



**HAL**  
open science

## Modèle hybride pour la simulation d'écoulements en micro-conduites

van Huyen Vu, Benoît Trouette, Quy-Dong To, Eric Chénier

► **To cite this version:**

van Huyen Vu, Benoît Trouette, Quy-Dong To, Eric Chénier. Modèle hybride pour la simulation d'écoulements en micro-conduites. Congrès Français de Mécanique 2015, Aug 2015, Lyon, France. hal-01163492

**HAL Id: hal-01163492**

**<https://hal.science/hal-01163492v1>**

Submitted on 13 Jun 2015

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# Modèle hybride pour la simulation d'écoulements en micro-conduites

Van Huyen VU, Benoît TROUETTE, Quy Dong TO, Eric CHÉNIER

Université Paris-Est Marne-la-Vallée, laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle,  
UMR 8208 CNRS, 77454 Marne-la-Vallée cedex 2  
{ Van-Huyen.Vu ; benoit.trouette ; Quy-Dong.To ; eric.chenier }@u-pem.fr

## Résumé :

*Dans cet article, l'écoulement établi dans des micros/nano-conduites est étudié par la méthode hybride Navier-Stokes et Dynamique Moléculaire. La conduite est décomposée en deux domaines de simulations : dans le cœur de la conduite, l'écoulement est décrit par les équations de Navier-Stokes incompressibles et de l'énergie (NSE) tandis que le voisinage de la paroi est partiellement décrit par la Dynamique Moléculaire (DM). Les variables primaires, vitesse et température, à l'interface des deux zones sont synchronisées afin d'assurer le couplage entre les deux approches. Les résultats obtenus par cette méthode sont en très bon accord avec des solutions transitoires pour deux cas d'études classiques : l'écoulement de Couette et l'état conductif entre deux plaques planes. La méthode de couplage est ensuite utilisée pour étudier l'établissement dynamique et thermique dans une micro-conduite.*

## Abstract :

*In the present paper, the fully developed flow in a micro/nano-channel is studied with a hybrid method coupling Navier-Stokes equations and Molecular Dynamics. The channel is divided in two simulation domains : in the bulk, the flow is described by the incompressible Navier-Stokes and energy equations (NSE) while the neighbourhood of the wall is modeled with Molecular Dynamics (DM). At the interface between the two zones, the primary variables velocity and temperature are synchronized in order to perform the coupling between the two approaches. The obtained results are in good agreement with the unsteady solution for the two case studies : the Couette flow and the heat transfer between the two parallel walls. The coupling method is then used to study the fully developed flow in a micro channel.*

**Mots clefs : micro-conduite ; couplage multi-échelle ; dynamique moléculaire**

## 1 Introduction

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 méthode de simulation multi-échelle adaptée aux écoulements de fluides dans des micro et nano-conduites [6, 5, 7]. Dans le cœur de l'écoulement, les équations de Navier-Stokes et de l'énergie sont résolues (NSE), tandis que, au voisinage des parois et pour des intervalles d'abscisses fixées, 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 pour 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. Un travail préliminaire à déjà été effectué dans [8].

Dans la présente contribution, la méthode de couplage est validée par rapport à des solutions analytiques transitoires. Après une étape de calibration nous permettant de déterminer les abscisses des simulations de dynamique moléculaire qui donneront la meilleure solution couplée, nous utiliserons notre méthode hybride pour déterminer les établissements dynamique et thermique dans un micro-canal.

## 2 Méthodologie

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 avec un profil de vitesse et une température  $T_e$  connues. En sortie, l'écoulement est supposé établi. Les parois sont fixes et isothermes à la température  $T_p$  qui peut être différente de  $T_e$ .

### 2.1 Décomposition du domaine

L'idée principale est de traiter l'interaction du fluide avec les parois par une simulation de dynamique moléculaire. Même si cette approche est faite uniquement au voisinage des parois, la grande longueur de la conduite rend actuellement une telle simulation prohibitive en terme de coût de calcul. Pour pallier cette difficulté, la résolution fine à petite échelle est restreinte à des sous-domaines discrets de faibles extensions, dénommés ici "plots" et numérotés de 1 à 4 sur la figure 1(a).

Chacun de ces  $n_p$  plots abrite une modélisation par dynamique moléculaire permettant de simuler l'interaction du fluide, ici de l'argon liquide, avec la paroi (figure 1(c)). Cette dernière est modélisée par

des atomes de platine organisés selon une structure cristalline cubique à face centrée. L'abscisse  $x_i$  des plots est définie selon une loi géométrique de raison  $r_p$  :

$$x_i = \begin{cases} x_1 + (x_{n_p} - x_1) \left( \frac{1 - r_p^{i-1}}{1 - r_p^{n_p-1}} \right) & \text{si } r_p \neq 1 \\ x_1 + (x_{n_p} - x_1) \left( \frac{i-1}{n_p-1} \right) & \text{si } r_p = 1 \end{cases} \quad i = 1, 2, \dots, n_p \quad (1)$$

Les domaines moléculaires sont périodiques dans les directions tangentiels aux parois, ce qui conduit à des transferts et à un couplage purement 1D selon la direction  $z$ .

