# Viscosité de cisaillement pour des fluides de type Chaînes de Lennard-Jones en milieu peu dense

*S. Delage Santacreu*, G. Galliero**, M. Odunlami***, and C. Boned***

**Laboratoire de Mathématiques Appliquées (UMR-5142 avec CNRS), UPPA.*

***Laboratoire des Fluides Complexes et leurs Reservoirs (UMR-5150 avec CNRS et TOTAL), UPPA.*

****Equipe de chimie Physique (IPREM-CNRS UMR 5254 – ECP), UPPA.*

# Sommaire

I. Introduction et contexte du projet

II. Modèle et méthodes utilisées

III. Parallélisation

IV. Résultats

V. Conclusion

# Introduction et contexte

- Intérêt : Amélioration de propriétés de transport de fluides telle que la viscosité de cisaillement en phase peu dense.

- Molécules courtes (Nc<16) et de rigidité variable.

- Simulations de dynamique moléculaire hors équilibre avec un code de Dynamique Moléculaire « Transpore » (G. Galliéro)

# Modèle et méthodes utilisées

- Modèle : fluide modélisé par des chaînes de Lennard-Jones.

$$U_{\mathrm{LJ}} = \begin{cases} 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right], & \text{if } r < r_c \\ 0, & \text{if } r \geq r_c \end{cases}$$

- Utilisation liste de Verlet pour le calcul des forces d'interaction
- Algorithme de Verlet (version vitesse) pour intégrer équations du principe fondamental de la dynamique.
- Algorithme Rattle pour maintenir constante la distance entre atomes d'une même molécule (position et vitesse)
- Introduction d'un potentiel harmonique pour la rigidité.

# Parallélisation (1)

- Utilisation du code de dynamique moléculaire « Transpore » (G. Galliéro)

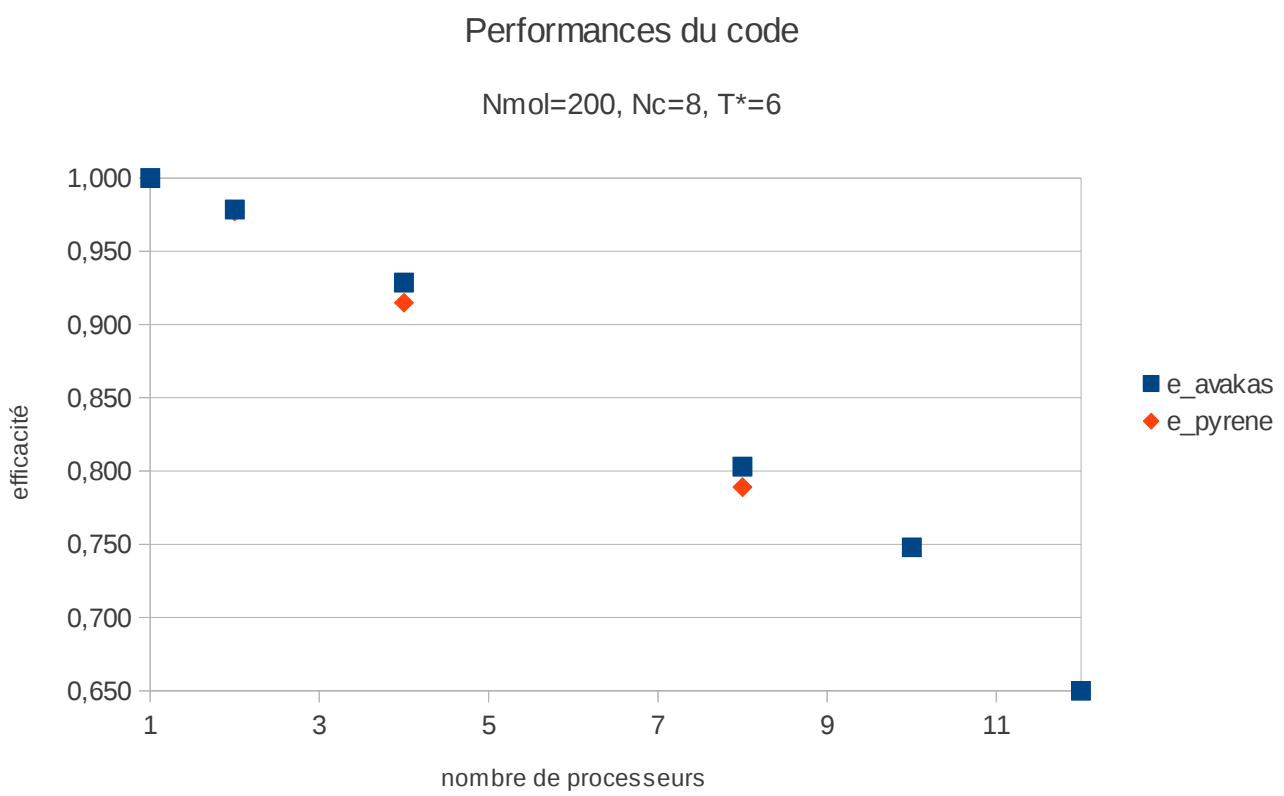
- Facteurs limitants :
  - Calcul des forces d'interaction
  - Contrainte des positions et vitesses des particules (Rattle)

