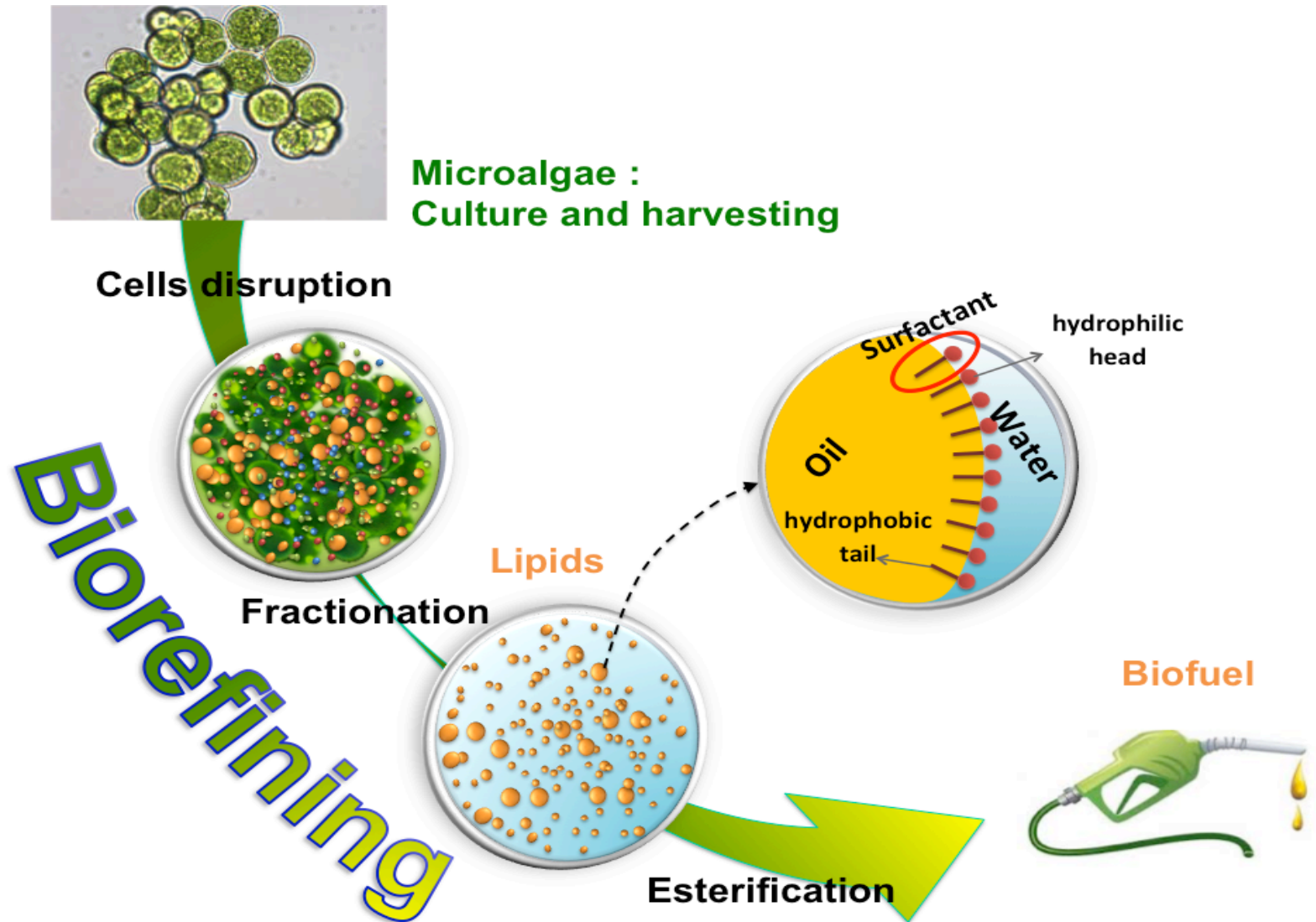


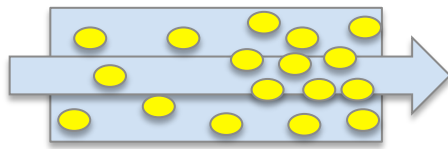
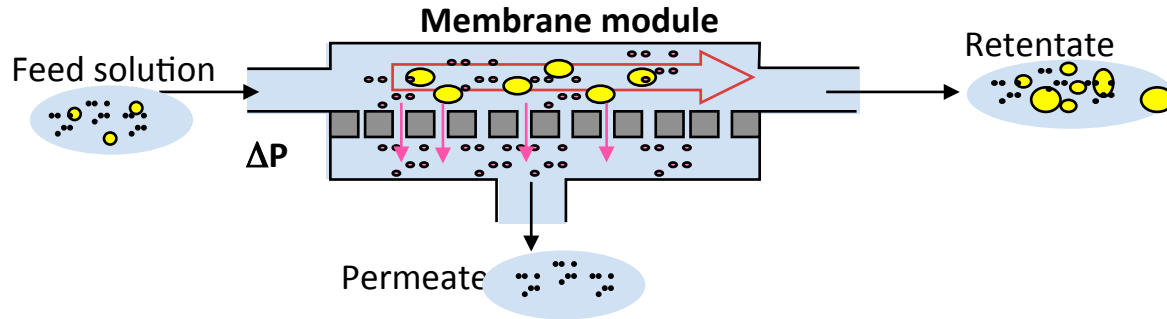
Simulation d'une interface entre
un mélange trioléine-acide oléique et l'eau:
analyse de la tension interfaciale
et de l'organisation des lipides.

Estelle Couallier, Bernard Rousseau

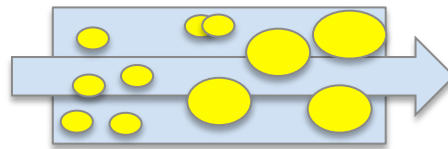




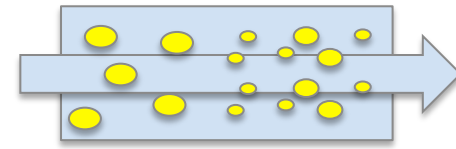
Contexte: Filtration membranaire



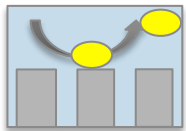
concentration



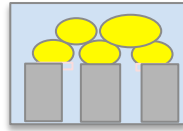
coalescence



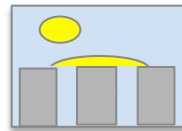
division



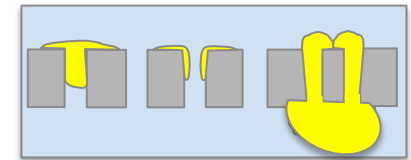
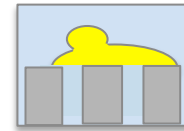
Adhésion
et détachement



Adhésion
accumulation
(avec/sans coalescence)



Adhésion, mouillage,
Coalescence
(interface déstabilisée)



