



**HAL**  
open science

# Validité du modèle de saut du flux de conduction à la paroi pour un écoulement de gaz dans une micro-conduite

Dahia Chibouti, Benoît Trouette, Eric Chénier

► **To cite this version:**

Dahia Chibouti, Benoît Trouette, Eric Chénier. Validité du modèle de saut du flux de conduction à la paroi pour un écoulement de gaz dans une micro-conduite. Conférence internationale de la Société Française de la Thermique (SFT2020), Jun 2020, Belfort, France. 10.25855/SFT2020-110 . hal-02527913

**HAL Id: hal-02527913**

**<https://hal.science/hal-02527913>**

Submitted on 1 Apr 2020

**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.

# Validité du modèle de saut du flux de conduction à la paroi pour un écoulement de gaz dans une micro-conduite

## Jump model validity of the conductive heat flux at the wall for a gas flow in micro-channel

Dahia CHIBOUTI\*, Benoît TROUETTE, Eric CHÉNIER

Univ Gustave Eiffel, CNRS, MSME UMR 8208, F-77454 Marne-la-Vallée, France.

\*(auteur correspondant : dahia.chibouti@u-pem.fr)

**Résumé** - Dans les écoulements de gaz en micro-conduites, des conditions aux limites de glissement dynamique et de saut de température doivent être utilisées pour tenir compte du déséquilibre thermodynamique local rencontré au voisinage des interfaces fluide/solide. Dans ce travail, nous montrons par dynamique moléculaire qu'il existe également un saut dans le flux de chaleur de conduction, conformément aux travaux précurseurs de Maslen [1].

**Mots-clés** : Transferts thermiques ; Micro-conduite ; Microfluidique ; Gaz raréfié ; Glissement.

**Abstract** - In micro-channel gas flows, velocity slip and temperature jump must be applied at the fluid/solid interface for accounting to the thermodynamic non-equilibrium in the vicinity of the wall. In this work, simulations at molecular scale have been carried out and show a jump in the conductive heat flux, in agreement with Malsen's work [1].

**Keywords**: Heat transfer; Micro-channel; Microfluidics; Rarefied gas; Slip flow.

### Nomenclature

#### *Symboles romains*

$\mathbf{f}$	vecteur force, N
$h$	enthalpie massique, J/kg
$k$	conductivité thermique, W/m/K
$m$	masse, kg
$\mathbf{r}$	vecteur position, m
$\dot{\mathbf{r}}$	vecteur vitesse, m/s
$\ddot{\mathbf{r}}$	vecteur accélération, m/s <sup>2</sup>
$r_c$	rayon de coupure, m
$\mathbf{q}$	flux de chaleur, W/m <sup>2</sup>
$T$	température, K
$t$	temps, s
$U$	potentiel, J
$\mathbf{u}$	vecteur vitesse macroscopique, m/s

#### *Symboles grecs*

$\Delta t$	pas de temps, s
$\varepsilon$	énergie minimale, J
$\lambda$	libre parcours moyen, m
$\rho$	masse volumique, kg/m <sup>3</sup>
$\sigma$	diamètre atomique, m
$\bar{\tau}$	tenseur de contrainte, N/m <sup>2</sup>
$\mu$	viscosité dynamique, kg/m/s

#### *Indices et exposants*

$x, y, z$	directions de l'espace
$i, j$	particules
$\alpha, \beta$	nature des particules
$s$	solide
$f$	fluide

## 1. Introduction

Dans les systèmes de taille micrométrique, le nombre de Knudsen  $Kn = \lambda/L$ , défini comme le rapport entre la distance moyenne  $\lambda$  parcourue par les molécules du gaz entre deux collisions et la longueur caractéristique  $L$  de l'écoulement, permet de mesurer le niveau de raréfaction du milieu fluide. Pour  $Kn$  suffisamment petit, généralement  $Kn < 0,001$ , l'écoulement fluide peut être complètement modélisé par un milieu continu. Pour  $0,001 < Kn < 0,1$ , l'équilibre thermodynamique du gaz au voisinage des parois (dans la couche de Knudsen) n'est plus vérifié. La continuité de la vitesse et de la température du gaz à l'interface avec le solide n'est plus valable et il faut recourir à des modèles basés sur les échelles moléculaires pour traduire le glissement du fluide ainsi que le saut de température.