Dans la zone centrale de l'écoulement, une description macroscopique est utilisée. La méthode hybride consiste donc 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 NSE→DM et DM→NSE 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 continu vers moléculaire, noté NSE→DM, et moléculaire vers continu DM→NSE. La zone de contrôle permet de limiter la structuration du fluide liée à la présence d'une paroi supérieure fictive permettant de maintenir constant le nombre de molécules dans le domaine moléculaire, et donc la masse volumique.

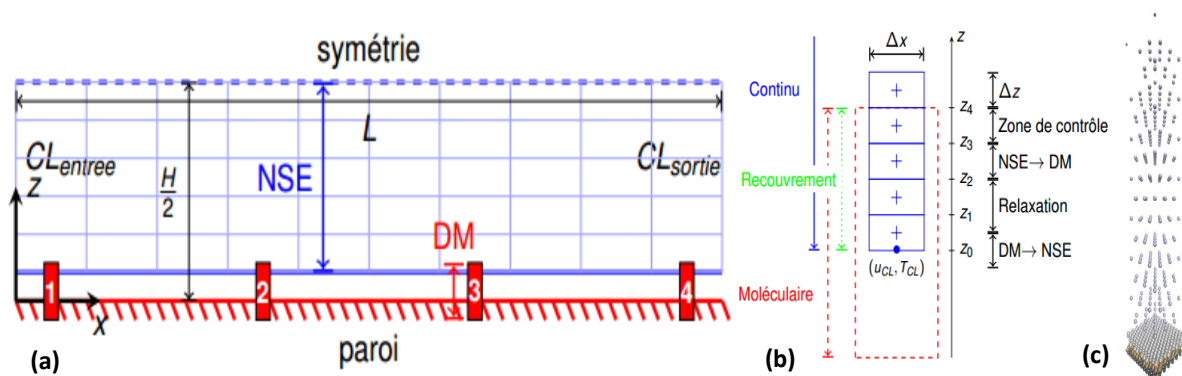


FIGURE 1 – Schématisation de la méthode hybride multi-échelle dans une micro-conduite. (a) micro-conduite avec la discrétisation du voisinage de la paroi en plots dans lesquels sont effectuées des simulations moléculaires (c). Le cœur de la conduite est modélisé de façon continue. Les deux approches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

## 2.2 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 :

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i \equiv - \sum_{j=1, j \neq i}^N \nabla_r V_{ij}(r_{ij}) \quad (2)$$

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 :

$$V_{ij}(r) = 4\varepsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right] \quad (3)$$

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 [3]. L’intégration temporelle des équations du mouvement est réalisée par l’algorithme Verlet-Vitesse [1]. Dans la suite, les différentes échelles (temps, longueur,...) sont construites à partir des propriétés atomiques du fluide et de la constante de Boltzmann  $k_B$ . Pour l’argon, on a  $m = 6,633 \times 10^{-26}$  kg,  $\varepsilon = \varepsilon_{ff} = 1,656 \times 10^{-21}$  J et  $\sigma = \sigma_{ff} = 3,405$  Å. D’un point de vue pratique, il n’est ni envisageable, ni utile, de traiter toutes les interactions entre molécules : le potentiel de Lennard-Jones est tronqué au-delà du rayon de coupure  $r_c = 2,5\sigma$ .

Comme peuvent le laisser supposer les figures 1(b et c), les plots de dynamique moléculaire utilisent des conditions de périodicité dans les directions tangentes à la paroi. Afin que la masse volumique soit conservée, le modèle de couplage proposé ici est donc nécessairement monodimensionnel ; seule la composante horizontale de la vitesse est échangée entre les deux approches.

Le code de calcul est parallélisé avec la norme MPI. Chacun des  $n_e$  processus effectue une simulation du problème avec une initialisation propre issue d’un tirage aléatoire. Cette technique multi-processus permet d’augmenter artificiellement le nombre global de molécules ( $n_e$  échantillons de  $N$  molécules) et conduit à des grandeurs macroscopiques (statistiques) plus précises, principalement lors de problèmes instationnaires.

## 2.3 Équations de Navier-Stokes et de l’énergie (NSE)

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

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} &= -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{\mu}{\rho} \nabla^2 \mathbf{u} \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T &= \frac{\lambda}{\rho c_v} \nabla^2 T + \frac{\mu}{\rho c_v} \left[ 2 \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + 2 \left( \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (4)$$

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 [4]. 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.

