



**HAL**  
open science

## Stratégie de couplage pour les simulations multi-échelles dans des micro-canaux

Dahia Chibouti, Benoît Trouette, Eric Chénier

► **To cite this version:**

Dahia Chibouti, Benoît Trouette, Eric Chénier. Stratégie de couplage pour les simulations multi-échelles dans des micro-canaux. 25ème Congès français de la mécanique, Aug 2022, Nantes, France. hal-03783846

**HAL Id: hal-03783846**

**<https://hal.science/hal-03783846v1>**

Submitted on 22 Sep 2022

**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.

# Stratégie de couplage pour les simulations multi-échelles dans des micro-canaux

**D. Chibouti, B. Trouette , E. Chénier**

Univ Gustave Eiffel, Univ Paris Est Creteil, CNRS, UMR 8208, MSME,  
F-77454 Marne-la-Vallée, France  
{dahia.chibouti; benoit.trouette; eric.chenier}@univ-eiffel.fr

## Résumé :

*Une méthode hybride et multi-échelle, couplant à la fois les échelles moléculaire et macroscopique, est utilisée pour résoudre les écoulements glissants de gaz dans des micro-systèmes. Cette contribution présente le principe de couplage des échelles à l'aide de méthodes d'apprentissage. Des applications à des écoulements isothermes de gaz dans des microcanaux sont ensuite données.*

## Abstract :

*A hybrid multiscale method, coupling both molecular and macroscopic scales, is used in order to deal with the gas slip flow in micro-systems. This paper explains the concept of coupling strategy using machine learning methods. Some applications to gaseous and isotherm flow in micro-channels are then discussed.*

**Mots clefs : méthodes multi-échelles, interfaces fluide/solide, dynamique moléculaire, apprentissage automatique.**

## 1 Introduction

L'importance croissante des MEMS (MicroElectroMechanical Systems) et NEMS (NanoElectroMechanical Systems) dans l'industrie conduit à revoir les modélisations des écoulements fluides et des transferts thermiques pour tenir compte du déséquilibre thermodynamique local au voisinage des parois, appelée couche de Knudsen. En effet pour des écoulements de gaz, lorsque la longueur caractéristique  $\ell_c$  de l'écoulement est de 10 à 100 fois le libre parcours moyen  $\lambda$  des molécules, les équations de la mécanique des fluides restent valides dans le cœur de l'écoulement alors qu'une attention particulière doit être portée proche de la paroi, avec l'apparition d'un glissement dynamique et de sauts de température et de flux de conduction à l'interface fluide/solide.

Une représentation classique de ces discontinuités repose sur des modèles proposés indépendamment par Navier [1] puis Maxwell [2]. Ces modèles sont très largement utilisés pour simuler des écoulements dans des microcanaux [3, 4, 5] et consistent par exemple à introduire une proportionnalité entre la vitesse de glissement et le cisaillement à l'interface solide :

$$\bar{v} \cdot \bar{e}_\tau = L_g \bar{e}_n \cdot \bar{d} \cdot \bar{e}_\tau \quad (1)$$

où  $\bar{v}$  est le vecteur vitesse,  $\bar{d}$  est le tenseur des taux de déformation et  $(\bar{e}_n \bar{e}_\tau)$  sont les vecteurs tangent et normal à la paroi. Le paramètre  $L_g$  est appelé longueur de glissement et dépend des interactions à petite échelle entre le gaz et la paroi. Ainsi les conditions aux limites à imposer aux variables de l'écoulement résultent des échanges de quantité de mouvement et d'énergie entre les atomes/molécules du fluide et du solide, et sont donc non trivialement accessible par un modèle de type continu [6] ; une approche moléculaire est donc plus appropriée [7].

Dans le cas de microcanaux de grande longueur, une modélisation complète de la paroi par une approche microscopique n'est pas envisageable. Il convient donc d'adopter une approche multi-échelle, combinant approches moléculaire et macroscopique, afin de modéliser convenablement le cœur de l'écoulement et le voisinage des parois.

Ainsi, une méthode numérique hybride couplant une méthode de résolution des équations de la mécanique des fluides (méthode des Volumes Finis) et de Dynamique Moléculaire est développée pour simuler toutes les échelles de l'écoulement. Afin de limiter le nombre de simulations de Dynamique Moléculaire, généralement coûteuses en temps de calcul, des méthodes d'apprentissage par régression bayésienne ou gaussienne sont mises en place pour modéliser les réponses données par la Dynamique Moléculaire lors de sollicitations macroscopiques.