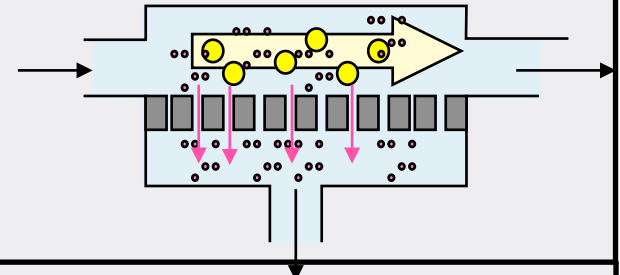
Adhésion, mouillage,
Pénétration dans le milieu poreux
(déstabilisation de l'interface
et pression)

Procédé

Echelle macroscopique

Essais de filtration membranaire

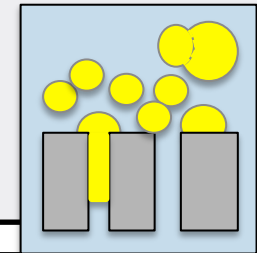
- de produits réels
- de mélanges modèles



Echelle microscopique (γ, θ)

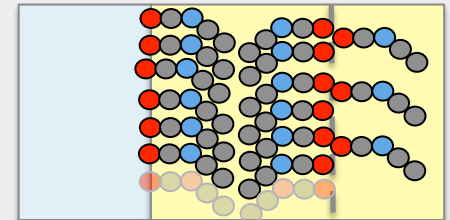
Identification des mécanismes limitant les performances du procédé:

- Accumulation des composés à la membrane (colmatage)
- Organisation des composés dans le mélange



Echelle nanoscopique

Etude de l'organisation des composés

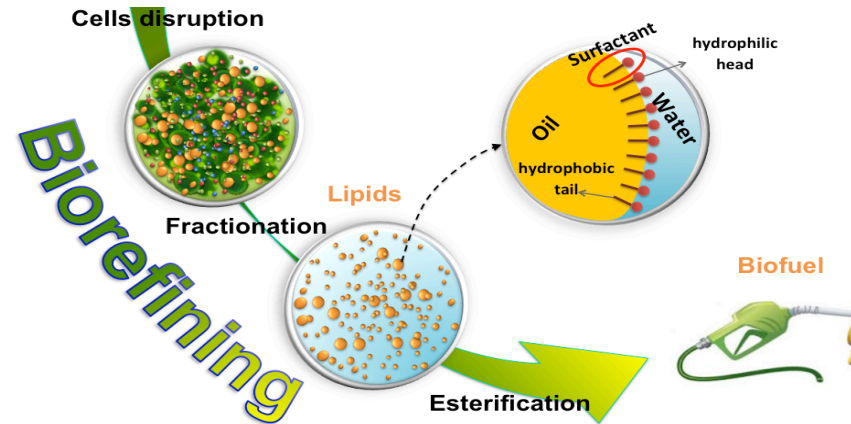


Contexte

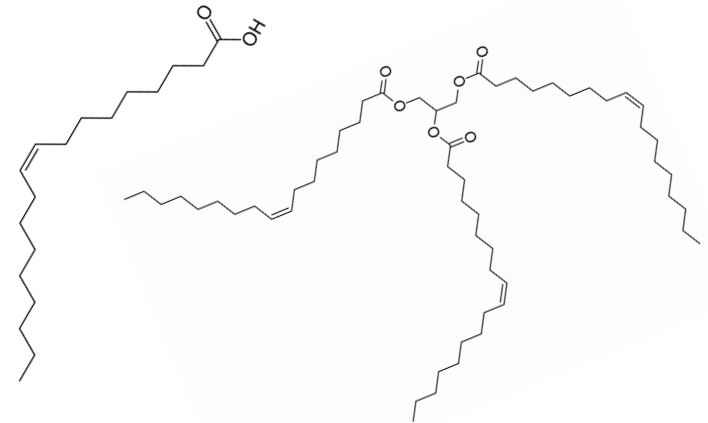
- **L'organisation des composés** aux interfaces L-L et L-S
→ paramètre clé pour les procédés de fractionnement
- **Simulation moléculaire:** un outil puissant pour évaluer l'impact :
 - de la structure moléculaire
 - de la composition des mélangessur l'organisation spatiale (ex: tensioactifs, lipides etc)

Objectif

- **Simuler une interface eau-huile**
≈ une interface / bioressources

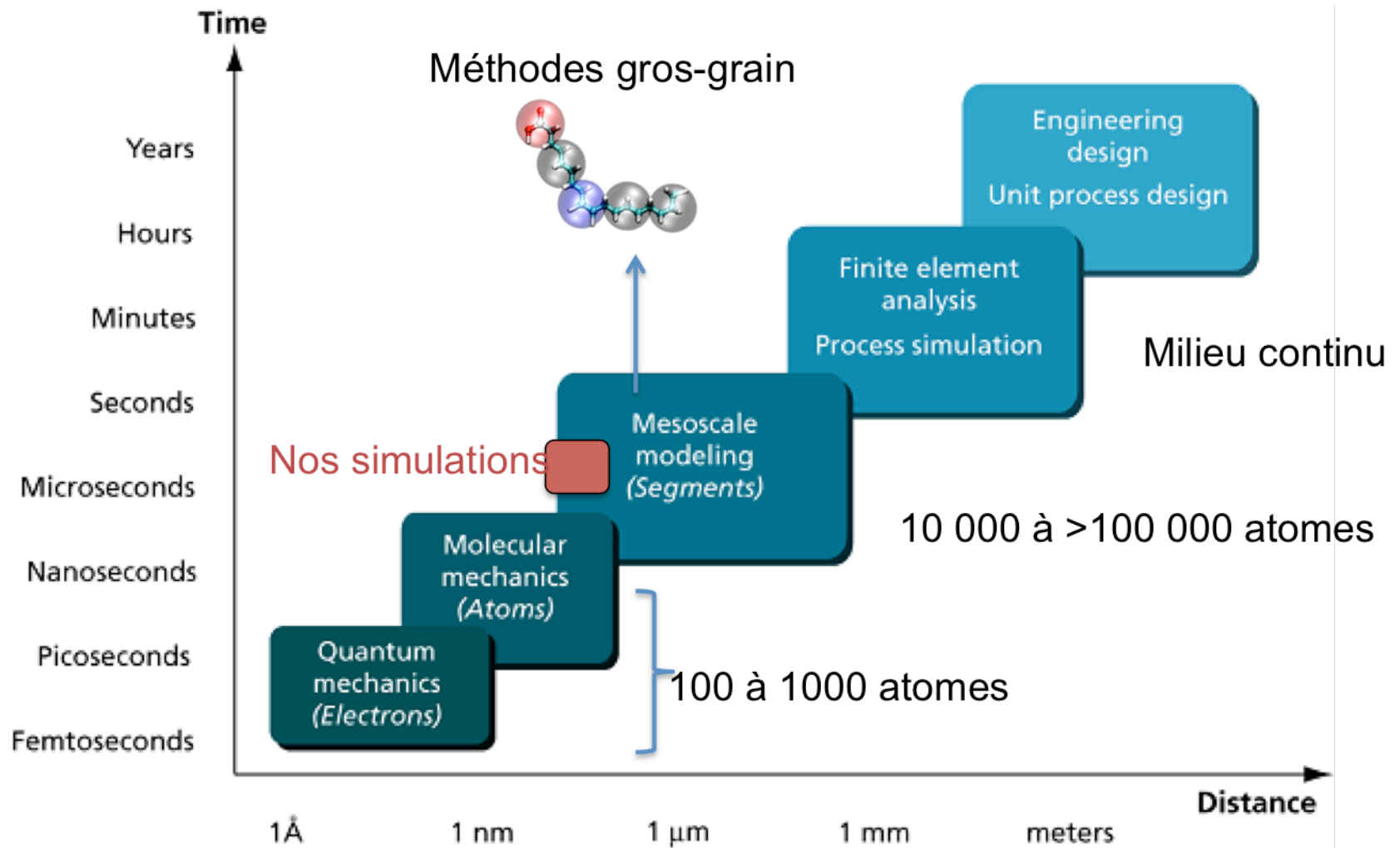


- **Molécules:**
 - acide oléique (OA)
 - Trioléine = glyceryltrioléate (GTO)