## 2.4 Conditions de couplage

Comme évoqué précédemment, les deux approches doivent échanger des informations qui, dans notre cas, sont les variables primaires de vitesse et de température. Dans le sens moléculaire vers continu (DM→NSE), 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 (NSE→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 [6] dans la zone d'échange pour imposer le vecteur vitesse  $\mathbf{u}_{\text{NSE} \rightarrow \text{DM}}$  issue de l'approche macroscopique. Cette contribution supplémentaire s'ajoute aux forces issues des interactions de paires données par (2) :

$$\ddot{\mathbf{r}}_i(t) = \ddot{\mathbf{r}}_i^*(t) - \frac{1}{m_i N_{\text{NSE} \rightarrow \text{DM}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{NSE} \rightarrow \text{DM}}} \mathbf{F}_j + \frac{1}{\delta t} \left( \mathbf{u}_{\text{NSE} \rightarrow \text{DM}} - \frac{1}{N_{\text{NSE} \rightarrow \text{DM}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{NSE} \rightarrow \text{DM}}} \dot{\mathbf{r}}_j(t) \right) \quad (5)$$

avec  $\ddot{\mathbf{r}}_i^*(t)$  l'accélération au temps  $t$  issue de l'équation (2),  $N_{\text{NSE} \rightarrow \text{DM}}$  le nombre de molécules dans la cellule NSE→DM et  $\mathbf{F}_i$  la force d'interaction de la particule  $i$  avec ses voisines (issue du potentiel de Lennard-Jones).

Pour contrôler la température, on utilise un thermostat de Langevin [7] qui modifie l'accélération issue de l'équation (5) (notée également  $\ddot{\mathbf{r}}_i^*(t)$ ), via l'équation (6) :

$$\ddot{\mathbf{r}}_i(t) = \ddot{\mathbf{r}}_i^*(t) - \alpha \left( \dot{\mathbf{r}}_i(t) - \frac{1}{N_{\text{NSE} \rightarrow \text{DM}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{NSE} \rightarrow \text{DM}}} \dot{\mathbf{r}}_j(t) \right) + \frac{\mathbf{R}_i(t)}{m_i} \quad (6)$$

où  $\mathbf{R}_i(t)$  représente une force aléatoire issue d'une loi de gaussienne de moyenne nulle et d'écart type  $\sqrt{2\alpha m k_B T_{\text{NSE} \rightarrow \text{DM}} / \delta t}$  avec  $T_{\text{NSE} \rightarrow \text{DM}}$  la température vers laquelle le système doit être relaxé. La constante de relaxation pour le fluide est 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, on choisit  $\alpha = 168 \tau^{-1}$  [7]. 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.

Dans la zone de contrôle (cf. figure. 1(b)), il existe des perturbations locales parasites de densité et de température liée à la présence d'une paroi fictive qui empêche les molécules de sortir du domaine. Pour réduire ces fluctuations non physiques, on ajoute une force qui modélise l'interaction des molécules de la zone de contrôle avec un réservoir imaginaire [9].

## 2.5 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. En notant  $n$  le rapport des pas de temps, on obtient :  $\Delta t = n\delta t$ . Plusieurs schémas de couplage temporels sont référencés dans la littérature (voir [2]). 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 (NSE) à l'instant  $t^n$ . La résolution dans la zone (NSE) utilise ensuite les conditions aux limites provenant des moyennes déterminées dans le domaine microscopique et centrées sur le temps  $t^{n+1}$ .

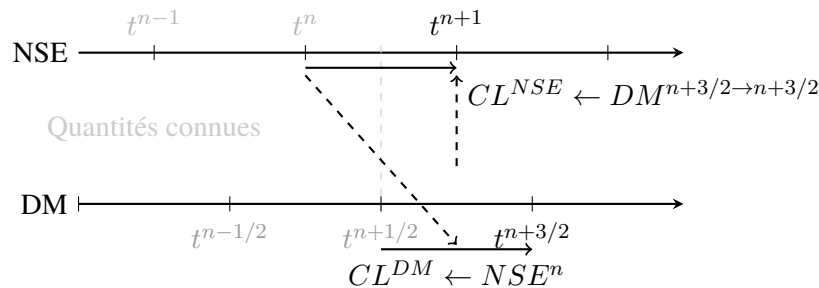


FIGURE 2 – Schématisation du couplage temporel. Toutes les quantités grisées sont supposées connues. Durant l'intégration temporelle au niveau moléculaire entre  $t^{n+1/2}$  et  $t^{n+3/2}$ , la condition issue de (NSE) à l'instant  $t^n$  est gardée constante dans la zone NSE→DM (Fig. 1(b)). Les grandeurs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

### 3 Résultats et discussion

L'objectif des travaux présentés dans cette section est de montrer la faisabilité et la validité du couplage proposé dans ce papier. Ainsi pour limiter les coûts des calculs, les conditions aux limites choisies correspondent à des situations physiques difficilement réalisables d'un point de vue expérimental. Travailler avec des conditions physiquement admissibles nécessiterait de calculer des moyennes en dynamique moléculaire sur un plus grand nombre de réalisations, ce qui augmenterait simplement le temps des simulations microscopiques, mais pas le principe du couplage hybride.