Alors que les discontinuités portant sur la vitesse et la température sont très largement admises et utilisées dans la communauté "microfluidique gazeuse", l'acceptation et la prise en compte d'une condition de saut de flux de chaleur par conduction sont plus variables. En effet, bien qu'introduite en 1958 par Maslen [1], cette discontinuité du flux de chaleur a depuis lors été souvent négligée ou mal comprise, y compris dans des études récentes. En s'appuyant sur les travaux de Hong et Asako [2] et le principe de conservation du flux total d'énergie, Nicolas *et al.* [3] ont retrouvé la condition de Maslen [1] qui traduit que le saut du flux de chaleur est égal à la densité surfacique de puissance produite par les contraintes visqueuses engendrées par le glissement du fluide à la paroi. Cependant, l'approche utilisée dans ces travaux est discutable car elle repose sur l'hypothèse de la mécanique des milieux continus qui n'est formellement plus applicable au voisinage de la paroi, c'est-à-dire dans la couche de Knudsen.

La présente contribution vise à vérifier si le modèle présenté récemment par Nicolas *et al.* [3], basé sur la condition de flux de Malsen [1] dans le cadre des milieux continus, est correct. Afin de s'affranchir d'une modélisation continue au voisinage des parois, pour laquelle l'équilibre thermodynamique n'est plus vérifié, des simulations à l'échelle moléculaire ont été effectuées.

## 2. Approche milieux continus

Considérons de l'argon sous forme gazeuse confiné entre deux murs parallèles de platine distants de  $H$  (Fig. 1). Le fluide est mis en mouvement sous l'action de la force extérieure

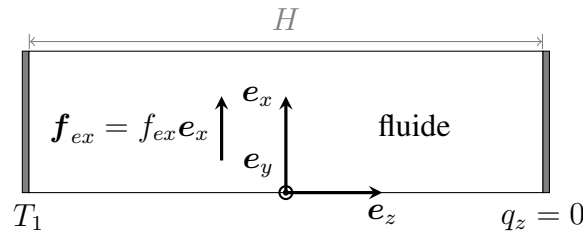


Figure 1 : Configuration du problème. Le mur de gauche est à une température  $T_1$  et le mur de droite est adiabatique  $q_z = 0$ .

constante  $f_{ex}$ . Les parois des murs situées en  $z = -H/2$  et  $z = +H/2$  sont respectivement à la température  $T_1$  et adiabatique  $q_z = 0$ . Du point de vue des milieux continus, le flux total d'énergie  $\mathbf{q}_{tot}^{(mmc)}$  se divise en trois contributions [3] :

$$\mathbf{q}_{tot}^{(mmc)} = \mathbf{q}_k + \mathbf{q}_\mu + \mathbf{q}_h = -k_f \nabla T - (\bar{\bar{\tau}} \cdot \mathbf{u}) + \rho h \mathbf{u} \quad (1)$$

où  $\mathbf{q}_k = -k_f \nabla T$  est le flux de chaleur de conduction,  $\mathbf{q}_\mu = -(\bar{\bar{\tau}} \cdot \mathbf{u})$  est la densité surfacique de puissance due à la dissipation visqueuse et  $\mathbf{q}_h = \rho h \mathbf{u}$  est le flux convectif d'enthalpie. À une

paroi imperméable, le flux d'enthalpie est nul et le flux total d'énergie se réduit donc à deux termes, comme proposé dans la formulation de Maslen [1]. Ainsi, le flux de chaleur transmis par conduction thermique dans le mur solide doit vérifier à l'interface fluide/solide  $z = \pm H/2$  :

$$-k_f \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_f - u_x \mu \left. \frac{\partial u_x}{\partial z} \right|_f = -k_s \left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_s \quad (2)$$

Afin de vérifier la validité de cette relation dans la couche de Knudsen, des simulations sont conduites à l'échelle moléculaire.

### 3. Approche moléculaire

#### 3.1. Formulation physique

La dynamique des atomes, ceux d'argon, confinés entre les murs d'épaisseur  $e/2$  ou ceux de platine, disposés sur un réseau cubique faces centrés (CFC) et composant les murs, repose sur l'équation classique du mouvement de Newton. La trajectoire de chaque atome (ou particule)  $i$  est gouvernée par la relation :