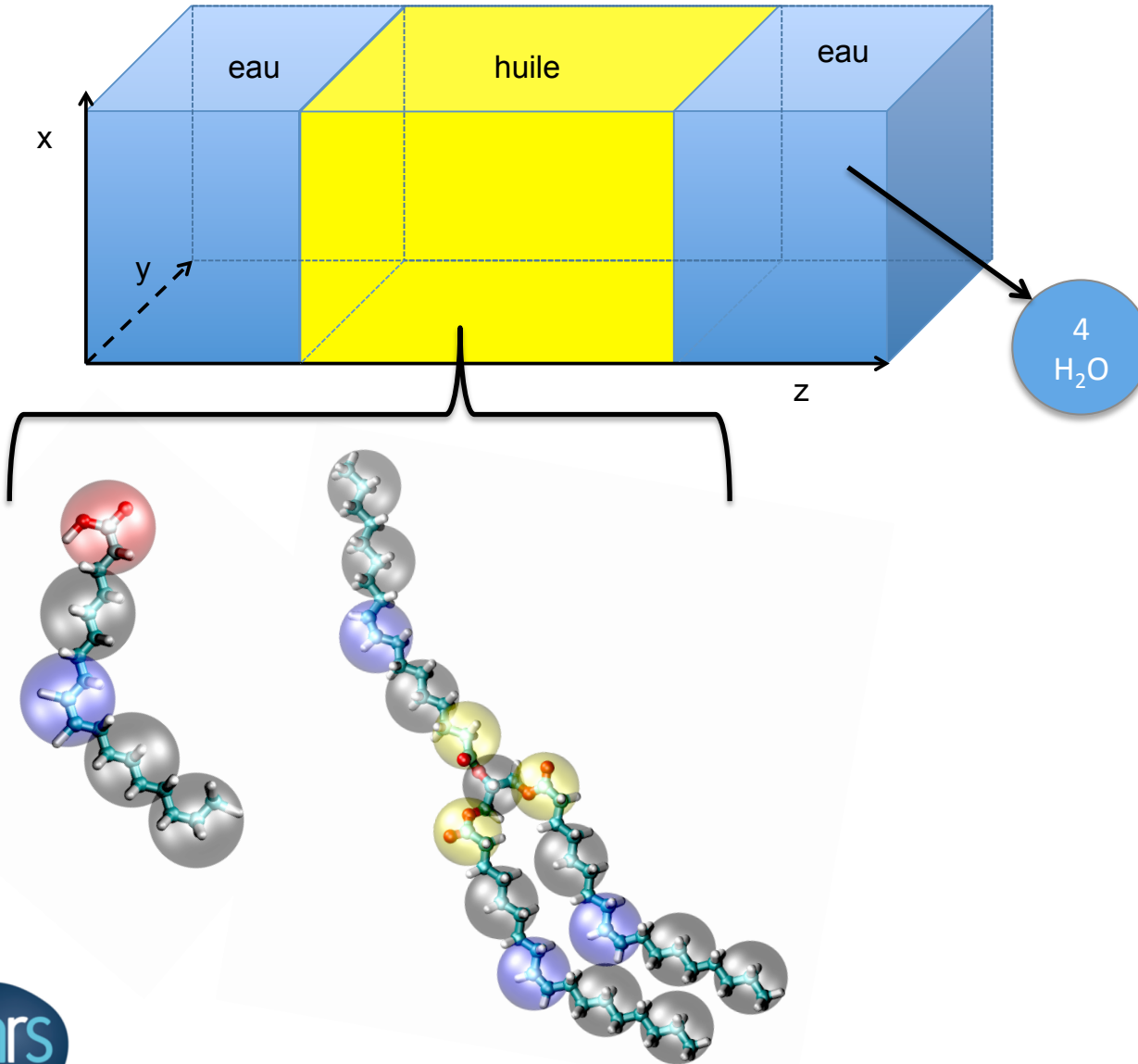


- **Dynamique moléculaire gros grain**
 - Calculer la tension interfaciale (valider le modèle)
 - Analyser de l'organisation

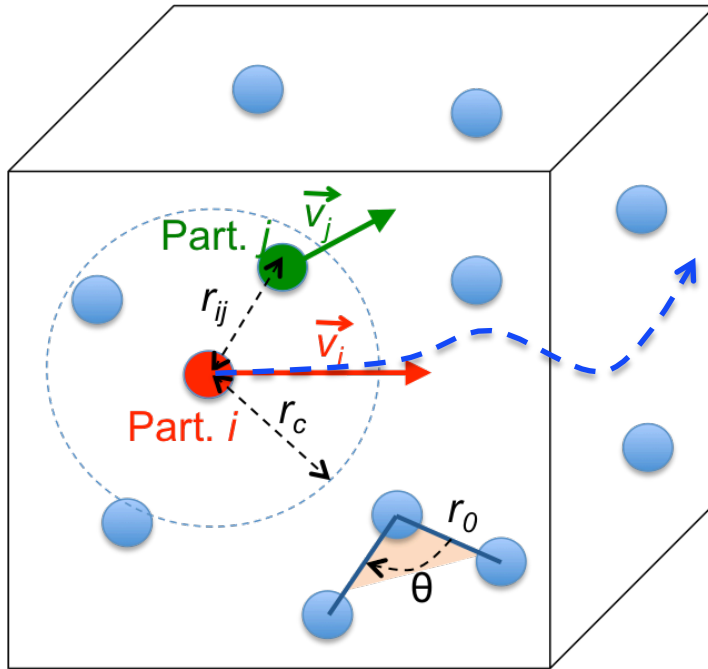
Méthode: choix de la méthode gros-grain



Méthode: construction de la boîte de simulation



Méthode: Dynamique Moléculaire Gros-Grain



2nd loi de Newton, équations du mouvement
Quantité de mouvement:

$$\frac{d\vec{p}_i}{dt} = \sum \vec{F}_{ext}$$

Forces déduites des potentiels d'interactions:

$$\phi_{ij}(r_{ij}) = 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$

$$U^l(r_{ij}) = \frac{1}{2}k_l(r_{ij} - r_0)^2$$

$$U^{angle}(\theta_{ijk}) = \frac{1}{2}k_{angle}(\cos \theta_{ijk} - \cos \theta_0)^2$$