#### 3.1 Validations

La méthode de couplage et son implémentation sont validées sur deux problèmes classiques 1D possédant des solutions analytiques : les problèmes transitoires de Couette (partie dynamique) et de diffusion thermique. La configuration physique diffère légèrement de celle présentée en figure 1 : (i) la conduite est modélisée sur toute sa hauteur  $H$ , (ii) un unique plot est utilisé et (iii) l'écoulement est invariant dans la direction  $x$  (solution établie).

Le fluide utilisé 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  $T_1 = 1 \varepsilon/k_B$  ( $120 \text{ K}$ ). Les sous domaines moléculaire et continu ont la même hauteur  $H_{\text{NSE}} = H_{\text{DM}} = 32,18 \sigma$  ce qui conduit à une hauteur  $H = 51,49 \sigma$  ( $17,53 \text{ nm}$ ). 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. Le pas de temps macroscopique est choisi tel que  $\Delta t = 150 \delta t$ .

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 ( $\mu$  et  $\lambda$ ) correspondent dans la zone de recouvrement. Dans ce travail, les coefficients  $\mu = 2,08 \sqrt{m\varepsilon}/\sigma^2$  ( $1,88 \times 10^{-4} \text{ Pa.s}$ ),  $\lambda = 7,7 k_B \sqrt{m\varepsilon}/\sigma^2$  ( $1,44 \times 10^{-1} \text{ W}/\text{m}/\text{K}$ ) et  $c_v = 2,43 k_B/m$  ( $5,05 \times 10^2 \text{ J}/\text{kg}/\text{K}$ ) sont supposés constants et ces valeurs sont issues de la référence [5].

### 3.1.1 Diffusion transitoire de quantité de mouvement : problème de Couette

Après la mise à l'équilibre du système à la température des parois  $T_1$ , la paroi supérieure (limite supérieure du domaine macroscopique) est animée d'une vitesse constante horizontale  $u_0 = 1 \sigma/\tau$  (158.03 m/s), tandis que la paroi inférieure (limite inférieure du domaine moléculaire) est maintenue immobile. Les données entre les deux approches sont échangées tous les pas de temps macroscopiques selon l'algorithme schématisé sur la figure 2. Afin de maintenir le système à une température proche de  $T_1$  à laquelle les coefficients de transport sont évalués, la température d'échange est imposée telle que  $T_{\text{NSE} \rightarrow \text{DM}} = T_1$ .

La figure 3(a) présente la vitesse normalisée par  $u_0$  en fonction de la hauteur  $z$  pour différents instants. 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  $n_e = 32$  échantillons. Les symboles pleins se réfèrent à la solution continue tandis que les courbes représentent la solution analytique au cours du temps donnée par :

$$\frac{u_x(z, t)}{u_0} = \frac{z}{H} + \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} \sin\left(\frac{k\pi z}{H}\right) \exp\left(-\frac{\nu k^2 \pi^2 t}{H^2}\right) \quad (7)$$

avec  $\nu = \mu/\rho$  la viscosité cinématique du fluide.

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 peut vérifier que dans la zone de recouvrement  $z/H \in [0, 36; 0, 62]$  les solutions issues des deux modélisations se raccordent correctement. Par ailleurs pour des temps longs, on observe du glissement dynamique proche de la paroi. Ce dernier peut être réduit en utilisant un mur atomique plus rugueux ou bien en réduisant l'intensité du gradient de vitesse horizontale entre les deux plaques.

### 3.1.2 Diffusion transitoire thermique

Pour le problème de diffusion thermique, les parois sont immobiles. Après la mise à l'équilibre du système à la température  $T_1$ , la température de la paroi supérieure est portée à  $T_2 = 1,5 \varepsilon/k_B$  (180 K) tandis que la paroi inférieure reste à  $T_1 = 1 \varepsilon/k_B$  (120 K). Le profil de température au cours du temps est présenté en figure 3(b). La solution analytique est donnée par :

$$\frac{T(z, t)}{T_1} = 1 + \left(\frac{T_2}{T_1} - 1\right) \frac{z}{H} + \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \left( \left(\frac{T_2}{T_1} - 1\right) \frac{\cos(k\pi)}{k} \right) \sin\left(\frac{k\pi z}{H}\right) \exp\left(-\frac{\alpha k^2 \pi^2 t}{H^2}\right) \quad (8)$$

où  $\alpha = \lambda/(\rho c_v)$ , est la diffusivité thermique.

Les remarques sont similaires à celles dressées pour le problème de Couette. De façon analogue au problème dynamique, la vitesse  $u_{\text{NSE} \rightarrow \text{DM}}$  est contrainte à zéro tout au long de la simulation.