$$\mathbf{f}_i = m_i \ddot{\mathbf{r}}_i \quad (3)$$

où  $\ddot{\mathbf{r}}_i$  est le vecteur accélération de la particule  $i$  et  $m_i$  sa masse. La résultante des forces extérieures  $\mathbf{f}_i$  s'appliquant sur la particule  $i$  s'exprime sous  $\mathbf{f}_i = -\nabla [\mathbf{f}_{ex} \cdot \mathbf{r}_i + \sum_j U_{\alpha/\beta}(r_{ij})]$  pour un atome d'argon et  $\mathbf{f}_i = -\sum_j \nabla [U_{\alpha/\beta}(r_{ij})]$  pour un atome de platine. Dans ces expressions,  $\mathbf{r}_i$  représente la position de la particule  $i$ ,  $\mathbf{f}_{ex}$  désigne la force qui assure le mouvement moyen des particules du gaz (l'écoulement) et  $U_{\alpha/\beta}(r_{ij})$  est le potentiel d'interaction de paire exprimé par le modèle de Lennard-Jones [4] :

$$U_{\alpha/\beta}(r_{ij}) = 4\varepsilon_{\alpha/\beta} \left[ \left( \frac{\sigma_{\alpha/\beta}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{\alpha/\beta}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (4)$$

où  $\alpha$  et  $\beta$  indiquent la nature des particules (argon ou platine),  $r_{ij} = \|\mathbf{r}_{ij}\| = \|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i\|$  est la distance intermoléculaire entre les particules  $i$  et  $j$ ,  $\varepsilon_{\alpha/\beta}$  représente la profondeur du puits d'énergie à son minimum et  $\sigma_{\alpha/\beta}$  est la distance pour laquelle le potentiel s'annule. En prenant l'argon comme référence (Tab. 1), les paramètres des potentiels pour les couples Ar/Ar, Pt/Pt, Ar/Pt s'expriment en unité réduite  $\varepsilon_{Ar/Ar}/\varepsilon = 1$ ,  $\sigma_{Ar/Ar}/\sigma = 1$ ,  $\varepsilon_{Pt/Pt}/\varepsilon = 31,3$ ,  $\sigma_{Pt/Pt}/\sigma = 0,73$ ,  $\varepsilon_{Ar/Pt}/\varepsilon = 0,953$  et  $\sigma_{Ar/Pt}/\sigma = 0,906$  et les masses  $m_{Ar/Ar}/\bar{m} = 1$  et  $m_{Pt/Pt}/\bar{m} = 4,8833$ .

Le flux total d'énergie  $\mathbf{q}_{tot}^{(dm)}$  est exprimé par la formulation de Irving-Kirkwood [4, 5] :

$$\mathbf{q}_{tot}^{(dm)}(x, y, z) = \frac{1}{2V(x, y, z)} \sum_{i|\mathbf{r}_i \in V(x, y, z)} \left( m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 \dot{\mathbf{r}}_i + \sum_{\substack{j|j \neq i \\ \mathbf{r}_j \in V(x, y, z)}} U_{ij} \dot{\mathbf{r}}_i \right) - \frac{1}{2V(x, y, z)} \sum_{i|\mathbf{r}_i \in V(x, y, z)} \left( \sum_{\substack{j|j \neq i \\ \mathbf{r}_j \in V(x, y, z)}} \mathbf{r}_{ij} [\mathbf{f}_{ij} \cdot \dot{\mathbf{r}}_i] \right) \quad (5)$$

où  $V(x, y, z)$  désigne un volume du fluide centré aux coordonnées  $(x, y, z)$  et dans lequel le flux est calculé. Comme seule la direction  $z$  est prise en compte, la notation  $q_{tot}^{(dm)} = \mathbf{q}_{tot}^{(dm)} \cdot \mathbf{e}_z$  est adoptée dans ce qui suit.

Échelle	Expression	Valeur	
masse (argon)	$\bar{m}$	$6,633 \times 10^{-26}$	kg
longueur	$\sigma$	$3,405 \times 10^{-10}$	m
énergie	$\varepsilon$	$1,656 \times 10^{-21}$	J
temps, $t_0$	$\sqrt{\bar{m}\sigma^2/\varepsilon}$	$2,155 \times 10^{-12}$	s
température, $T_0$	$\varepsilon/k_B$	120	K
vitesse, $v_0$	$\sqrt{\varepsilon/\bar{m}}$	158,03	m/s
masse volumique, $\rho_0$	$\bar{m}/\sigma^3$	1680,31	kg/m <sup>3</sup>
force, $f_0$	$\varepsilon/\sigma$	$4,86 \times 10^{-12}$	N
viscosité, $\mu_0$	$\sqrt{\bar{m}\varepsilon}/\sigma^2$	$9,0345 \times 10^{-5}$	kg/m/s
conductivité, $k_0$	$k_B\sqrt{\varepsilon/\bar{m}}/\sigma^2$	0,0188	W/m/K
densité de flux, $q_0$	$\sqrt{\varepsilon^3/\bar{m}}/\sigma^3$	$6,62 \times 10^9$	W/m <sup>2</sup>

Tableau 1 : Échelles physiques, expressions et valeurs utilisées dans les simulations par dynamique moléculaire (l'argon est pris comme référence).