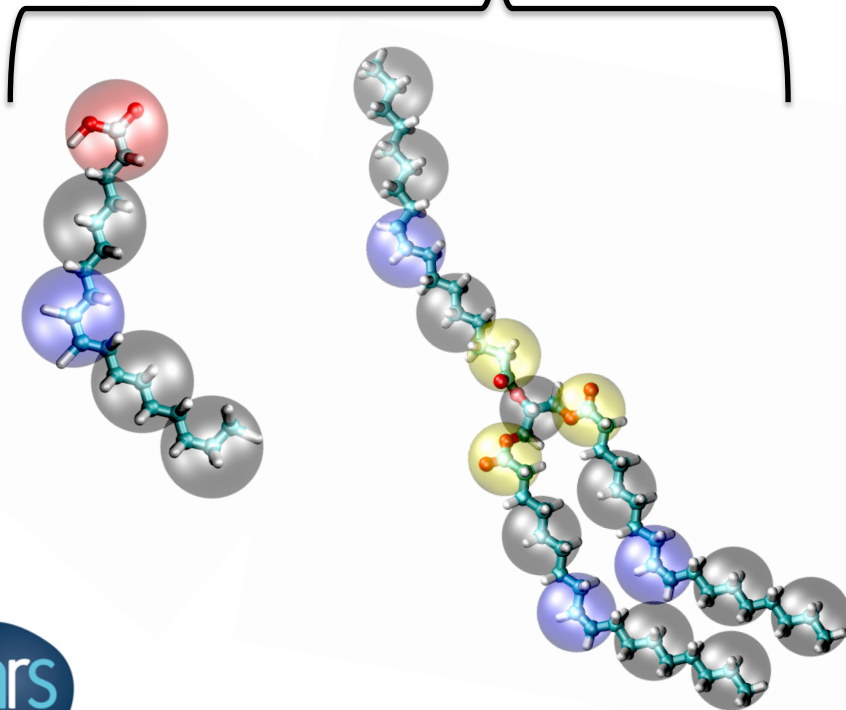
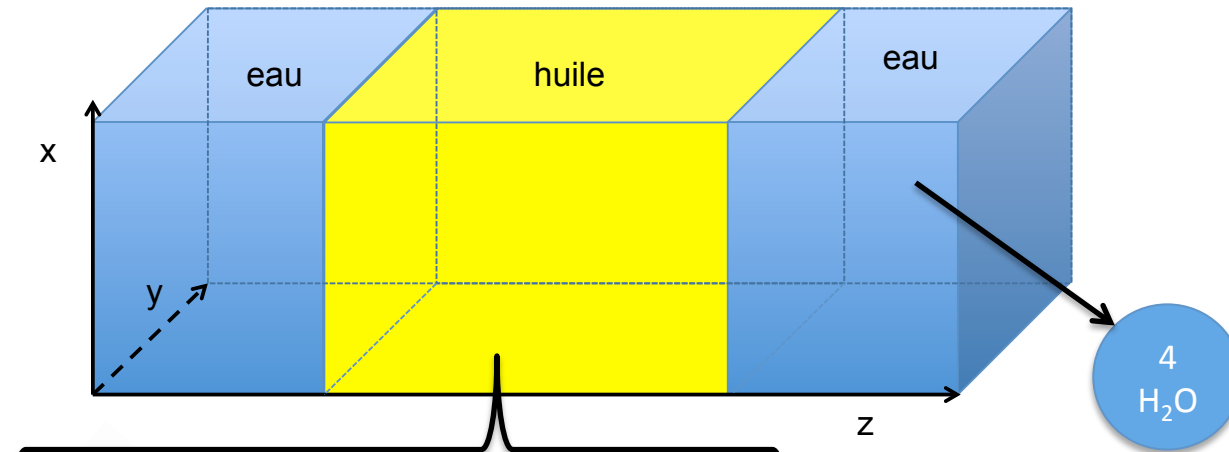
--->
Trajectoires (positions, vitesses):

Algorithme de Verlet (solution numérique pour la résolution des éq. diff)

Discrétisation / intégration des équations du mouvement

(pas de temps d'intégration)

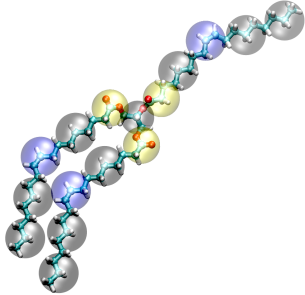
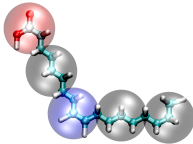
Méthode: paramètres de simulation



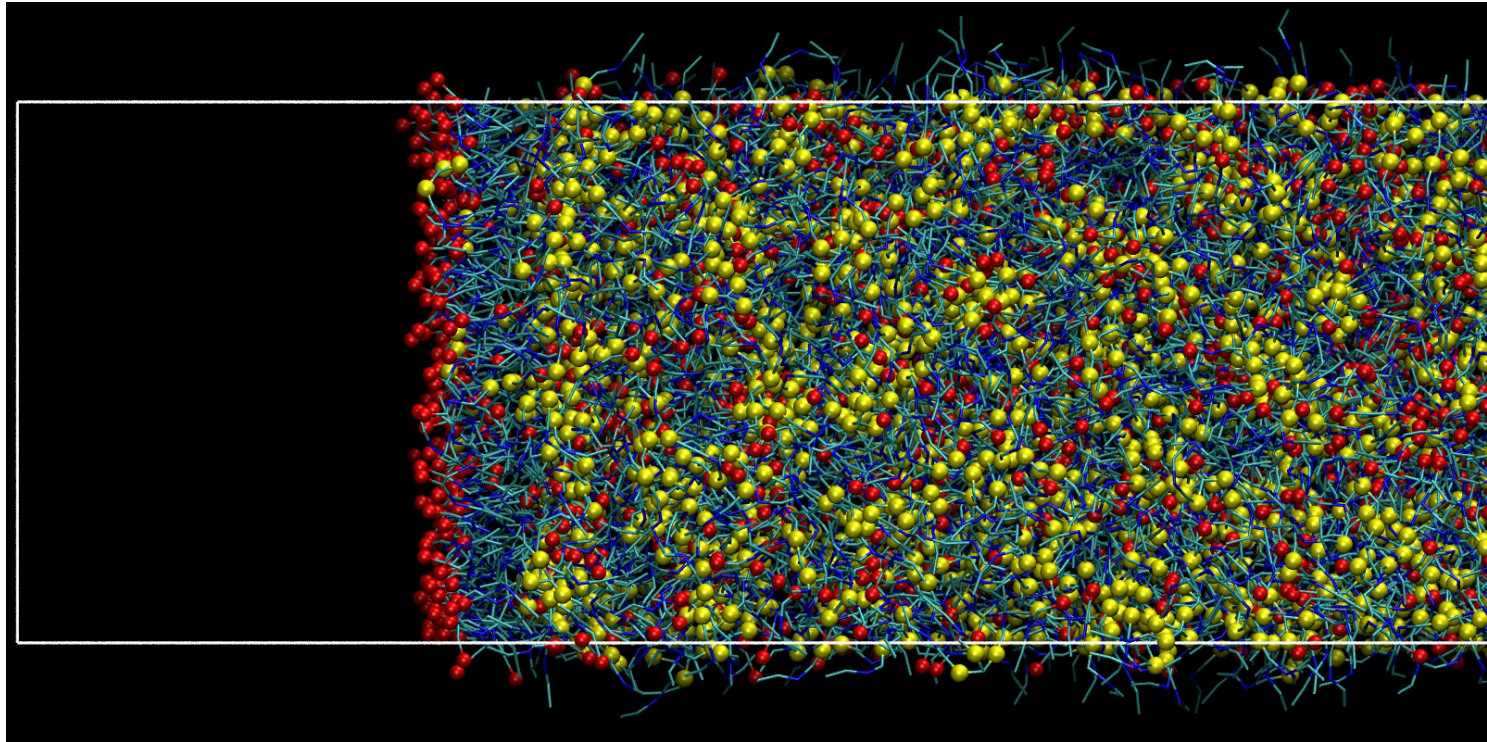
densité ρ	4
Rayon de coupure r_C	12 Å
Dimensions max de la boîte	107x107x465 Å ³
nombre de molécules d'eau	15 000
nombre de molécules organiques	1 000 – 6 000
nombres d'atomes lourds	max 135 000
température	300 K
Pas de temps	20 fs (20.10 ⁻¹⁵ s)
temps simulé	2 μ s (2.10 ⁻⁶ s)