## 3.2 Établissement de l'écoulement de Poiseuille

La méthode hybride est maintenant utilisée dans la configuration d'une micro-conduite présentée en figure 1, c'est-à-dire pour des canaux de grand rapport d'allongement.

Le fluide est toujours de l'argon liquide de masse volumique  $\rho = 0,81 \text{ m}/\sigma^3$  (1360, 8 kg/m<sup>3</sup>) et circule dans une conduite de demi hauteur  $H = 2369,8 \sigma$  (806, 92 nm) et de longueur  $L = 4000H$ . Les parois



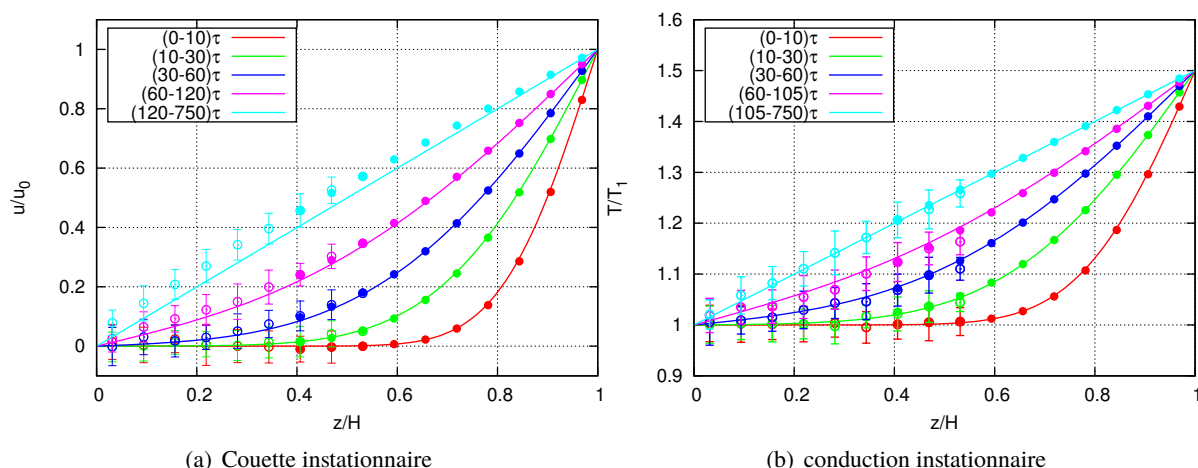


FIGURE 3 – Profils de vitesse (a) et de température (b) pour différents instants. Les lignes correspondent aux solutions analytiques, les symboles pleins aux solutions (NSE) et les symboles creux aux solutions (DM) avec des barres d'erreur représentatives des écarts types par rapport à la moyenne des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

immobiles sont maintenues à la température  $T_p = 1,1 \varepsilon/k_B$  (132 K). En entrée, le profil de vitesse horizontale est uniforme à  $u_0 = 1 \sigma/\tau$  (158 m/s) sur 80% de la hauteur  $H$  puis se raccorde continûment à la paroi par un profil de couche limite approximé par une loi parabolique. La température d'entrée est identique à celle de la paroi,  $T_e = T_p$  et l'écoulement de sortie est supposé établi dynamiquement et thermiquement (les gradients dans le sens de l'écoulement sont nuls). Le nombre de Reynolds construit sur le diamètre hydraulique est  $Re_{D_h} = u_0 D_h/\nu = 3455$ .

Les plots utilisés au voisinage de la paroi ont pour dimensions  $(L_x; L_y; L_z) = (9, 2; 8, 96; 92, 6) \sigma$  (soit  $H_{DM} = 31,5$  nm); le rapport  $H_{DM}/H_{NSE}$  est de 1/25.

Le domaine résolu par la méthode des volumes finis est discrétisé en  $N_x \times N_z = 48000 \times 30$  mailles, avec un raffinement en entrée de la conduite.

### 3.2.1 Dimension et positionnement des plots le long de la conduite : modèle hybride linéaire

La méthode hybride présentée dans la section 2 repose sur l'utilisation d'un couplage discret en "plots" entre le cœur de l'écoulement, modélisé par la mécanique des milieux continus, et des voisinages de l'interface solide/fluide qui sont simulés à l'échelle microscopique. Bien que le nombre et le positionnement de ces "plots" jouent un rôle déterminant sur la qualité de la solution numérique hybride, il est déraisonnable d'envisager une étude systématique de ces paramètres avec notre modèle de couplage dynamique moléculaire/volumes finis. Afin de déterminer le nombre et la localisation de ces plots, nous avons utilisé un modèle simplifié de notre schéma hybride. Ce modèle suppose que la réponse du système dans la zone moléculaire est simplement linéaire. Sous cette hypothèse, les simulations microscopiques sont substituées par des profils analytiques de température et de vitesse qui doivent vérifier les conditions suivantes : ils doivent se raccorder à la fois aux valeurs à la paroi (adhérence et température imposée) et à la solution issue de la mécanique des milieux continus dans le cœur de l'écoulement. Par la suite, cette méthode sera qualifiée de méthode hybride linéaire et on désignera par "plot linéaire" le domaine dans lequel les solutions sont choisies analytiques et linéaires.

