \text{ m}/\sigma^3$  ( $1360,8 \text{ kg}/\text{m}^3$ ) à la température  $T = 1 \varepsilon/k_B$  (120 K). Les deux sous domaines, moléculaire et continu, ont la même hauteur  $H_{\text{NS}} = H_{\text{DM}} = 32,18 \sigma$  ce qui conduit à une hauteur  $H = 51,49 \sigma$  (17,53 nm). Les dimensions transverses du domaine moléculaire sont  $L_{x,y} = 10,72 \sigma$ . Au total, la simulation DM possède environ 3000 molécules d'argon. Le domaine continu est discrétisé en 10 mailles dans la direction verticale ; les 4 mailles inférieures constituent la zone de recouvrement (cf. figure 1(b)). Le pas de temps microscopique est  $\delta t = 0,005 \tau$  et le pas de temps macroscopique est  $\Delta t = 150 \delta t$ .

Comme décrit précédemment les variables primaires sont échangées entre les deux approches. La continuité des flux est assurée à condition que les coefficients de transport ( $\mu$ ,  $\lambda$ ) correspondent dans la zone de recouvrement. Dans ce travail, les coefficients sont issus de corrélations qui sont des fonctions de  $\rho$  et  $T$  [8, 9]. Ils sont évalués à une température voisine de celle de la zone d'échange et supposés constants.

Nous traitons dans un premier temps le problème instationnaire de Couette 1D (périodique dans les directions  $x$  et  $y$ ). Après la mise à l'équilibre du système, la paroi supérieure (limite supérieure du domaine macroscopique) est animée d'une vitesse constante horizontale  $u_0 = 1 \sigma/\tau$ , tandis que la paroi inférieure (limite inférieure du domaine moléculaire) est maintenue immobile. Les données entre les deux approches sont échangées tous les  $\Delta t$  selon l'algorithme schématisé sur la figure 2. La figure 3(a) présente la vitesse normalisée par  $u_0$  en fonction de la hauteur  $z$  pour différents temps. La solution DM est représentée avec des symboles creux et les barres d'erreur donnent l'écart type de la moyenne spatio-temporelle sur l'ensemble des 32

échantillons. Les symboles pleins se réfèrent à la solution continue et les courbes représentent la solution analytique au cours du temps. L'écart entre les solutions numérique et analytique est faible (inférieur à 1% en norme  $L_2$ ) et pourrait être encore réduit en améliorant la qualité des moyennes dans la zone moléculaire. On vérifie que dans la zone de recouvrement  $z/H \in [0, 36; 0, 62]$  les solutions issues des deux modélisations se raccordent correctement.

Pour le problème de conduction thermique les deux parois sont immobiles et, après la mise à l'équilibre du système, la température de la paroi supérieure est portée à  $T_2 = 1,5 \varepsilon/k_B$  tandis que celle de la paroi inférieure reste à  $T_1 = 1 \varepsilon/k_B$ . Le profil de température au cours du temps est présenté en figure 3(b). Les remarques sont similaires à celles dressées pour le problème de Couette.

Ces deux cas ont permis de valider la méthode de couplage dans des cas simples pour lesquels les problèmes dynamique et thermique sont découplés. Nous allons maintenant utiliser cette méthode hybride pour traiter des conduites de grand allongement à l'aide de "plots" (voir Sec. 2.1.).