Le reste de l'article est organisé comme suit : La méthode hybride et multi-échelle, qui couple les approches "continu" (mécanique des milieux continus) et le modèle proche paroi, est brièvement présentée dans la section 2. Ensuite, nous discuterons brièvement, de la procédure de détermination directe des lois permettant de traduire le glissement à la paroi en présentant les méthodes de régression par la méthode bayésienne. Nous présentons, par la suite, en détail l'algorithme de couplage utilisé pour résoudre notre problème physique dans la section 3. Les conclusions et les travaux futurs sont ensuite discutés et illustrés dans la section 4.

## 2 Méthode hybride multi-échelle

L'approche hybride multi-échelle consiste à coupler la modélisation des équations de la mécanique des fluides et celle à l'échelle moléculaire pour représenter toutes les échelles de l'écoulement. Le système fluide complet est alors subdivisé en sous-domaines, dont chacun est résolu, soit au moyen du solveur continu, soit au moyen du solveur moléculaire. La région d'écoulement macroscopique, où l'hypothèse de la mécanique des milieux

continus est valide, est modélisée par les équations de Navier-Stokes, elles-mêmes discrétisées avec la méthode des volumes finis. La zone au voisinage des parois est traitée à l'échelle moléculaire par une formulation discrète particulière (Fig. 1).

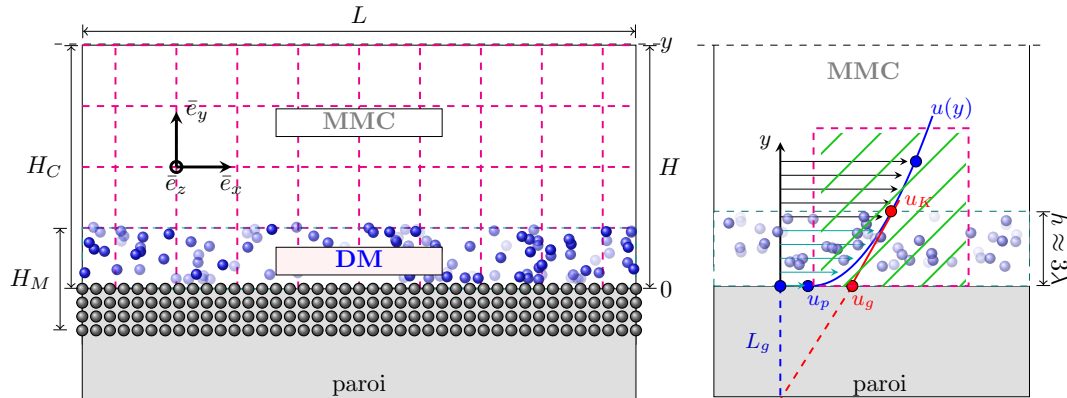


FIGURE 1 – À gauche : représentation du couplage entre les deux approches, continue et discrète. Le domaine de hauteur  $H_C$  représente le domaine continu où les équations de Navier-Stokes sont résolues. Le domaine de hauteur  $H_M$  représente la hauteur du domaine moléculaire modélisée par la méthode de dynamique moléculaire. Elle contient une partie d'épaisseur de mur et une partie du fluide adjacent à la paroi. Un recouvrement entre les hauteurs  $H_C$  et  $H_M$  est nécessaire afin de décrire toute la hauteur fluide  $H$ . À droite : profil de vitesse d'un écoulement de type Couette-Poiseuille. Le carré en pointillés hachuré en vert représente la première maille du maillage liée à la discrétisation des équations de Navier-Stokes, où  $u_K$  est la vitesse au point  $x_K$  de la maille  $K$ .

Le travail réalisé et illustré dans cette contribution est la validation de la méthode par apprentissage. Le modèle de proche paroi repose non pas sur des simulations de dynamique moléculaire qui sont très coûteuses, mais sur un simple modèle analytique 1D de type Couette-Poiseuille glissant (en utilisant les conditions aux limites de glissement).

Afin de relier en valeur et en pente les deux solutions, il est nécessaire i) de fournir au modèle de paroi proche les valeurs du domaine continu, ii) d'imposer à la frontière du modèle continu la valeur de glissement permettant de raccorder en pente la solution. Si le premier est relativement simple, le second requiert la connaissance de la dépendance entre la pente, donnée par l'expression (2), et les valeurs d'entrée du modèle de paroi proche.

