



**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-01301327v1>**

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.

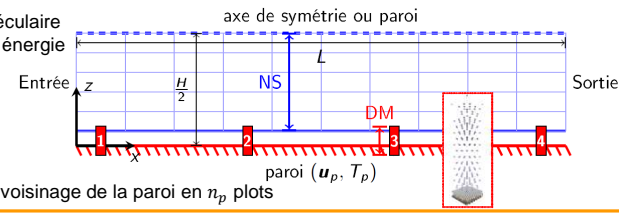
## Modélisation Multi-Échelle

### 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

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

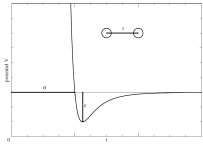
$$\rho(\partial_t \vec{u} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})\vec{u}) = -\vec{\nabla} p + \mu \vec{\nabla}^2 \vec{u} + CLs$$

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

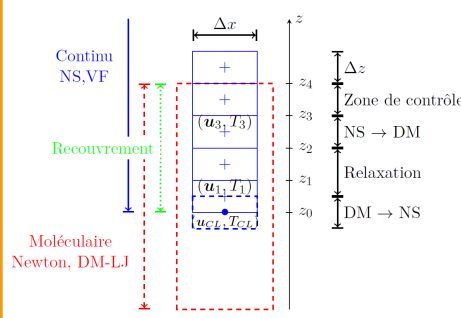
### Microscopique : Dynamique Moléculaire, potentiel de Lennard-Jones

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

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



## Interfaçage & Synchronisation temporelle

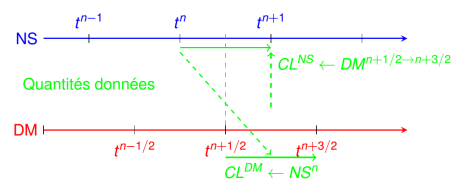


### Instationnaire

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

### Stationnaire

- Processus itératif



## 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

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

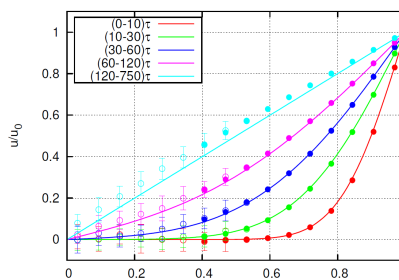
### Correspondance de $\mu$ , $\lambda$ et $c_v$ (estimés en DM)

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

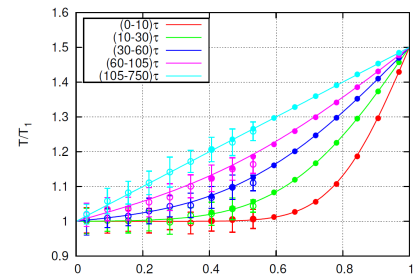
## Validation de l'approche

- 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



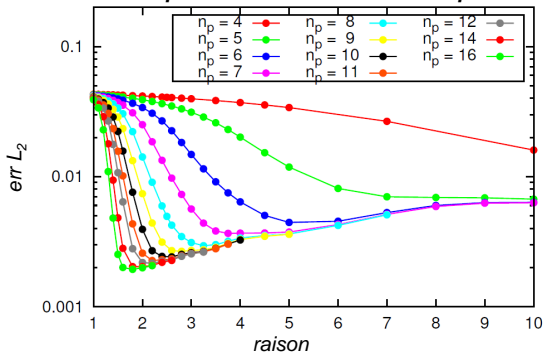
$\rho = 0,81 \text{ m}/\sigma$  (1360,8 kg/m<sup>3</sup>);  $u_0 = 1 \sigma/\tau$  (158 m/s);  $T = 1 \epsilon/k_B$  (120 K);  $H_{NS} = H_{DM} = 32,18 \sigma$  (10,95 nm);  $H = 51,49 \sigma$ ;  $\mu = 2,07 \sigma^2/\sqrt{m\epsilon}$ ;  $\lambda = 6,83 \sigma^2/\sqrt{m\epsilon/k_B}$ ;  $c_v = 2,19 \sigma^2/k_B$

## 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

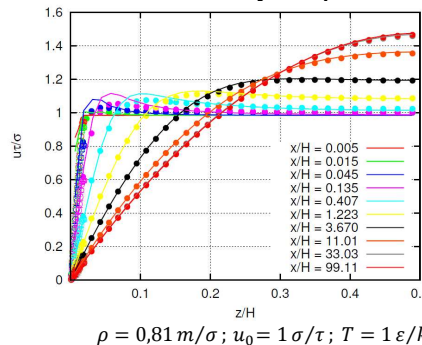


### Modèle hybride complet (avec DM) pour $H_{NS} = 25H_{DM}$ ; $n_p = 10$ ; $r_p = 3$

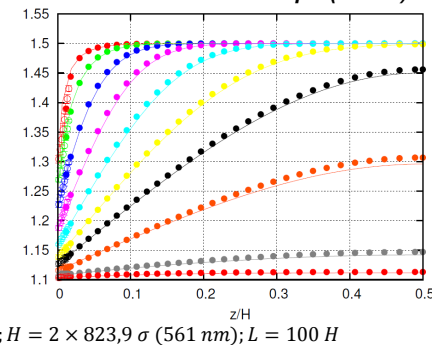
#### Conditions aux limites

- 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.