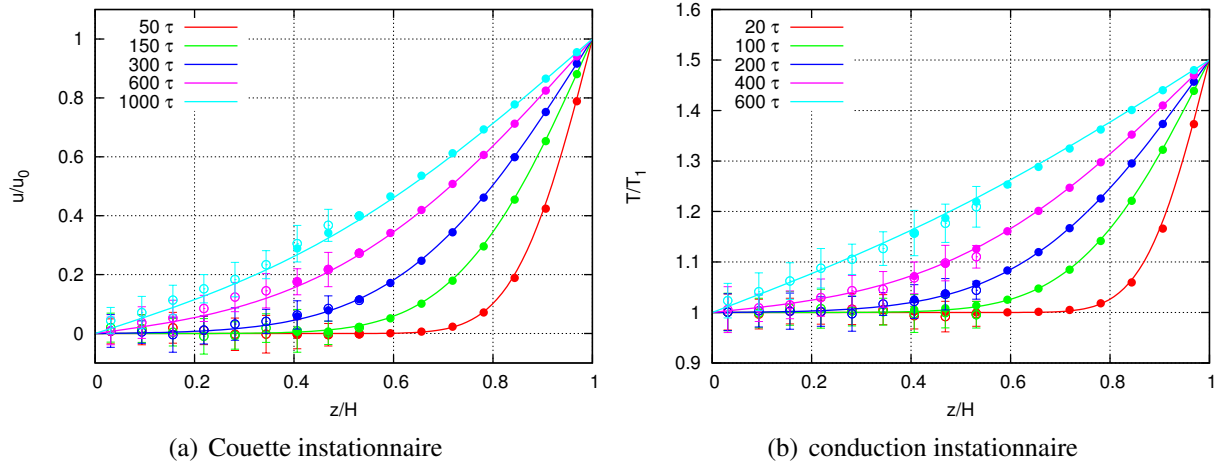


Figure 3 Profils de vitesse (a) et de température (b) à différents instants. Les lignes correspondent aux solutions analytiques, les symboles pleins aux solutions NS et les symboles creux aux solutions DM avec des barres d'erreur représentatives des écarts types par rapport à la moyenne des 32 échantillons.

### 3.2. Établissements dynamique et thermique dans des micro-conduites

La méthode hybride va maintenant être utilisée sur deux configurations en micro-conduite, c'est-à-dire pour des conduites de grande longueur. Dans une première étape, nous nous intéresserons à l'établissement dynamique d'un fluide entre deux plaques planes parallèles. Pour des parois non glissantes nous devons obtenir le profil de Poiseuille au-delà d'une longueur d'établissement que nous comparerons à une référence.

Le fluide est toujours de l'argon liquide,  $\rho = 0,81 m/\sigma^3$  à la température  $T_e = 1,1 \varepsilon/k_B$  (132 K) qui entre dans une conduite de hauteur  $H = 823,9 \sigma$  (280,5 nm), de longueur  $100 H$ , avec une vitesse constant et uniforme  $u_0 = 1 \sigma/\tau$  (158 m/s). Le nombre de Reynolds, basé sur le diamètre hydraulique, est  $Re_{D_h} = u_0 D_h/\nu = 1290$ . La paroi solide est modélisée par des atomes de platine dont la structuration à l'interface avec les molécules du fluide garantit l'adhérence (grande rugosité atomique). Cette paroi est thermostatée à la température  $T_p = T_e$ . Les coefficients  $\mu = 2,07 \sigma^2/\sqrt{m\varepsilon}$ ,  $\lambda = 6,83 \sigma^2 \sqrt{m/\varepsilon}/k_B$  et  $c_v = 2,19 \sigma^2/k_B$  sont supposés constants et toujours issus des corrélations [8, 9].

Les vitesses et températures choisies sont irréalistes dans une situation expérimentale mais elles permettent de montrer la faisabilité et la validité du couplage mis en oeuvre pour un coût de calcul modéré. Travailler avec des conditions physiquement admissibles nécessiterait des prises

de moyennes sur plus de réalisations et augmenterait considérablement le coût de calcul <sup>1</sup>.

L'approche microscopique utilisée ici engendre une solution linéaire qui est compatible avec un écoulement de Couette, mais à priori pas avec le profil de Poiseuille qui est recherché. Bien qu'il soit possible d'intégrer dans le modèle numérique un forçage volumique (équivalent à un gradient de pression), l'influence de la courbure est quasi négligeable sur la hauteur de simulation de la dynamique moléculaire : le rapport entre les hauteurs des zones moléculaire et continue est de  $1/25$ . Le rapport d'allongement de la conduite est  $L/H = 100$ . Les dimensions des plots sont  $(L_x; L_y; L_z) = (6, 91; 9, 21; 35, 0) \sigma$ . Le voisinage de la paroi est discrétisé en 10 plots dont la répartition est fournie par une suite géométrique de raison  $r_p$ . Le maillage dans la zone continue est de 2000 mailles dans la direction de l'écoulement et de 30 mailles sur la demi-hauteur. Le problème étant stationnaire, il ne nécessite donc plus de correspondance entre les temps micro et macro. Les profils présentés sur les figures 4 sont moyennés sur 2 millions d'itérations  $\delta t$ .