La pente issue de la solution du Couette-Poiseuille glissant s'écrit :

$$\frac{du(z)}{dz} = \frac{1}{\mu} \frac{dp}{dx} z + \frac{\left(u_K - u_p - \frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dx} h^2\right)}{h + \sigma_u \lambda} \quad (2)$$

où  $u_K$  est la vitesse au point  $x_K$  à la hauteur  $h$  de la maille  $K$ ,  $u_p$  est la vitesse à la paroi,  $\lambda$  représente le libre parcours moyen des particules, et est proportionnel à  $\frac{1}{p}$  et en

$\sqrt{T}$ . Son expression est donnée par :

$$\lambda = \frac{\mu}{p} \sqrt{\frac{\pi}{2}} r T \quad (3)$$

Le choix de la base de fonctions utilisée dans la méthode de régression bayésienne repose sur la dépendance de cette pente en  $p$ ,  $T$  et  $u_K$ . En effet, si le deuxième terme de l'équation (2) est développé, deux différentes fonctions de base peuvent être suggérées :

- **Cas**  $h \ll \lambda$ , c'est-à-dire que la maille est dans la couche de Knudsen et très proche de la paroi, où les molécules ne sont plus à l'équilibre thermodynamique : le développement, en revanche, s'écrit :

$$\frac{du(z)}{dz} = \frac{1}{\mu} \frac{dp}{dx} z + \frac{\left(u_K - u_p - \frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dx} h^2\right)}{\sigma_u} \left(\frac{1}{\lambda}\right) \quad (4)$$

La fonction de base à prendre dans ce cas serait alors en  $\{p, u\}$ . Les résultats sont présentés dans la figure 5.

- **Cas**  $h \gg \lambda$ , c'est-à-dire que la maille est en dehors de la couche de Knudsen : en utilisant le développement limité de  $1/(1+x)$ , il en résulte :

$$\frac{du(z)}{dz} = \frac{1}{\mu} \frac{dp}{dx} z + \frac{\left(u_K - u_p - \frac{1}{2\mu} \frac{dp}{dx} h^2\right)}{h} \left(1 - \sigma_u \frac{\lambda}{h}\right) \quad (5)$$

Sachant la dépendance de  $\lambda$  qui en  $\frac{1}{p}$  donnée par l'équation (3), la fonction de base à prendre dans ce cas serait alors en  $(\frac{1}{p}, u)$ . Les résultats sont présentés dans la figure 6.

## 2.1 Échelle macroscopique – Méthode des volumes finis

Les simulations macroscopiques isothermes à  $T_0$ , sont gouvernées par les équations de Navier-Stokes, et l'équation d'état reliant les variables thermodynamiques :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho \bar{u}) &= 0 \\ \frac{\partial \rho \bar{u}}{\partial t} + \bar{\nabla} \cdot (\rho \bar{u} \otimes \bar{u}) &= -\bar{\nabla} p + \bar{\nabla} \cdot \bar{\tau} \\ p - \rho r T_0 &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

La discrétisation des équations repose sur une méthode de volumes finis non-structurés, avec des variables co-localisées au centre des volumes de contrôle [8]. L'expression discrète des opérateurs spatiaux requiert l'utilisation d'un maillage admissible qui doit vérifier des propriétés d'orthogonalité. La stabilisation des modes parasites de pression est obtenue par l'utilisation de regroupements de mailles dans lesquelles les oscillations de pression sont contrôlées. L'ensemble des équations non-linéaires discrètes couplées, regroupant les équations de bilan de la masse et de la quantité de mouvement, munies des conditions

initiales et aux limites appropriées, et de la loi d'état, est résolue par une méthode Newton-Raphson.

## 2.2 Méthodes d'apprentissage – Régression bayésienne

Dans les méthodes d'apprentissages, qu'elles soient bayésiennes ou par processus gaussiens, ont pour vocation de formuler une relation liant des données d'entrée d'un système,  $\bar{x} = \{p, u_K\}$  dans notre cas, à leurs sorties connues  $t = \frac{du}{dz}$ , aussi appelées cibles représentant le cisaillement pour cet article. Cette relation permet de fournir une prédiction  $y$  pour une entrée inconnue  $\bar{x}_i = \{p_i, u_{K_i}\}$ . On qualifie l'apprentissage de supervisé lorsque les données apprises sont pilotées par le résultat de l'apprentissage, comme cela sera le cas dans notre méthode.