- D'où parallélisation de ces parties du code (en MPI) pour réduire coût en temps cpu

- Choix d'une répartition des molécules et forces associées sur des processeurs

# Parallélisation (2)

- Performances du code sur cluster Avakas (Mcia) et Pyrene (Uppa):
  - Gain en temps d'environ 20 % (nv procs intel)
  - Calcul efficacité e=t1/ (p*tp)



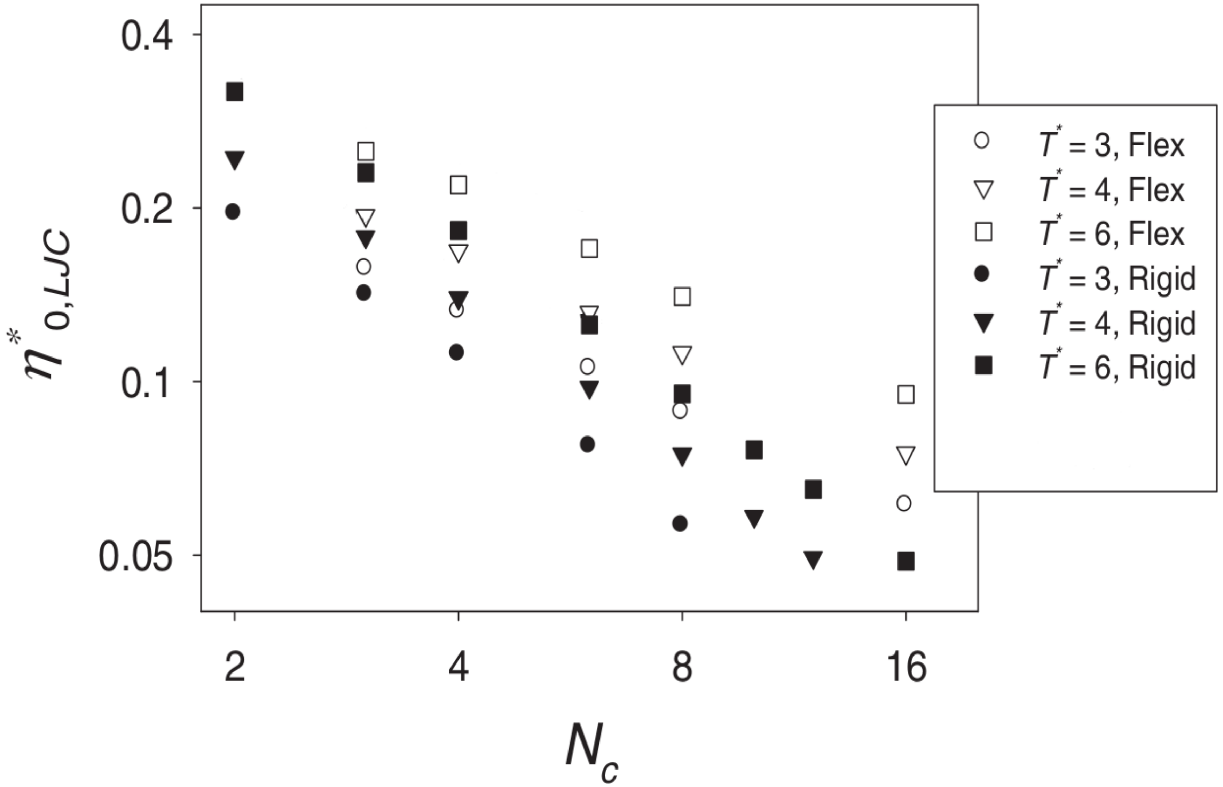
# Viscosité de cisaillement en phase peu dense (2)