Avant de présenter les résultats couplés, nous avons recherché une solution de référence avec une approche purement continue. La corrélation donnant la longueur d'établissement dynamique  $L_{dyn}$  en fonction du nombre de Reynolds  $Re_{D_h}$  est de la forme  $L_{dyn} = C Re_{D_h}$ . En définissant la longueur d'établissement comme l'abscisse à partir de laquelle la vitesse maximale atteint 99% de celle établie (solution de Poiseuille), nous obtenons  $C = 0,04315$  ce qui est compatible avec les corrélations de la littérature. L'influence de la distribution des plots de DM selon  $x$  sur la valeur de  $C$  a ensuite été étudiée : l'écart relatif à la valeur de référence est de 15%, 9, 2% et 1, 4% pour respectivement  $r_p = 1, r_p = 2$  et  $r_p = 3$ .

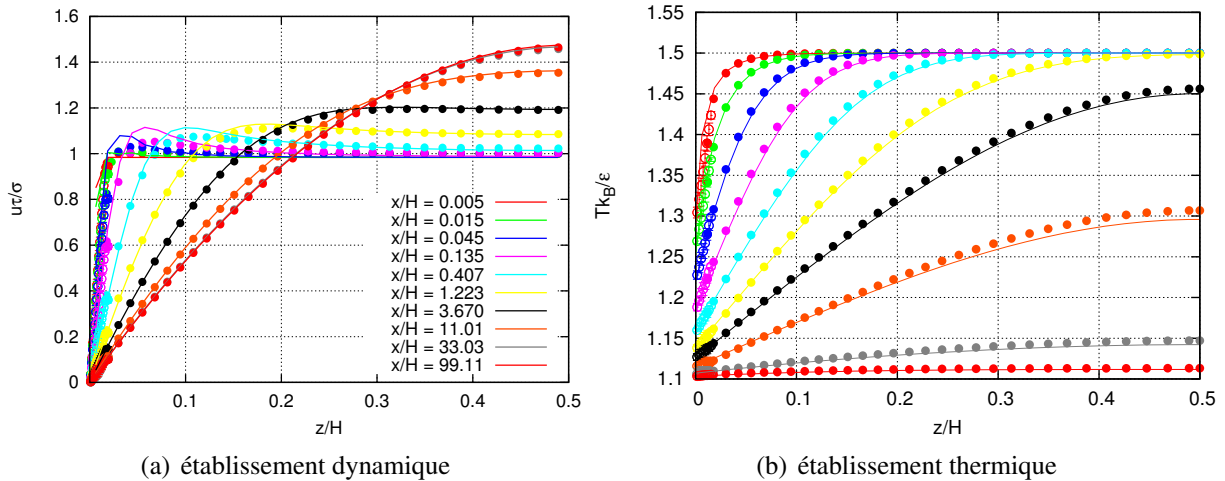


Figure 4 Profils des vitesses (a) et des températures (b) pour différentes abscisses correspondant aux positions des 10 plots. Les lignes présentent les solutions continues, les symboles pleins les solutions NS du modèle hybride et les symboles creux les solutions DM avec l'écart type par rapport à la moyenne des 32 échantillons.

La figure 4(a) présente les profils de vitesse en fonction de la hauteur  $z$  pour les abscisses qui correspondent à l'emplacement des différents plots. Les courbes représentent la solution Navier-Stokes de référence tandis que les symboles (creux pour la DM et pleins pour NS) se réfèrent à la solution couplée. Un bon accord général est constaté, à l'exception éventuelle de la zone d'entrée ( $x/H < 1$ ). En effet, l'écoulement résultant du modèle purement continu (la référence) y est localement fortement 2D, ce que notre modèle DM périodique selon  $x$  est incapable de prendre en compte. Cependant, il faut également remarquer que les conditions aux limites choisies dans le modèle continu (profil de vitesse plat en entrée) engendrent des discontinuités non physiques très discutables, alors que le modèle hybride raccorde à la vitesse de la