### 3.2. Méthodes numériques

Afin d'imposer un flux d'énergie nul à l'interface entre le mur de platine et le gaz d'argon, la conduite fluide est dupliquée par symétrie par la direction  $z$ . Des conditions de périodicité sont également appliquées dans toutes les directions de l'espace pour éviter des effets de bords de domaine (Fig. 2). Lorsque deux particules deviennent très éloignées les unes des autres, leur

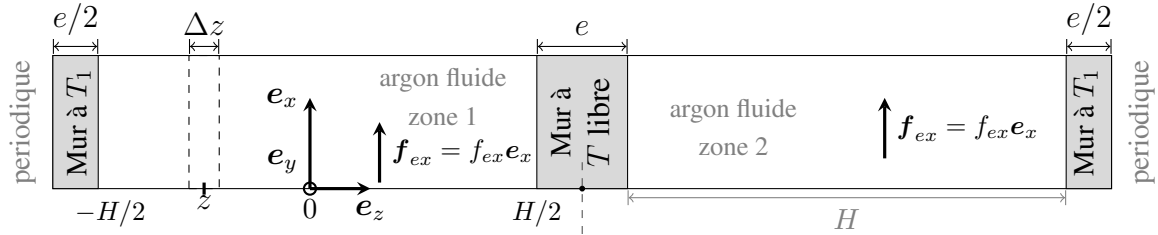


Figure 2 : Configuration de la boîte de simulation. Le mur 1 est contrôlé à une température fixe  $T_1$  tandis que le mur 2 est laissé à température libre. Les fluides dans les zones 1 et 2 possèdent des propriétés identiques.

potentiel d'interaction devient négligeable dans l'énergie totale à laquelle est soumise chacune des deux particules. Ainsi pour réduire le coût de calcul, un rayon de coupure  $r_c$  est classiquement introduit pour tronquer une partie de l'énergie contenue dans le potentiel d'interaction [4]. Le potentiel est donné par l'Eq. (4) si  $r_{ij} \leq r_c$  et s'annule dans le cas contraire.

La boîte de simulation est de dimension  $\ell_x \times \ell_y \times 2(H + e)$ . Les longueurs  $\ell_i$ ,  $i = x, y$ , sont des multiples du pas du réseau cristallin de platine et doivent satisfaire la contrainte  $\ell_i \geq 3 \times r_c$  pour la gestion du voisinage de chaque particule. L'épaisseur  $e$  du mur doit être un multiple du pas du réseau de platine et vérifier  $e \geq r_c$  afin que les particules contenues dans chacun des canaux n'interagissent pas entre elles. La température du mur isotherme est maintenue à  $T_1$  par l'ajout d'une force dans l'équation du mouvement des particules de platine ; cette force est définie par le thermostat de Langevin [6]. L'algorithme de Verlet-vitesse [4] a été utilisé pour intégrer les équations du mouvement (Eq. (3)) :

$$\begin{cases} \mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \dot{\mathbf{r}}_i(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \ddot{\mathbf{r}}_i(t) \\ \dot{\mathbf{r}}_i(t + \Delta t) = \dot{\mathbf{r}}_i(t) + \frac{1}{2} \Delta t [\ddot{\mathbf{r}}_i(t) + \ddot{\mathbf{r}}_i(t + \Delta t)] \end{cases} \quad (6)$$

où  $\Delta t$  est le pas de temps et  $\dot{r}_i$  la vitesse de la particule  $i$ . En pratique,  $\Delta t/t_0 = 5 \times 10^{-3}$ . Cet algorithme permet d'assurer une bonne conservation de l'énergie totale ainsi que de la quantité de mouvement sur des temps d'intégration suffisamment longs. Le flux d'énergie (Eq. (5)), ainsi que les autres grandeurs macroscopiques sont calculés par des méthodes de prise de moyenne dans des tranches de volume  $V(z) = [0; \ell_x] \times [0; \ell_y] \times [z - \Delta z/2; z + \Delta z/2]$ . Une méthode de moyenne de blocs [4] a été utilisée afin d'extraire un écart type à la moyenne.