- Domaine parallépipédique de dimension 4Lx*Ly*Lz découpé en 24 sous domaines (moyennes).
- Simulation de dynamique moléculaire hors équilibre : phase équilibre (10^6 pas de tps)+phase de transition hors équilibre (10^6 pas de tps)+phase stationnaire hors équilibre de (1.5 10^7 pas de tps).
- Cisaillement par échange de particules, comportement newtonien.
- $\rho^*=0.1$, ~1500 particules, $1 \leq Nc \leq 16$, $2.5 \leq T^* \leq 6$, $0 \leq k^* \leq 1000$.
- CL périodiques, température imposée via thermostat de Berendsen

# Viscosité de cisaillement en phase peu dense (3)

- Viscosité translationelle et longueur de chaîne (Nc>1) pour 2 cas limites :

=> loi puissance




- Référence : dimère

$$\eta^*_{0,N_c=2} = \frac{2}{3}\eta^*_{0,\mathrm{LJ}}$$

# Viscosité de cisaillement en phase peu dense (4)

- Flexible :

$$\eta^*_{0,\mathrm{LJC\,flex}} = \frac{\eta^*_{0,N_c=2}}{\left(\frac{N_c}{2}\right)^{0.57}} = \frac{5}{24\Omega_v\left(\frac{N_c}{2}\right)^{0.57}}\sqrt{\frac{T^*}{\pi}}$$

- Rigide :

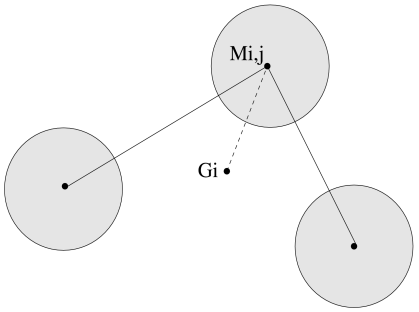
$$\eta^*_{0,\mathrm{LJC\,rigid}} = \frac{\eta^*_{0,N_c=2}}{\left(\frac{N_c}{2}\right)^{0.88}} = \frac{5}{24\Omega_v\left(\frac{N_c}{2}\right)^{0.88}}\sqrt{\frac{T^*}{\pi}}$$

- Erreurs :
  - Flexible : AAD=1.5 % et MxD=4.3 %
  - Rigide : AAD=2.8 % et MxD=5.7 %

# Viscosité de cisaillement en phase peu dense (5)

- Definition rayon de giration :