1. une itération couplée (NS+10 plots DM) coûte environ 7 heures sur 32 cœurs avec une machine Intel(R) Xeon(R) CPU E7-4870@2,4GHz. L'obtention de l'état convergé nécessite une vingtaine d'itérations.

paroi grâce à la présence d'un plot sur la première maille. Cette discontinuité du modèle continu pourrait être aisément supprimée en adoptant un profil de vitesse en entrée de la conduite qui se raccorde continûment à zéro à la paroi.

Les résultats du problème équivalent en thermique (problème de Graetz) sont présentés en figure 4(b). L'écoulement, généré par une différence de pression, est établi dynamiquement dans la direction  $x$ . Le nombre de Reynolds est  $Re_{D_h} = 400$ . Toutefois, s'il est possible au niveau moléculaire d'utiliser une structuration particulière de mur pour obtenir l'adhérence du fluide à la paroi, la continuité de la température à la paroi ( $T_p = 1,1 \varepsilon/k_B$ ) n'est pas assurée et on observe un saut de température  $T_{saut} = T_{fluide} - T_p$  (cf. figure 4(b)). En entrée de conduite, sur le premier plot,  $T_{saut} \approx 0,2 \varepsilon/k_B$  (50% de  $T_e - T_p$ ). La solution de référence macroscopique est ensuite reconstruite à partir de ce saut de température. On observe alors également un bon accord entre les solutions de référence et la solution couplée ce qui permet de valider l'approche multi-échelle pour des fluides incompressibles.

## 4. Conclusion

Dans ce travail, une approche multi-échelle a été développée pour simuler les transferts dans des micro-conduites de grande extension en tirant avantage d'une représentation moléculaire en proche paroi et d'un modèle continu dans le cœur de l'écoulement. La méthodologie hybride couplant des simulations de dynamique moléculaire et de Navier-Stokes/énergie a d'abord été validée pour des solutions instationnaires connues analytiquement avant d'être appliquée dans un algorithme plus général pour traiter des systèmes très étendus spatialement. Les résultats préliminaires très encourageants montrent la faisabilité et la pertinence du couplage multi-échelle proposé pour simuler des conduites de grand rapport d'allongement dans les cas où les interactions au voisinage des parois ne peuvent être aisément appréhendées par un simple modèle continu.

## Références

- [1] M. Allen and D. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, 1989.
- [2] S. T. O'Connell and P. A. Thompson, "Molecular dynamics continuum hybrid computations : A tool for studying complex fluid flows," *Phys. Rev. E*, 1995.
- [3] X. Nie, S. Chen, and M. Robbins, "A continuum and molecular dynamics hybrid method for micro-and nano-fluid flow," *J. Fluid Mech.*, 2004.
- [4] J. Sun, Y.-L. He, and W.-Q. Tao, "Molecular dynamics continuum hybrid simulation for condensation of gas flow in a microchannel," *Microfluid. Nanofluid.*, 2009.
- [5] E. Chénier, R. Eymard, and O. Touazi, "Numerical results using a colocated finite-volume scheme on unstructured grids for incompressible fluid flows," *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 2006.
- [6] T. Werder, J. H. Walther, and P. Koumoutsakos, "Hybrid atomistic-continuum method for the simulation of dense fluid flows," *J. Comput. Phys.*, 2005.
- [7] M. Bugel, *Couplage entre la Dynamique Moléculaire et la Mécanique des Milieux Continus*. PhD thesis, Université de Bordeaux I, 2009.
- [8] G. Galliéro, C. Boned, and A. Baylaucq, "Molecular Dynamics Study of the Lennard-Jones Fluid Viscosity : Application to Real Fluids," *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2005.
- [9] M. Bugel and G. Galliéro, "Thermal conductivity of the Lennard-Jones fluid : an empirical correlation," *Chemical Physics*, 2008.

## Remerciements

Les auteurs remercient l'Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique (IDRIS) pour l'accès à ses machines de calcul dans le cadre du projet i20142b7277.