- Champ de force
 - MARTINI (Marrinck 2004, 2007) (ϵ_{ij} , σ_{ij} , k_l , r_0 , k_{angle} , θ_0)
- Préparation des boîtes de simulation
 - Packmol
 - Newton (développé par le LCP)
- Simulations
 - LAMMPS
- Outils utilisés sur le CCIPL
 - Calculs réalisés sur Loire
 - Travail dans
 - smp-short (walltime 23:00:00)
 - smp-medium (walltime 80:00:00)
- 1 plaque 12 coeurs (Processus MPI sur chaque)
- 650h calcul / système → total: temps cpu: 100 000 h

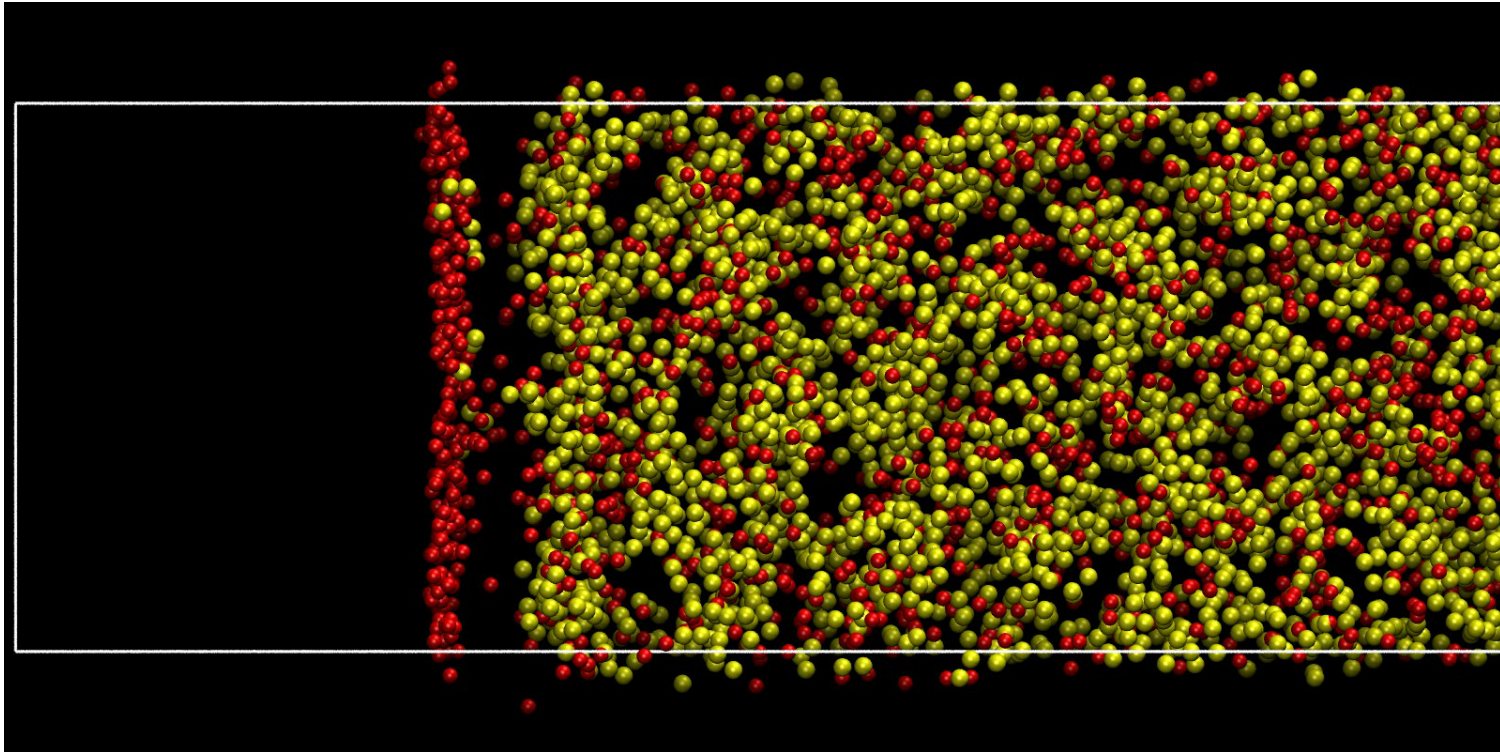
Systemes simulés

Système	n_{GTO}^0	n_{OA}^0	n_W^0	x_{OA}^0		
1	1874	0	15000	0	→	GTO pur 
2	1780	300	15000	0.144		
3	1686	600	15000	0.262		
4	1500	1200	15000	0.444		
5	1126	2400	15000	0.681		
6	938	3000	15000	0.762		
7	750	3600	15000	0.827		
8	374	4800	15000	0.928		
9	0	6000	15000	1	→	OA pur