Des calculs préliminaires sur un unique "plot linéaire" permettent d'illustrer la convergence du processus itératif de couplage pour l'exemple très simple de l'écoulement de Poiseuille isotherme établi entre deux plaques planes, sans glissement. Dans ce cas, la solution numérique est de nature parabolique dans la zone macroscopique mais reste linéaire dans le domaine du plot. La convergence de la solution couplée étant itérative, l'état stationnaire est atteint lorsque les informations échangées entre la solution analytique linéaire et la méthode des volumes finis (DM $\rightarrow$ NSE et NSE $\rightarrow$ DM) ne varient plus dans le temps. Dans le cas où  $H_{DM}/H_{NSE} = 1$ , le processus de convergence vers la solution stationnaire est atteint au bout d'une quinzaine d'itérations (Fig. 4(a)). L'erreur quadratique moyenne commise entre la

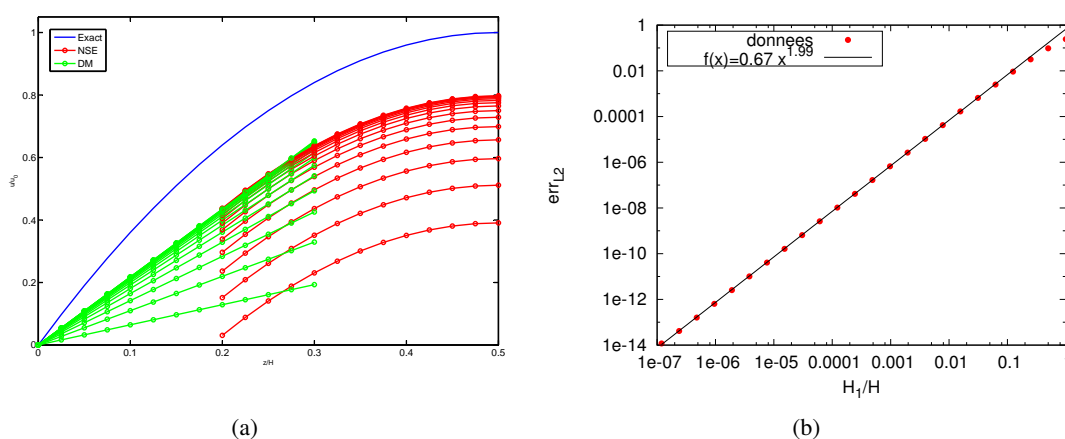


FIGURE 4 – (a) : Convergence du modèle linéaire vers l'état stationnaire pour  $H_{DM}/H_{NSE} = 1$  et comparaison avec la solution exacte de Poiseuille. (b) : Variation de l'erreur relative en norme  $L_2$  par rapport à la solution de Poiseuille en fonction du rapport  $H_1/H$

solution numérique hybride linéaire et la solution analytique de Poiseuille converge sans surprise de façon quadratique en fonction de la hauteur réduite du domaine moléculaire,  $H_1/H$ , avec  $H_1 = 0,6H_{DM}$  défini par la différence entre  $H_{DM}$  et la taille de la zone de recouvrement  $0,4H_{DM}$  (Fig. 4(b)). Pour toutes les études dans les micro-conduites, nous avons choisi  $H_{DM}/H_{NSE} = 1/25$  ce qui engendre une erreur relative de l'ordre de  $10^{-5}$ .

Maintenant que la hauteur des "plots linéaires" a été déterminée ( $H_{DM}/H_{NSE} = 1/25$ ), nous allons étudier l'influence de leur nombre et de leur répartition le long de la micro-conduite lors de l'établissement dynamique et thermique avec le schéma hybride linéaire. La solution de référence de ce problème est calculée sur la demi-hauteur complète du canal par une simulation volumes finis sur le même maillage. Dans le cas d'une répartition uniforme (Fig. 5(a)), une cinquantaine de "plots linéaires" est nécessaire pour que les erreurs relatives calculées dans la zone d'entrée ( $x/L < 50$ ) sur les champs de température et de vitesse commencent significativement à diminuer. L'erreur sur la vitesse sature autour de  $10^{-3}$  pour  $n_p \gtrsim 1000$ , ce qui correspond à l'écart systématique introduit par la modélisation couplée microscopique/macrosopique pour un rapport d'échelles  $H_{DM}/H_{NSE} = 1/25$  (voir Fig. 4(b)). Il est cependant évident que l'utilisation d'un millier de plots n'est pas envisageable avec le modèle hybride complet. En effet, alors que l'obtention de l'état stationnaire par le modèle hybride linéaire nécessite une quinzaine d'itérations couplées et coûte de l'ordre de 15 minutes, un à plusieurs jours équivalent mono-processeur sont nécessaires pour atteindre la convergence de la simulation (DM) sur un unique plot. La minimisation du nombre de plots pour le modèle hybride est donc un enjeu fondamental pour espérer obtenir les solutions stationnaires dans des temps raisonnables, y compris avec l'utilisation de machines à architecture parallèle.