## 4. Résultats

A l'exception de la dernière section, les simulations ont été effectuées pour un fluide de densité  $\rho/\rho_0 = 0,6$ , une température  $T_1/T_0 = 1,5$ , une épaisseur  $e/\sigma = 5,17$  et une dimension de canal  $H/\sigma = 19,87$ . Le nombre de Knudsen  $Kn = \lambda/(2H) \approx 3.6 \times 10^{-2}$  est construit avec la formulation du libre parcours moyen de Cercignani [7] :

$$\lambda = \frac{\mu}{\rho} \sqrt{\frac{\pi \bar{m}}{2k_B T}} \quad (7)$$

où,  $k_B = 1,3807 \times 10^{-23}$  J/K, est la constante de Boltzmann et  $\mu$  est la viscosité dynamique issue des corrélations de Galliéro *et al.* [8]. Les nombres de Knudsen parcourus étant compris entre  $10^{-3}$  et  $10^{-1}$ , les simulations correspondent à des écoulements dans les régimes continu et de glissement à l'interface fluide/solide.

### 4.1. Analyse des grandeurs macroscopiques

Dans cette section, la force externe qui s'applique au gaz varie de  $f_{ex}/f_0 = 0$  (pas d'écoulement) à 0,02. Les grandeurs macroscopiques (grandeurs moyennes) normalisées de la vitesse, masse volumique, température et flux d'énergie ont été calculées à partir des vitesses et positions des particules à l'échelle moléculaire et tracées sur la figure 3.

La figure 3(a) présente les profils de vitesse  $u_x(z)/v_0$ . L'intensification de la force de volume appliquée sur les particules fluides engendre une augmentation de la vitesse et du glissement à l'interface fluide/solide. En utilisant comme échelle de référence la vitesse maximale, ces différents profils se révèlent être confondus (non montré sur les figures). Ceci est conforme aux prédictions issues du modèle continu :

$$\frac{u_x(z)}{\max(u_x(z))} = \frac{3(1 + 8\sigma_\mu Kn) - 12(z/H)^2}{3(1 + 8\sigma_\mu Kn)} \quad (8)$$

où  $\sigma_\mu$  est le coefficient de glissement visqueux [3].

Comme la vitesse n'est pas constante dans une section du canal, les frottements visqueux entraînent une dissipation d'énergie mécanique qui se transforme en énergie thermique et chauffe le fluide (Fig. 3(b)). Cet échauffement s'accroît avec l'augmentation de la force externe  $f_{ex}$ . Au voisinage de la paroi isotherme, en  $z/H = -1/2$ , il y a présence d'un saut de température qui s'amplifie avec  $f_{ex}$ .

La variation de la température dans le canal entraîne une légère modification de la masse volumique (Fig. 3(c)). Conformément à l'équation d'état du fluide de Lennard-Jones, la densité varie inversement à la température [4]. Les grandes oscillations, de l'ordre de  $\pm 15\%$  de la valeur dans le cœur, présentes aux voisinages des parois sont dues à la stratification des atomes d'argon qui interagissent fortement avec les atomes de platine qui composent les murs.

Le flux total d'énergie (Eq. 5) est présenté sur la figure 3(d). Ces courbes montrent que celui-ci s'annule au niveau de la paroi adiabatique, en  $z/H = 1/2$ . Cela confirme que le flux