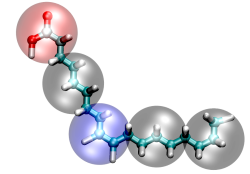
Résultats: système 5



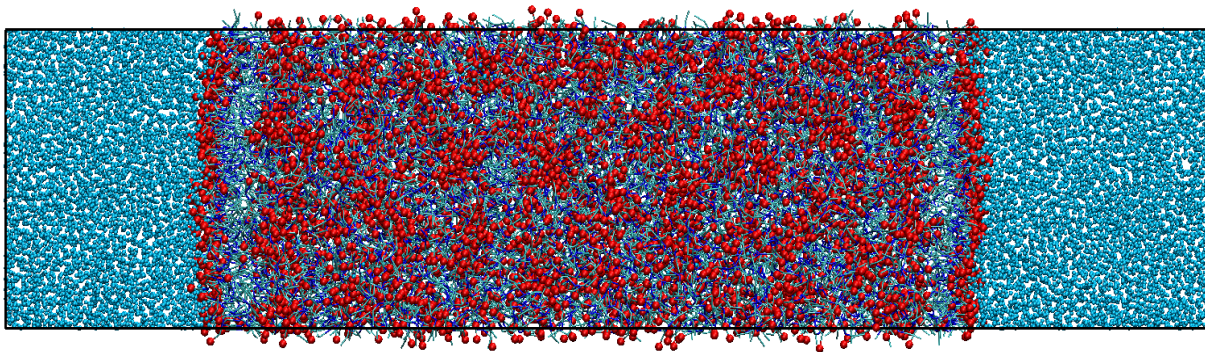
Résultats: système 5



Résultats: système 9



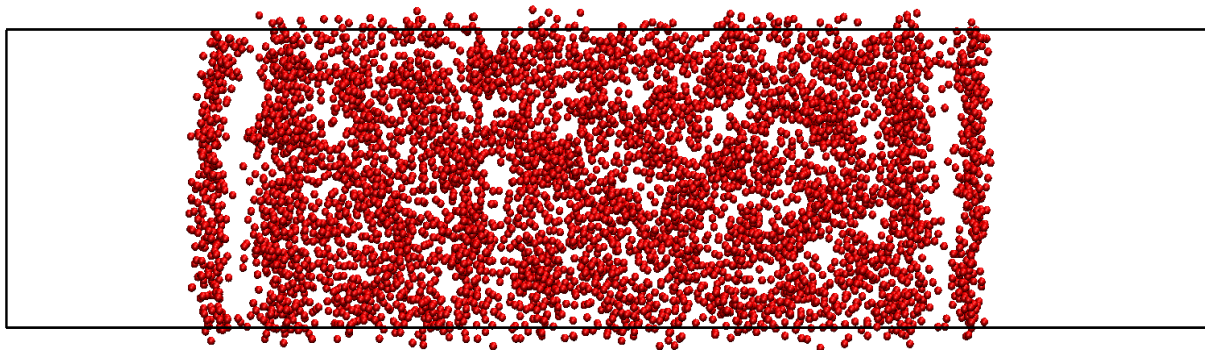
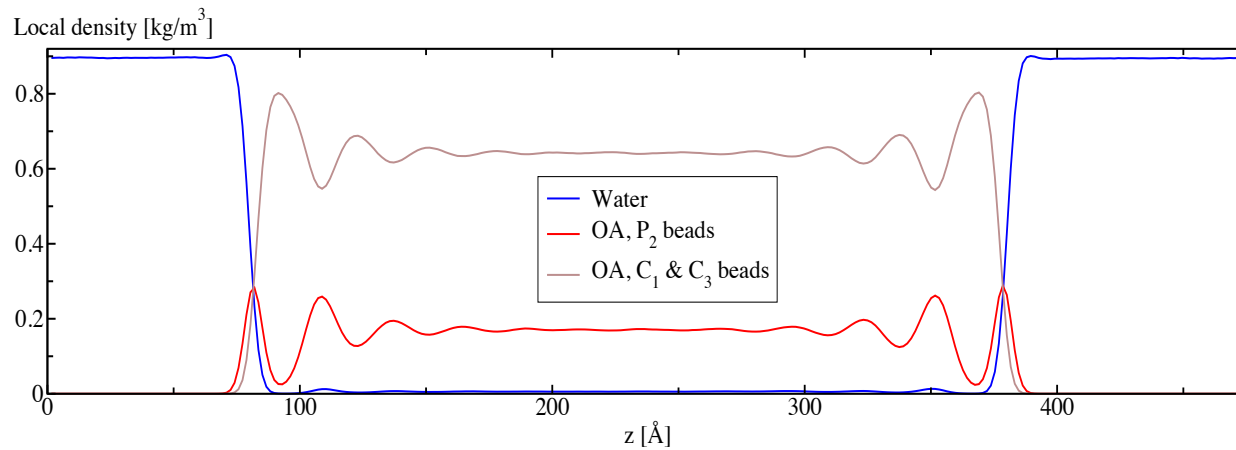
OA pur



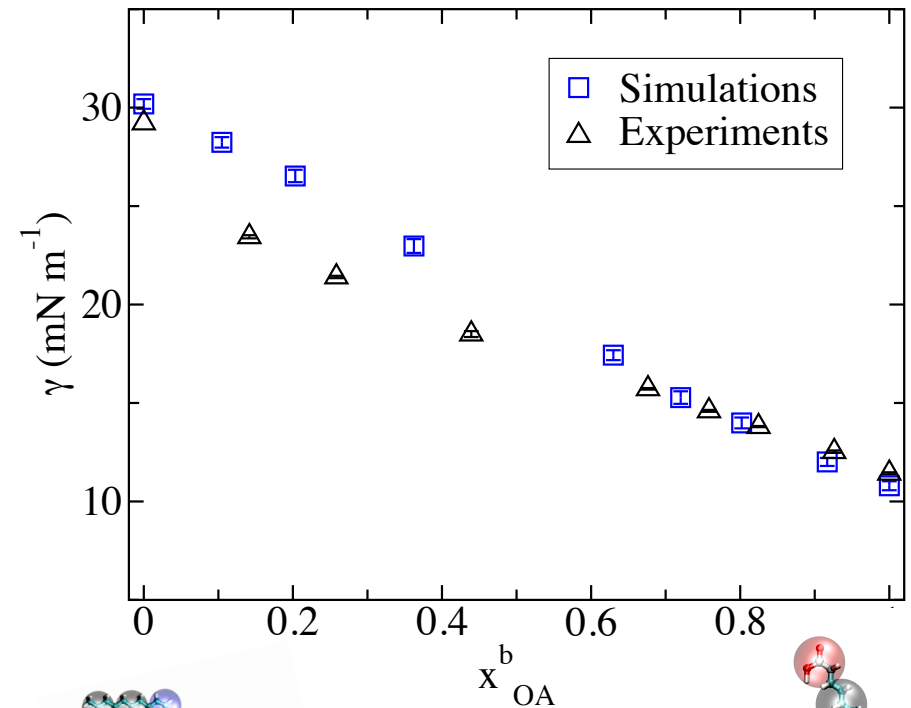
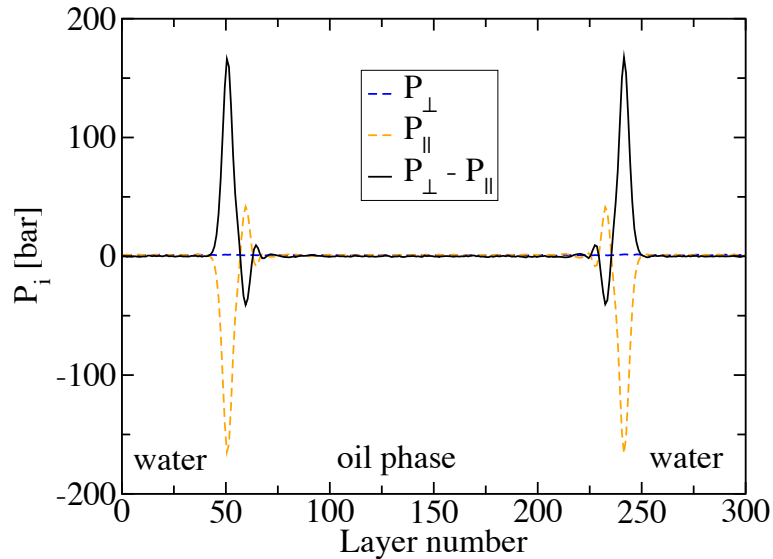
Profil de densités

Boîte: 300 couches de 1,56 Å d'épaisseur

Densité locale: masse par couche de particule i / volume de la couche (moyenne dans le temps)