Afin d'utiliser un nombre de plots acceptable ( $n_p < 20$ ), leur répartition doit maintenant être étudiée. La figure 5(b) présente la norme  $L_2$  relative sur l'écart de la vitesse obtenue entre le modèle hybride linéaire et la solution de référence en fonction de la raison  $r_p$  donnant la distribution des plots de calcul (Eq. 1). A un nombre de plots fixé  $n_p$ , on constate qu'il existe une valeur de la raison  $r_p$  qui minimise la différence à la solution de référence, et qu'il est préférable de surestimer la valeur de  $r_p$  pour obtenir de petits écarts.

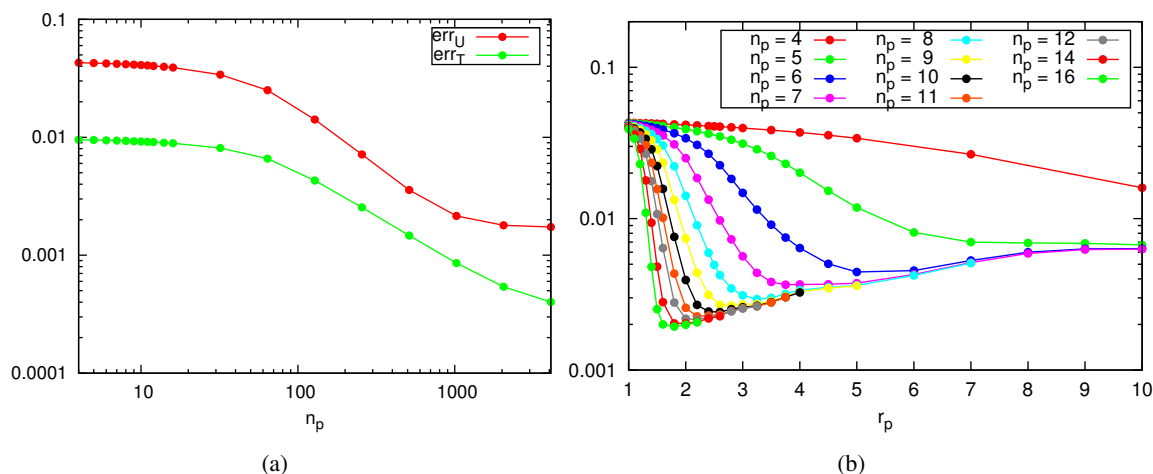


FIGURE 5 – écarts (en norme  $L_2$  et calculée pour  $x/H \in [0, 50]$ ) entre la solution issue du modèle de couplage linéaire et la solution de référence purement macroscopique. (a) : Écarts sur la vitesse et la température en fonction du nombre de plots répartis uniformément. (b) : écart sur la vitesse en fonction de la raison  $r_p$  et différents nombres de plots  $n_p$ .

Ces études systématiques basées sur le modèle hybride simplifié (modèle hybride linéaire) ont permis d'identifier la taille, le nombre et la répartition des plots qu'il faut adopter pour garantir un écart acceptable à la solution de référence. Dans la suite nous utiliserons 8 plots distribués géométriquement avec une raison  $r_p = 4$ . Le modèle hybride linéaire est également utilisé pour initialiser les simulations (DM) autour des profils calculés dans les "plots" et ainsi réduire significativement le nombre d'itérations couplées pour converger vers l'état stationnaire.

### 3.2.2 Résultats du modèle hybride complet

Des simulations de dynamique moléculaire sont maintenant effectuées au sein de chaque plot avec une initialisation issue des profils du modèle linéaire. Le problème étant stationnaire, il ne nécessite pas de correspondance entre les temps microscopique et macroscopique. Les profils présentés sur la figure 6 sont moyennés sur 2 millions d'itérations temporelles microscopiques et sur  $n_e = 40$  échantillons (voir section 2.2).