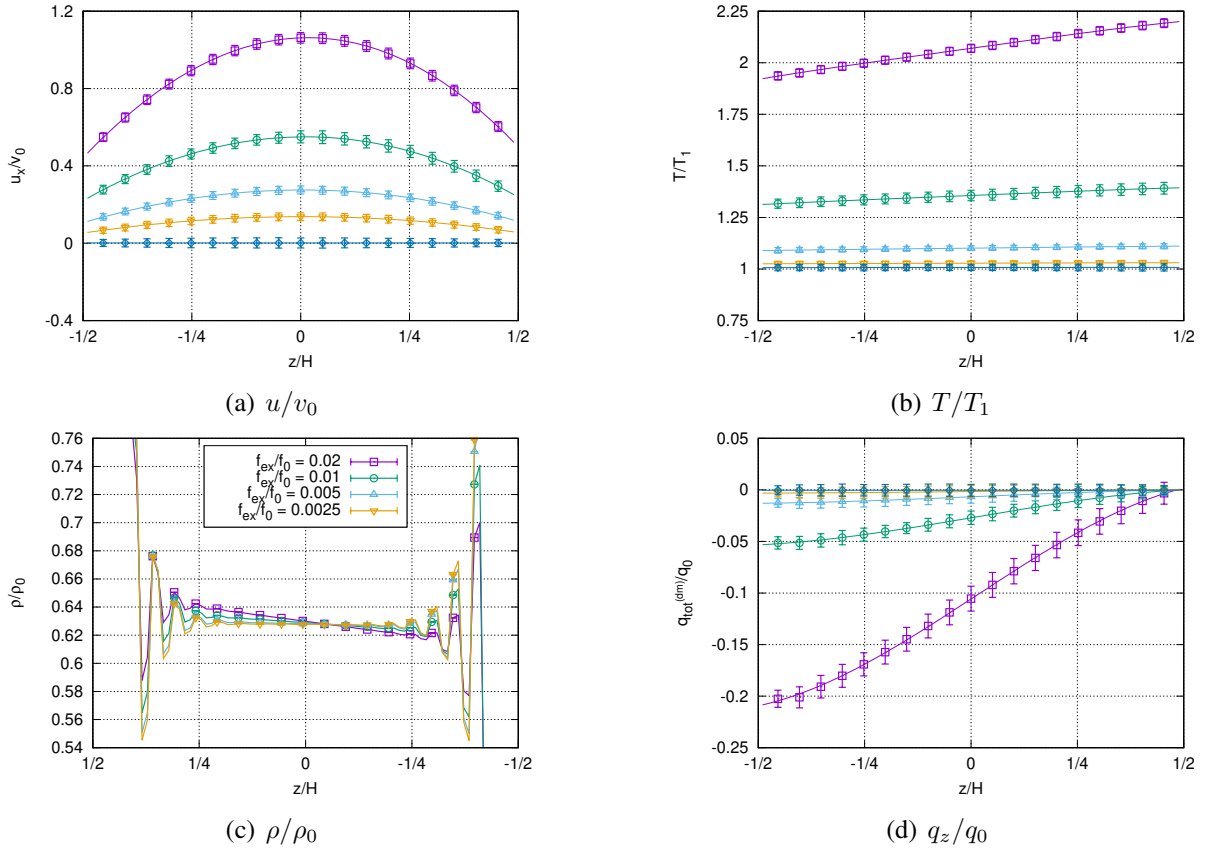


Figure 3 : Profils de vitesse  $u/v_0$ , de densité  $\rho/\rho_0$ , de température  $T/T_1$  et du flux de chaleur total  $q_{tot}^{(dm)}/q_0$  sur la hauteur du canal pour différentes valeurs de la force volumique  $f_x$  appliquée sur les particules fluides. Le nombre de tranches dans lesquelles sont calculées les moyennes est 25. La légende de toutes les figures est la même que celle donnée sur les profils de densité (c).

total d'énergie à l'interface fluide/solide est bien égal au flux de conduction thermique dans le mur solide. En raison de la force externe qui s'applique sur les molécules d'argon, le flux total d'énergie ne se conserve pas sur la hauteur du canal. Il augmente en s'éloignant de la paroi adiabatique et atteint son maximum au niveau de la paroi isotherme. La valeur maximale est proportionnelle à la force externe  $f_{ex}$ . En effet, en normalisant le flux total d'énergie par sa valeur maximale, toutes les courbes deviennent confondues (non présenté). Ce résultat est lui aussi conforme aux prédictions issues de la mécanique des milieux continus pour lesquelles ce rapport, construit avec le champ de vitesse (Eq. 8), est bien indépendant de la force  $f_{ex}$  :

$$\frac{q_{tot}^{(mmc)}(z)}{\max(q_{tot}^{(mmc)}(z))} = \frac{3(1 + 8\sigma_\mu Kn)(0,5 + z/H) - 4(0,125 + (z/H)^3)}{2 + 24\sigma_\mu Kn}$$

#### 4.2. Flux total d'énergie : comparaison des modèles microscopiques et macroscopiques

Pour faciliter l'analyse détaillée du flux total d'énergie, nous nous focaliserons dans cette section sur une simulation particulière, pour laquelle la force externe  $f_{ex}/f_0 = 0,01$ . Par la suite, des résultats obtenus pour différents nombres de Knudsen et différentes valeurs de la force externe  $f_{ex}$  sont présentés.