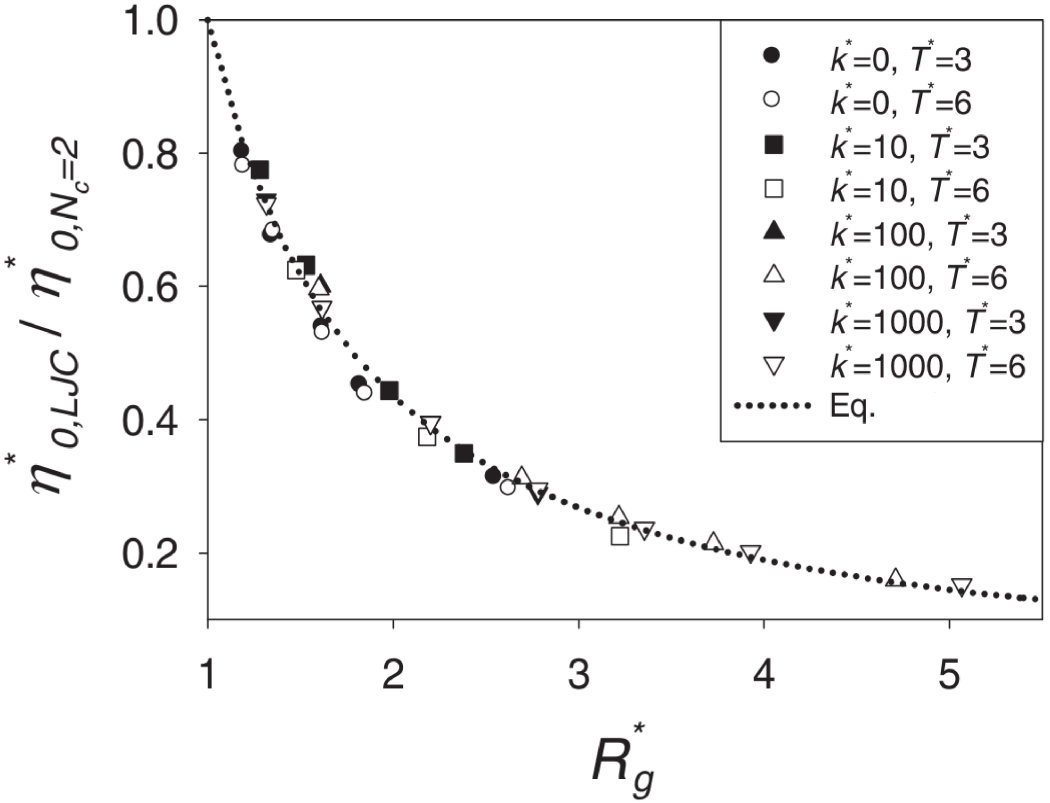
$$|\boldsymbol{R_g}| = \sqrt{\frac{1}{N_c N_{\mathrm{mol}}} \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{mol}}} \sum_{j=1}^{N_c} |\boldsymbol{G_i M_{i,j}}|^2 + \frac{\sigma}{2}}$$




- Viscosité translationelle et rayon de giration (β=-1.2):

$$\frac{\eta^*_{0,\mathrm{LJC}}}{\eta^*_{0,N_c=2}} = (R^*_g)^{\beta}$$

- Erreurs :
  - AAD=3.3 %
  - MxD=8.7 %



# Conclusions

- Relation entre viscosité de cisaillement zéro-densité et géométrie molécule quelque soit la rigidité.
- Relation entre viscosité de cisaillement zéro-densité et longueur de chaîne pour deux cas limites
- Référence : le dimère
- Possibilité de faire de nombreuses simulations grâce à la parallélisation du code et aux moyens de calculs alloués (MCIA et UPPA).