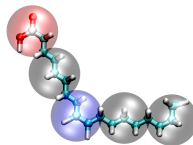
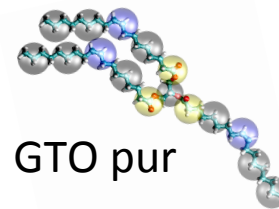


Résultats: tension interfaciale

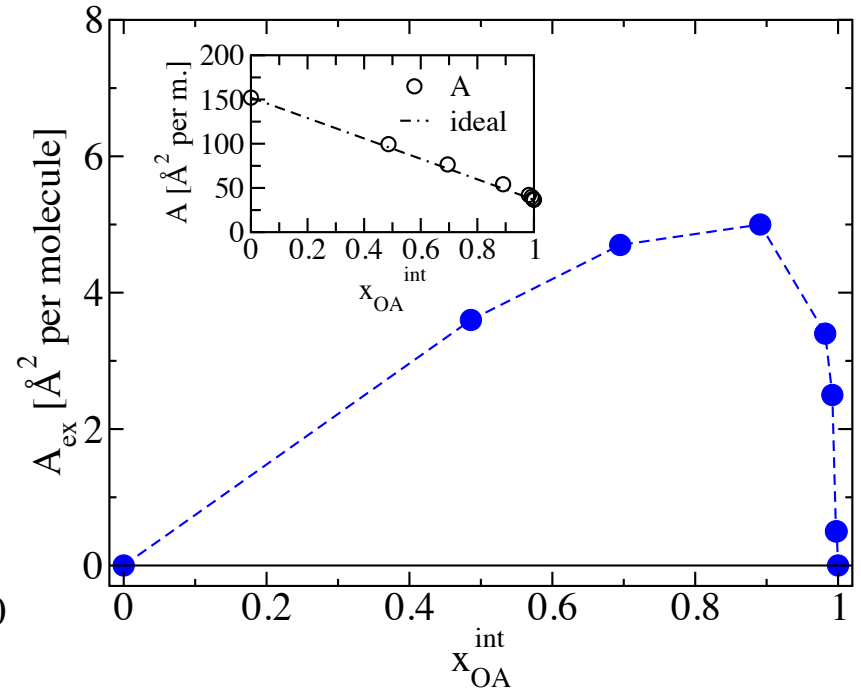
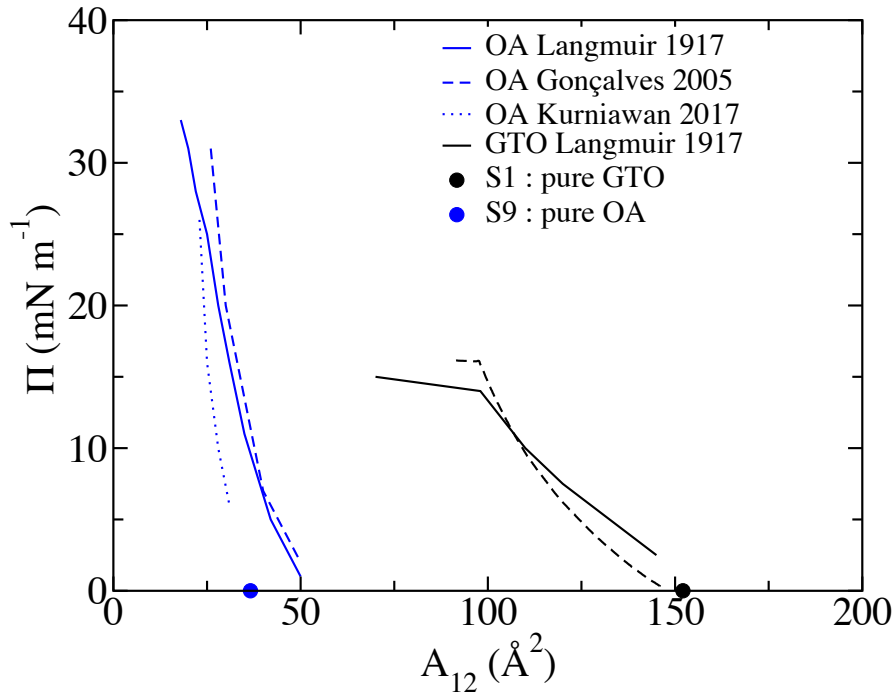
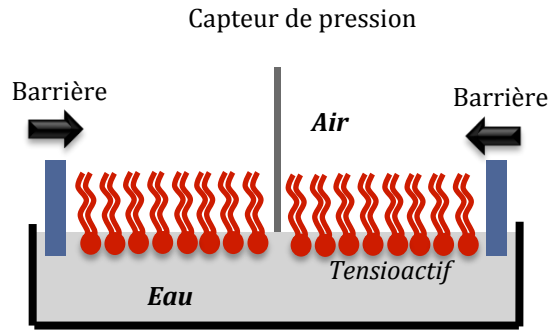


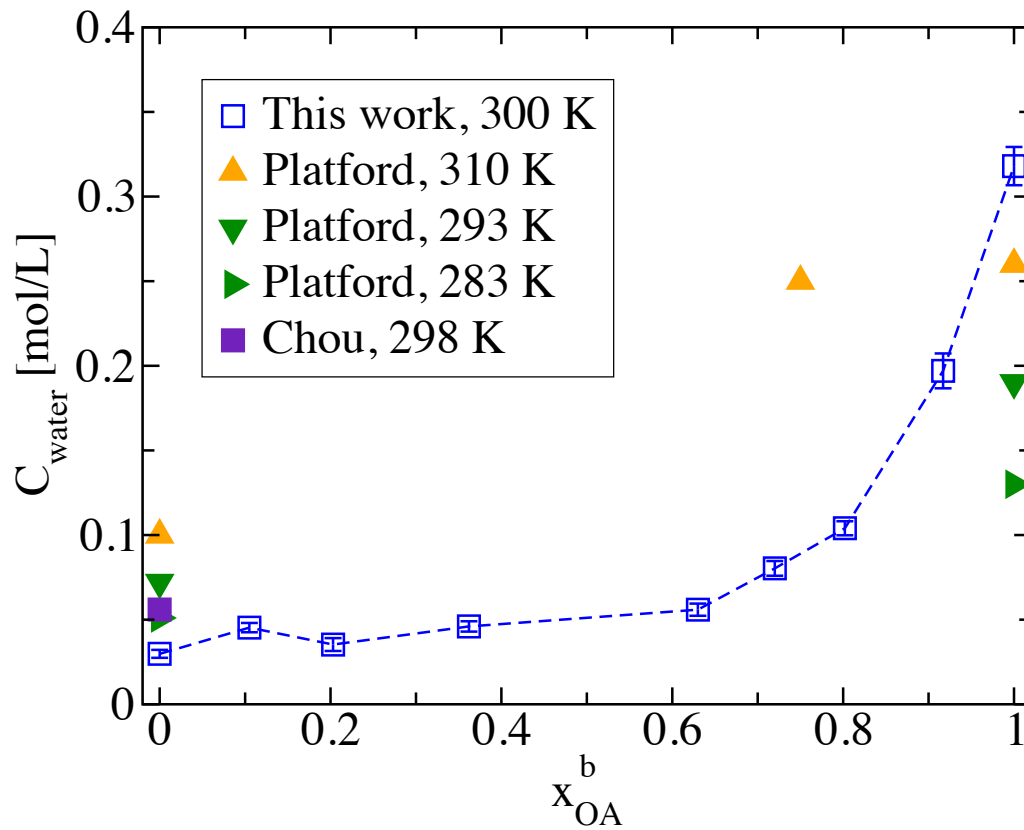
- boîte : 300 couches
- Calcul des contraintes exercées sur chaque élément de volume (tenseur de pression)
- Calcul de la tension interfaciale

$$\gamma_{IK} = \frac{1}{2} \int_0^L \left[\langle P_{\perp}(z) \rangle - \langle P_{\parallel}(z) \rangle \right] dz$$