Sur la base des simulations de dynamique moléculaire, il est possible de reconstruire les profils de vitesse et de température (cf Figs. 3(a) et 3(b)), puis, par l'intermédiaire d'une approximation de type différences finies, d'évaluer les dérivées de ces quantités qui apparaissent

dans les expressions du modèle continu (Eq. 2). Dans ces dernières expressions, la viscosité dynamique et la conductivité thermique ont été obtenues par des corrélations qui sont fonctions de la température et la masse volumique [8, 9].

La figure 4 présente les profils normalisés du flux total d'énergie obtenus par dynamique moléculaire  $q_{tot}^{(dm)}$  (Eq. 5) et par les reconstructions macroscopiques des flux de conduction  $q_k$  et visqueux  $q_\mu$ , ainsi que leur somme  $q_{tot}^{(mmc)} = q_k + q_\mu$  (Eq. 2). Chaque contribution est normalisée

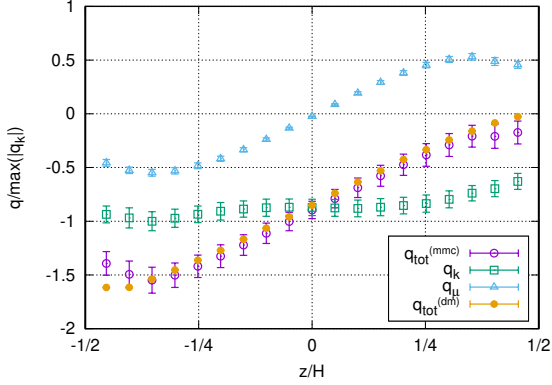


Figure 4 : Flux normalisés  $q / \max(|q_k|)$ .

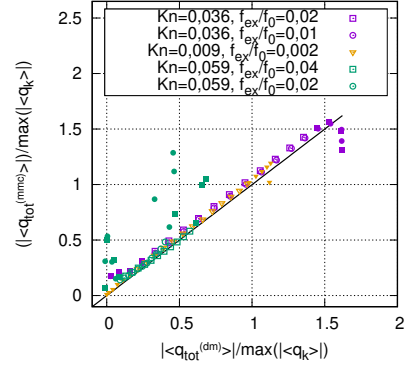


Figure 5 : Corrélation des flux normalisés avec le flux total calculé  $q_{tot}^{(dm)}$ . Les points proches des parois présentés en symboles pleins, et les points internes du domaine présentés par symbole creux.

par la valeur maximale du flux de conduction,  $\max(|q_k|)/q_0 = 3,18 \times 10^{-2}$ . L'absence de la contribution enthalpique  $q_h$  sur le graphique et dans l'expression de  $q_{tot}^{(mmc)}$  est liée à la nature du champ de vitesse pour lequel la composante selon  $e_z$  est toujours nulle :  $q_h(z) = 0$ . L'examen du flux de conduction  $q_k$  montre qu'il est quasiment constant, ce qui est cohérent avec la pente observée sur le profil de température (Fig. 3(b)). Les faibles variations sont essentiellement dues à la dépendance de la conductivité thermique à la température locale. La contribution visqueuse  $q_\mu$  présente un profil antisymétrique autour de  $z = 0$ , ce qui est naturel compte tenu de la symétrie du profil de vitesse (Fig. 3(a)). Les flux totaux d'énergie reconstruits par les relations de la mécanique des milieux continus,  $q_{tot}^{(mmc)}$ , et déterminé par la dynamique moléculaire,  $q_{tot}^{(dm)}$ , sont en très bon accord dans le cœur du canal, et dans une plus faible mesure, également à proximité des interfaces entre le fluide et le mur. Les différences observées au voisinage des frontières  $z/H = \pm 1/2$ , résultent de la stratification des atomes d'argon qui engendre des oscillations dans le profil de densité (Fig. 3(c)), et donc dans les propriétés  $k_f$  et  $\mu$  extraites des corrélations [9, 8].

Ces résultats s'avèrent très robustes aux choix des paramètres physiques ou numériques utilisés dans les simulations moléculaire. Que ce soient la force externe  $f_{ex}$ , le rayon de coupure  $r_c$ , le pas de temps  $\Delta t$ , le volume  $V(z)$  des tranches dans lesquelles sont réalisées les moyennes, le temps d'intégration ou encore les paramètres d'interactions Ar/Pt, les flux  $q_{tot}^{(mmc)}$  et  $q_{tot}^{(dm)}$  sont quasiment identiques, y compris à l'interface fluide/solide. Ces observations confirment la validité de la condition à la limite de flux initialement proposée par Maslen [1] en 1958.