# Viscosité de cisaillement pour des fluides de type Chaînes de Lennard-Jones en milieu peu dense

*S. Delage Santacreu*, G. Galliero**, M. Odunlami***, and C. Boned***

**Laboratoire de Mathématiques Appliquées (UMR-5142 avec CNRS), UPPA.*
***Laboratoire des Fluides Complexes et leurs Reservoirs (UMR-5150 avec CNRS et TOTAL), UPPA.*
****Equipe de chimie Physique (IPREM-CNRS UMR 5254 – ECP), UPPA.*

1er février 2013 **Journée Scientifique du MCIA**

# Sommaire

I. Introduction et contexte du projet
II. Modèle et méthodes utilisées
III. Parallélisation
IV. Résultats
V. Conclusion

# Introduction et contexte

- Intérêt : Amélioration de propriétés de transport de fluides telle que la viscosité de cisaillement en phase peu dense.
- Molécules courtes (Nc<16) et de rigidité variable.
- Simulations de dynamique moléculaire hors équilibre avec un code de Dynamique Moléculaire « Transpore » (G. Galliéro)

# Modèle et méthodes utilisées

- Modèle : fluide modélisé par des chaînes de Lennard-Jones.

$$U_{\mathrm{LJ}} = \begin{cases} 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right], & \text{if } r < r_c \\ 0, & \text{if } r \geq r_c \end{cases}$$

- Utilisation liste de Verlet pour le calcul des forces d'interaction
- Algorithme de Verlet (version vitesse) pour intégrer équations du principe fondamental de la dynamique.
- Algorithme Rattle pour maintenir constante la distance entre atomes d'une même molécule (position et vitesse)
- Introduction d'un potentiel harmonique pour la rigidité.

# Parallélisation (1)

- Utilisation du code de dynamique moléculaire « Transpore » (G. Galliéro)

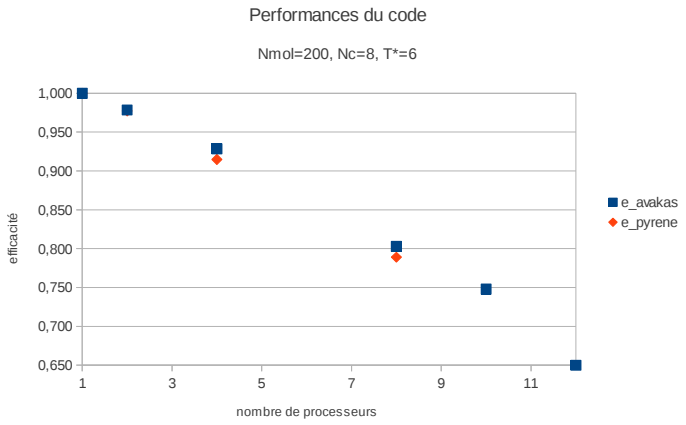
- Facteurs limitants :
  - Calcul des forces d'interaction
  - Contrainte des positions et vitesses des particules (Rattle)

- D'où parallélisation de ces parties du code (en MPI) pour réduire coût en temps cpu

- Choix d'une répartition des molécules et forces associées sur des processeurs

# Parallélisation (2)

- Performances du code sur cluster Avakas (Mcia) et Pyrene (Uppa):
  - Gain en temps d'environ 20 % (nv procs intel)
  - Calcul efficacité e=t1/ (p*tp)



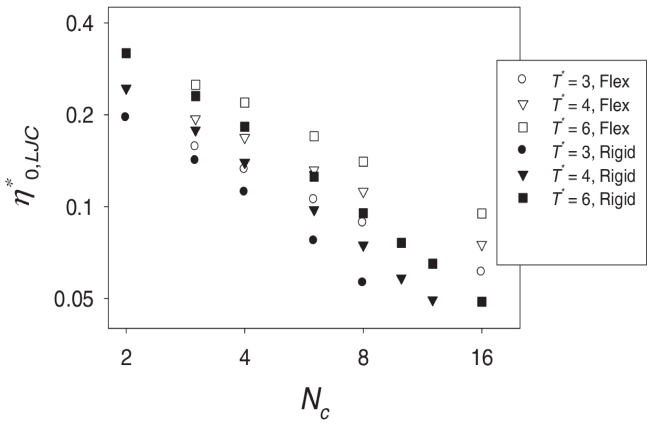
# Viscosité de cisaillement en phase peu dense (2)