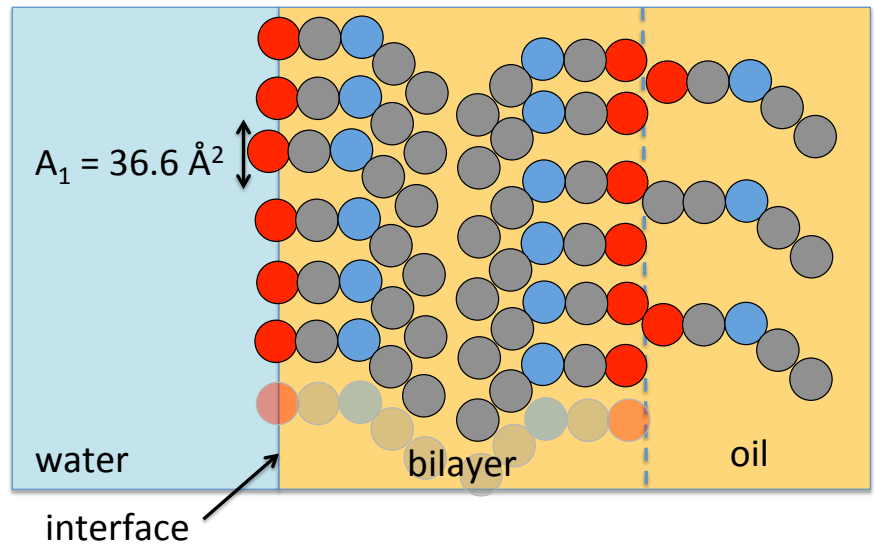
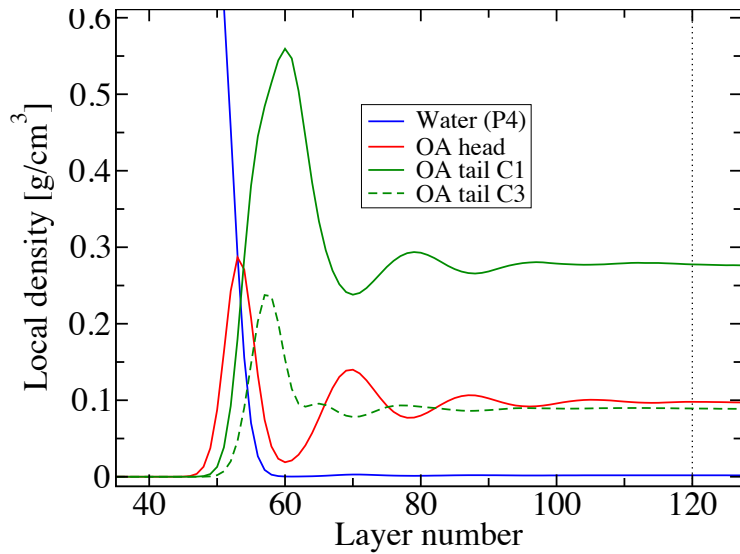
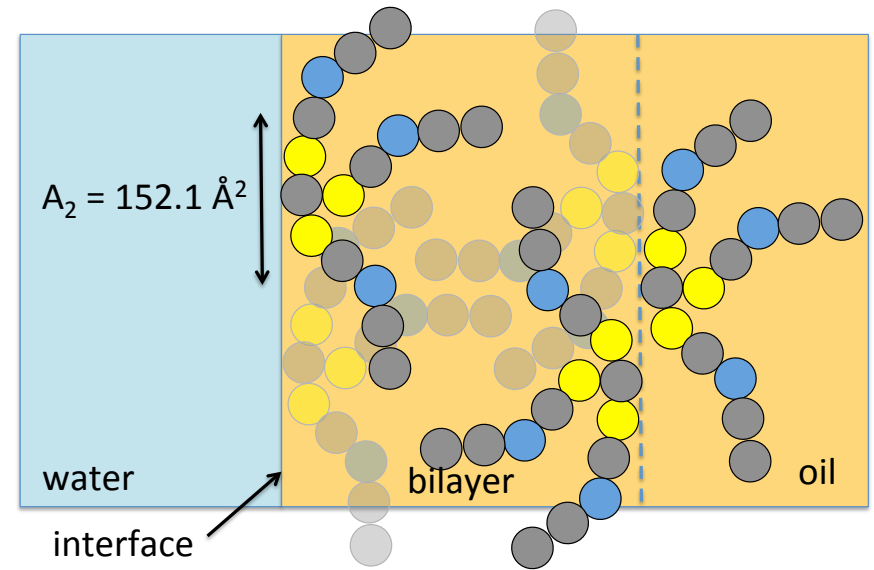
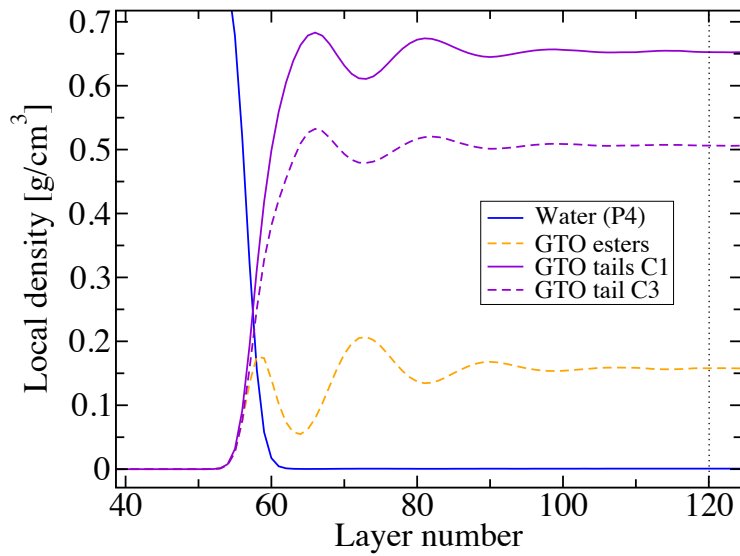


Résultats: aire occupée par molécule





Résultats: organisation des molécules à l'interface



- La simulation moléculaire permet:
 - De retrouver des valeurs expérimentales (tension interfaciale, aire moléculaire, solubilité de l'eau)
 - De décrire l'organisation des composés à l'interface huile-eau

- Projets :
 - Augmenter la complexité des mélanges: différentes chaînes carbonées, têtes polaires, différentes molécules (phospholipides, glycolipides) ...
 - Ajouter une phase solide (membrane)