La Figure 5 présente une synthèse sous forme d'une corrélation entre  $q_{tot}^{(dm)}$  (en abscisses) et  $q_{tot}^{(mmc)}$  (en ordonnées). Pour des raisons de clarté, les barres d'erreur ont été omises. Leurs valeurs sont inférieures à 5% de la valeur moyenne des données dans la plage  $[-H/4, H/4]$  et



inférieures à 7% ailleurs. La corrélation est d'autant plus juste que les points se situent proches de la droite  $y = x$ , c'est-à-dire  $q_{tot}^{(mmc)} = q_{tot}^{(dm)}$ . Différentes valeurs du nombre de Knudsen  $Kn$ , obtenues en faisant varier la masse volumique  $\rho$  ou la hauteur  $H$ , et de la force externe  $f_{ex}$  sont utilisées afin de montrer la robustesse de la corrélation aux différentes configurations physiques. Les points intérieurs du domaine ( $z/H \in [-1/4, 1/4]$ ) sont proches de la bissectrice  $y = x$  (symboles creux). Les écarts les plus grands sont obtenus pour les points proches des parois (symboles pleins) où la structuration du fluide est importante et complique l'extraction des données macroscopiques et l'analyse dans ces zones. Il est à noter que dans toutes les simulations effectuées, la part de la contribution visqueuse dans le flux total a été estimée et seules les configurations pour lesquelles elle est supérieure à 10% (en norme quadratique) ont été retenues : cela exclut les configurations ayant un faible glissement et pour lesquelles le bilan des flux à la paroi se résume à l'égalité des termes des flux de conduction. Une régression linéaire appliquée aux points intérieurs conduit à la relation  $q_{tot}^{(mmc)} = 1,03 \times q_{tot}^{(dm)}$  et permet de vérifier que le flux total d'énergie se décompose bien en deux contributions, l'une de conduction (loi de Fourier) et la seconde engendrée par les frottements visqueux.

## 5. Conclusion

Les simulations de dynamique moléculaire montrent que les conditions aux limites de Maslen [1], démontrées à partir d'une approche de mécanique des milieux continus (voir [3]), sont valides en proche paroi, dans la couche de Knudsen où la mécanique des milieux continus ne devrait plus être applicable. Pour des conditions de glissement à l'interface fluide/solide, le flux engendré par les frottements visqueux doit donc être impérativement inclus dans le flux total d'énergie transmis entre le fluide et la paroi solide. Du point de vue purement thermique, cela revient à introduire une condition de saut dans le flux de chaleur de conduction entre le fluide et le solide, comme il en existe pour la vitesse et la température.

## Références

- [1] S. H. Maslen, On heat transfer in slip flow, *Journal of the Aerospace Sciences*, 25(6) :400-401, 1958.
- [2] C. Hong and Y. Asako, Some considerations on thermal boundary condition of slip flow, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(15-16) :3075–3079, 2010.
- [3] X. Nicolas, E. Chénier, et G. Lauriat, Thermal boundary conditions for convective heat transfer of dilute gases in slip flow regime, *International Journal of Thermal Sciences*, 135 :298 – 301, 2019.
- [4] D. C. Rapaport et D. C. R. Rapaport., *The art of molecular dynamics simulation*, Cambridge university press, 2004.
- [5] Z. Fan, L. F. C. Pereira, H.-Q. Wang, J.-C. Zheng, D. Donadio, and A. Harju, Force and heat current formulas for many-body potentials in molecular dynamics simulations with applications to thermal conductivity calculations, *Physical Review B*, 92 :094301, 2015.
- [6] P. H. Hünenberger, *Thermostat Algorithms for Molecular Dynamics Simulations*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, 2005.
- [7] C. Cercignani, *Slow rarefied flows : Theory and application to Micro-Electro-Mechanical systems*, Springer Science & Business Media, 2006.
- [8] G. Galliero, C. Boned et A. Baylaucq, Molecular dynamics study of the Lennard-Jones fluid viscosity : Application to real fluids., *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 44(17) :6963–6972, 2005.
- [9] M. Bugel et G. Galliero, Thermal conductivity of the Lennard-Jones fluid : An empirical correlation, *Chemical Physics*, 352(1) :249-257, 2008.