- Domaine parallépipédique de dimension 4Lx*Ly*Lz découpé en 24 sous domaines (moyennes).
- Simulation de dynamique moléculaire hors équilibre : phase équilibre (10^6 pas de tps)+phase de transition hors équilibre (10^6 pas de tps)+phase stationnaire hors équilibre de (1.5 10^7 pas de tps).
- Cisaillement par échange de particules, comportement newtonien.
- $\rho^*=0.1$, ~1500 particules, $1 \leq Nc \leq 16$, $2.5 \leq T^* \leq 6$, $0 \leq k^* \leq 1000$.
- CL périodiques, température imposée via thermostat de Berendsen

# Viscosité de cisaillement en phase peu dense (3)

- Viscosité translationelle et longueur de chaîne (Nc>1) pour 2 cas limites :

  => loi puissance




- Référence : dimère

$$\eta^*_{0,N_c=2} = \frac{2}{3}\eta^*_{0,\mathrm{LJ}}$$

# Viscosité de cisaillement en phase peu dense (4)

- Flexible :

$$\eta^*_{0,\mathrm{LJC\,flex}} = \frac{\eta^*_{0,N_c=2}}{\left(\frac{N_c}{2}\right)^{0.57}} = \frac{5}{24\Omega_v\left(\frac{N_c}{2}\right)^{0.57}}\sqrt{\frac{T^*}{\pi}}$$

- Rigide :

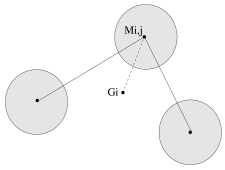
$$\eta^*_{0,\mathrm{LJC\,rigid}} = \frac{\eta^*_{0,N_c=2}}{\left(\frac{N_c}{2}\right)^{0.88}} = \frac{5}{24\Omega_v\left(\frac{N_c}{2}\right)^{0.88}}\sqrt{\frac{T^*}{\pi}}$$

- Erreurs :
  - Flexible : AAD=1.5 % et MxD=4.3 %
  - Rigide : AAD=2.8 % et MxD=5.7 %

# Viscosité de cisaillement en phase peu dense (5)

- Definition rayon de giration :

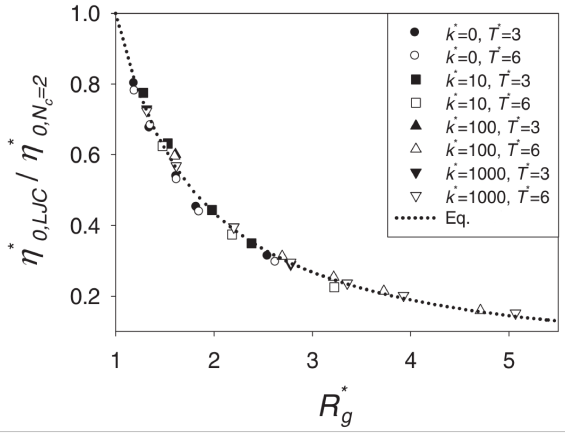
$$|\boldsymbol{R_g}| = \sqrt{\frac{1}{N_c N_{\mathrm{mol}}} \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{mol}}} \sum_{j=1}^{N_c} |\boldsymbol{G_i M_{i,j}}|^2 + \frac{\sigma}{2}}$$




- Viscosité translationelle et rayon de giration (β=-1.2):

$$\frac{\eta^*_{0,\mathrm{LJC}}}{\eta^*_{0,N_c=2}} = (R^*_g)^\beta$$

- Erreurs :
  - AAD=3.3 %
  - MxD=8.7 %



# Conclusions

- Relation entre viscosité de cisaillement zéro-densité et géométrie molécule quelque soit la rigidité.
- Relation entre viscosité de cisaillement zéro-densité et longueur de chaîne pour deux cas limites
- Référence : le dimère
- Possibilité de faire de nombreuses simulations grâce à la parallélisation du code et aux moyens de calculs alloués (MCIA et UPPA).