Les méthodes de régression linéaire ont la propriété d'être linéaires par rapport à leurs paramètres, mais pas nécessairement par rapport à leurs variables d'entrée. En utilisant des fonctions de base non-linéaires des variables d'entrée, les modèles linéaires sont en mesure de modéliser des non-linéarités de variables d'entrée à des cibles arbitraires. La régression polynomiale en est un exemple et sera utilisée dans ce travail. Un modèle de régression linéaire  $y(\bar{x}, \bar{w})$  s'écrit

$$y(\bar{x}, \bar{w}) = \sum_{j=0}^{M-1} w_j \phi_j(\bar{x}) = \bar{w}^T \bar{\phi}(\bar{x}) \quad (1)$$

où  $\bar{\phi}(\bar{x}) = [\phi_0(\bar{x}), \dots, \phi_{M-1}(\bar{x})]^T$  est le vecteur des fonctions de base et  $\bar{w} = [w_0, \dots, w_{M-1}]^T$  est le vecteur des paramètres à apprendre. Par exemple, la fonction de base de type polynomial s'écrit  $\bar{\phi}(x) = [1, x, x^2, \dots, x^{M-1}]^T$ , où  $M$  représente l'ordre polynomial avec lequel la régression est faite. Pour les deux variables,  $\{p, u\}$  l'ordre sera, respectivement,  $M_p$  et  $M_u$ . Comme pour toute expérience, les observations sont corrompues par certaines erreurs (par exemple les fluctuations dans la méthode de dynamique moléculaire). Pour des raisons de facilité, ces erreurs sont considérées comme étant gaussiennes de moyenne nulle et de variance inconnue  $\sigma^2$ , c'est-à-dire que nous supposons que chaque observation  $t_i$  est égale à la fonction,  $y$ , évaluée à une entrée,  $\bar{x}_i$ , avec un ajout d'un bruit gaussien  $\varepsilon$ . Le modèle s'écrit [9] :

$$t = y(\bar{x}, \bar{w}) + \varepsilon, \quad \varepsilon = \mathcal{N}(0, \sigma^2) \quad (7)$$

Une approche bayésienne implique la définition d'une distribution de probabilité *a priori*,  $p(\bar{w})$ , censée représenter la croyance *a priori* en  $\bar{w}$ . Le théorème de Bayes s'écrit :

$$p(\bar{w}|\bar{t}) \propto p(\bar{t}|\bar{w})p(\bar{w}) \quad (8)$$

où,  $\bar{t} = (t_1, \dots, t_N)$ , représente les données d'observation et la vraisemblance,  $p(\bar{t}|\bar{w})$ , est formée sur la base du modèle de bruit (Eq. (7)). Cette approche donne une expression pour la distribution *a posteriori*,  $p(\bar{w}|\bar{t})$ , qui permet d'analyser la probabilité que les

paramètres de régression puissent prendre des valeurs particulières, conditionnellement aux données d'observation.

Si on adopte une telle approche bayésienne et on choisit la distribution *a priori* sur les paramètres  $p(\bar{w}) = \mathcal{N}(\bar{0}, \alpha^{-1}\bar{I})$  et que l'on alimente ensuite par le modèle (1), il s'ensuit que la matrice de covariance sur  $\bar{y}$ ,  $\bar{S}_N = \text{Cov}[\bar{y}]$ , est

$$\bar{S}_N = \text{E}[\bar{y}\bar{y}^T] = \bar{\phi} \text{E}[\bar{w}\bar{w}^T]\bar{\phi}^T = \alpha^{-1}\bar{\phi}\bar{\phi}^T \quad (9)$$

En conséquence du choix d'une distribution *a priori* gaussienne conjuguée, la distribution *a posteriori* sera également gaussienne.

L'enjeu principal de l'apprentissage est de prédire l'évolution de la cible  $t$  pour de nouvelles données  $\bar{x}$ , sans se soucier pour autant de la valeur de  $\bar{w}$ . La distribution prédictive, donnée par l'équation (10), permet d'arriver à cet objectif, définie par [9], elle est obtenue en combinant les deux distributions : conditionnelle et *a posteriori*, où  $\sigma_N^2(\bar{x})$  représente la confiance ou l'incertitude sur la prédiction donnée par (11).