Les figures 6(a) et 6(b) donnent les profils de vitesse et de température en fonction de la hauteur  $z/H$  pour différentes abscisses correspondant à l'emplacement des plots. Les symboles vides (resp. pleins) correspondent à la solution couplée dans le domaine microscopique (DM) (resp. macroscopique (NSE)) tandis que les courbes pleines représentent la solution purement macroscopique. Pour tenir compte du faible glissement thermique observé dans la simulation hybride, nous utilisons ce saut de température comme condition à la limite en paroi inférieure pour obtenir la solution macroscopique (NSE). Les comparaisons des solutions hybride et (NSE) présentent un très bon accord, ce qui permet de valider

l'approche multi-échelle proposée pour des écoulements de fluides incompressibles. Il faut également noter que dans la partie moléculaire, la solution est quasiment linéaire ce qui permet de justifier à posteriori l'utilisation du modèle hybride linéaire pour étudier les propriétés de convergence de l'approche couplée.

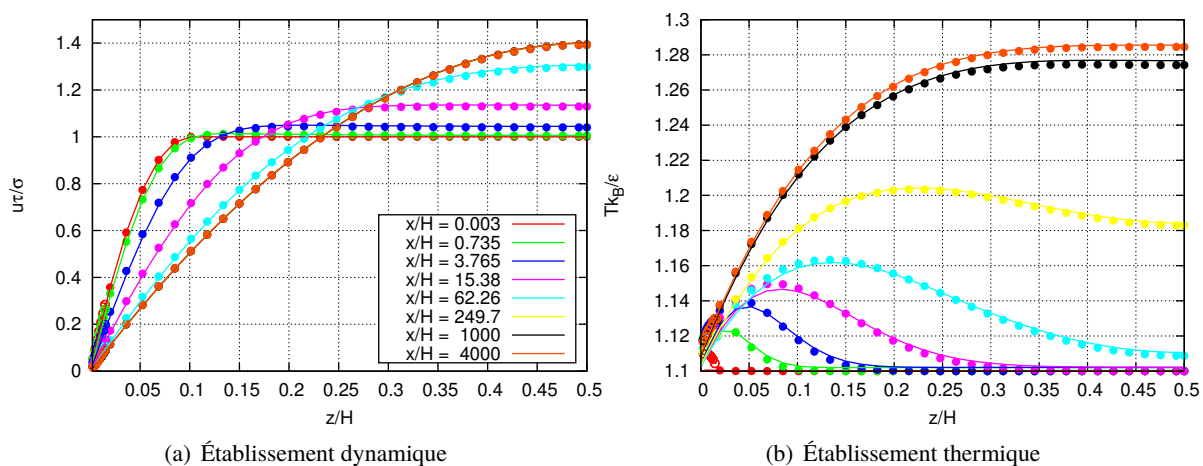


FIGURE 6 – Profils des vitesses (a) et des températures (b) pour différentes abscisses correspondant aux positions des 8 plots une fois la solution stationnaire obtenue. Les lignes continues présentent les solutions purement macroscopiques, les symboles pleins les solutions (NSE) du modèle hybride et les symboles creux les solutions DM

## 4 Conclusion

Dans cette communication, une approche multi-échelle a été décrite pour simuler les transferts d'énergie et de quantité de mouvement 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 avant d'être appliquée dans un algorithme plus général pour traiter des systèmes très étendus spatialement. Un modèle simplifié linéaire a été proposé afin d'étudier la convergence de la méthode couplée. Les résultats préliminaires sont très encourageants et 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.

### 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 ainsi que le LabEx MMCD – Modélisation & Expérimentation pour la Construction Durable de l'Université Paris-Est.

### Références

- [1] M. Allen and D. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, 1989.

- [2] M. Bugel. *Couplage entre la Dynamique Moléculaire et la Mécanique des Milieux Continus*. PhD thesis, Université de Bordeaux I, 2009.
- [3] B. Cao, M. Chen, and Z. Guo. Temperature dependence of the tangential momentum accommodation coefficient for gases. *Appl. Phys. Lett.*, 86 :091905, 2005.
- [4] 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*, 49(3) :259–276, 2006.
- [5] J. Liu, S. Chen, X. Nie, and M. O. Robbins. A continuum–atomistic simulation of heat transfer in micro- and nano-flows. *J. Comput. Phys.*, 227 :279–291, 2007.
- [6] X. B. Nie, S. Y. Chen, W. N. E, and M. O. Robbins. A continuum and molecular dynamics hybrid method for micro- and nano-fluid flow. *J. Fluid Mech.*, 500 :55–64, 2004.
- [7] J. Sun, Y.-L. He, and W.-Q. Tao. Molecular dynamics-continuum hybrid simulation for condensation of gas flow in microchannel. *Microfluid Nanofluid*, 7 :407–422, 2009.
- [8] V. H. Vu, B. Trouette, Q. D. To, and E. Chénier. Modélisation multi-échelle dans des micro-conduites. In *Actes du congrès Français de Thermique*, 2015.
- [9] T. Werder, J. H. Walther, and P. Koumoutsakos. Hybrid atomistic–continuum method for the simulation of dense fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 205(1) :373 – 390, 2005.