



HAL
open science

Modélisation multi-échelle dans des 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. Modélisation multi-échelle dans des micro-conduites. Congrès 2015 Société Française de Thermique: "La thermique de l'habitat et de la ville", May 2015, La Rochelle, France. hal-01301327

HAL Id: hal-01301327

<https://hal.science/hal-01301327>

Submitted on 12 Apr 2016

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.

Problématique & Objectif

- Problématique**
- Les transferts aux interfaces jouent un rôle déterminant dans de très nombreux problèmes physiques.
 - Si les **dimensions** caractéristiques du problème deviennent **très petites**, les conditions interfaciales classiques doivent être modifiées pour tenir compte des phénomènes qui sont négligeables à plus **grande échelle**.
- Objectif**
- Mettre en œuvre une description multi-échelle (**microscopique** & **macroscopique**) adaptée aux écoulements de fluides dans des micro ou nano-conduites.

Modélisation Multi-Échelle

Définitions

- DM** : Dynamique Moléculaire
- NS** : Navier-Stokes & énergie
- n_p : Nombre de plots
- R_p : Raison

Hypothèses

- Couplage 1D
- $L \gg H$
- DM**: discrétisation du voisinage de la paroi en n_p plots

Approches locales

Macroscopique : Navier-Stokes incompressible & énergie

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{u} = 0$$

$$\rho(\partial_t \vec{u} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u}) = -\vec{\nabla} p + \mu \vec{\nabla}^2 \vec{u} + CLs$$

$$\rho c_v (\partial_t T + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})T) = \lambda \vec{\nabla}^2 T + \mu (\vec{\nabla} \vec{u} + (\vec{\nabla} \vec{u})^T) : \vec{\nabla} \vec{u}$$

Microscopique : Dynamique Moléculaire, potentiel de Lennard-Jones

$$m_i \vec{r}_i = \vec{F}_i = - \sum_{j=1, i \neq j}^N \vec{\nabla}_r V_{ij}(r_{ij})$$

$$V_{ij}(r) = 4\epsilon_{ij} ((\sigma_{ij}/r)^{12} - (\sigma_{ij}/r)^6)$$

Interfaçage & Synchronisation temporelle

Stationnaire

- Macroscopique** $\Delta t = 150 \delta t$
- Microscopique** $\delta t = 0,005 \tau$

Processus itératif

Quantités données

$CL^{NS} \leftarrow DM^{n+1/2 \rightarrow n+3/2}$

$CL^{DM} \leftarrow NS^n$

Couplage

Microscopique → Macroscopique (DM → NS)

- Conditions aux limites reconstruites au niveau des plots dans la zone DM → NS
- Interpolation linéaire entre les plots

Macroscopique → Microscopique (NS → DM)

- Contrainte dynamique

$$\vec{r}_i^*(t) = \vec{F}_i - \frac{1}{m_i N_{NS \rightarrow DM}} \sum_{j=1}^N \vec{F}_j + \frac{1}{\delta t} \left(\vec{u}_{NS \rightarrow DM} - \frac{1}{N_{NS \rightarrow DM}} \sum_{j=1}^{N_{NS \rightarrow DM}} \vec{r}_i(t) \right)$$

Thermostat

$$\vec{r}_i(t) = \vec{r}_i^*(t) - \alpha \left(\vec{r}_i - \frac{1}{N_{NS \rightarrow DM}} \sum_{j=1}^{N_{NS \rightarrow DM}} \vec{r}_i(t) \right) + \frac{\vec{R}_i(T_{NS \rightarrow DM})}{m_i}$$

Correspondance de μ, λ et c_v (estimés en DM)

Contrôle du nombre d'atomes au niveau de la paroi supérieure en DM

Validation de l'approche

- Comparaison avec des solutions analytiques: Couette et Conduction instationnaires.
- Les symboles pleins sont les solutions **NS**, les symboles creux les solutions **DM**, les lignes correspondent aux solutions analytiques
- Bon accord, erreur inférieure à 1%

Couette instationnaire

Conduction instationnaire

$\rho = 0,81 \text{ m}/\sigma$ (1360,8 kg/m³); $u_0 = 1 \sigma/\tau$ (158 m/s); $T = 1 \epsilon/k_B$ (120 K); $H_{NS} = H_{DM} = 32,18 \sigma$ (10,95 nm); $H = 51,49 \sigma$; $\mu = 2,07 \sigma^2/\sqrt{m\epsilon}$; $\lambda = 6,83 \sigma^2/\sqrt{m/\epsilon k_B}$; $c_v = 2,19 \sigma^2/k_B$

Écoulement en micro conduite

Modèle hybride linéaire (MHL)

- Objectif**: positionnement des plots le long de la conduite
- DM**: la réponse du système est simplement linéaire
- Parois: adhérence & température imposée

Comparaison entre MHL & NS complet

Modèle hybride complet (avec DM) pour $H_{NS} = 25H_{DM}$; $n_p = 10$; $r_p = 3$

Conditions aux limites

- Établissement dynamique: profil de vitesse plat imposée en entrée; $T_{entrée} = T_{parois}$
- Établissement thermique: différence de pression; $T_{entrée} = 1,5$; $T_{parois} = 1,1$

Établissement dynamique

Établissement thermique (Graetz)

$\rho = 0,81 \text{ m}/\sigma$; $u_0 = 1 \sigma/\tau$; $T = 1 \epsilon/k_B$; $H = 2 \times 823,9 \sigma$ (561 nm); $L = 100 H$

Conclusions

- Approche multi-échelle développée pour simuler les transferts dans des micro-conduites de grande extension.
- Résultats préliminaires obtenus montrent la faisabilité et la pertinence du couplage multi-échelle proposé.