$$\begin{aligned} p(t | \bar{t}, \alpha, \beta) &= \int p(t | \bar{w}, \beta) p(\bar{w} | \bar{t}, \alpha, \beta) d\bar{w} \\ &= \mathcal{N}\left(t | \bar{m}_N^T \bar{\phi}(\bar{x}), \sigma_N^2(\bar{x})\right) \end{aligned} \quad (10)$$

$$\sigma_N^2(\bar{x}) = \frac{1}{\beta} + \bar{\phi}(\bar{x})^T \bar{S}_N \bar{\phi}(\bar{x}) \quad (11)$$

où l'inverse de  $\beta$  représente la variance et correspond à l'incertitude sur les données, donc au bruit imposé, et le terme  $\bar{\phi}(\bar{x})^T \bar{S}_N \bar{\phi}(\bar{x})$  correspond à l'incertitude sur les coefficients  $\bar{w}$ . Du fait que le bruit et la distribution des paramètres sont des distributions gaussiennes indépendantes, leurs variances sont alors additives. Il est également important de souligner que, avec l'augmentation de la base de données, c'est-à-dire après plusieurs apprentissages, la distribution *a posteriori* devient plus mince. Il est alors possible de montrer que l'incertitude diminue au fur et à mesure que les points de données sont observés ( $\sigma_{N+1}(\bar{x}) \leq \sigma_N(\bar{x})$ ) démontré par [10]. Par conséquent, dans la limite où  $N \rightarrow \infty$ , le second terme de l'équation (11) tend vers zéro ( $\bar{\phi}(\bar{x})^T \bar{S}_N \bar{\phi}(\bar{x}) \rightarrow 0$ ) (voir figure 3).

### 3 Problème physique et algorithme de couplage

Soit l'écoulement isotherme à  $T_0$  dans un canal plan 2D défini dans des coordonnées cartésiennes  $(x, y)$ , de hauteur  $H = 4.5 \times 10^{-6}$  de longueur  $L = 50 \times H$  et dont les pressions d'entrée et de sortie sont  $P(0, y) = 1 \times 10^5$  et  $P(L, y) = 0.8 \times 10^5$ . En notant  $\bar{v} = u\bar{e}_x + v\bar{e}_y$ , les conditions aux limites en vitesse sont en entrée  $(\partial u)/(\partial x) = v = 0$  et en sortie  $(\partial \bar{v})/(\partial x) = \bar{0}$ . Compte tenu de la symétrie de l'écoulement, seul une moitié du canal est simulé avec une paroi en  $y = 0$  et un axe de symétrie en  $y = H$ .

Par la suite, on désigne par *modèle de cœur* et *modèle de proche paroi* les modèles macroscopique continu et microscopique. Les exposants  $\bullet^{(c)}$  (cœur) et  $\bullet^{(p)}$  (paroi) permettent de distinguer les variables issues des deux modèles :  $p^{(c)}$ ,  $u^{(c)}$  et  $p^{(p)}$ ,  $u^{(p)}$ .

L'ensemble du canal est discrétisé en  $n_x \times n_y = \times 10$  volumes de contrôle réguliers définissant un maillage structuré. Les  $n_x$  cellules adjacentes à la paroi et de centre  $h = H/(4n_y)$  servent à communiquer avec le modèle de proche paroi de sorte que la vitesse tangente à la paroi  $u(x, h)$  et le cisaillement  $(\partial u)/(\partial y)(x, h)$  soient identiques entre les deux modèles. Pour cela, une méthode de régression bayésienne est utilisée pour apprendre la dépendance du cisaillement du modèle de proche paroi  $(\partial u^{(p)})/(\partial y)(x, h)$  en fonction des données de cœur  $p^{(c)}(x, h)$  et  $u^{(c)}(x, h)(0)$ .

Le modèle utilisé étant celui analytique 1D de type *Couette-Poiseuille*, les conditions aux limites sont La procédure d'apprentissage est la suivante :

1. Données d'entrée :
  - Valeur maximale du compteur d'apprentissages supervisés  $cpt_{max}$
  - Précision relative pour le calcul des extrema des données pour la pression  $\varepsilon_1$  et la vitesse  $\varepsilon_2$
2. Préparations
  - La base potentielle d'apprentissage contenant des triplets est mise à zéro :  $B_{pot} = \emptyset$
  - Initialisation de deux couples (pression, vitesse) utilisés pour garder les extrema des données courantes :  $X_m^{(new)} = (+\infty, +\infty)$  et  $X_M^{(new)} = (-\infty, -\infty)$
  - Initialisation le compteur d'apprentissages supervisés  $cpt = 0$
3. **Modèle de cœur** : Calcul de  $p^{(c)}(x, y)$  et  $\bar{v}^{(c)}(x, y)$  par la méthode des volumes finis avec des conditions d'adhérence à la paroi
4. Boucle sur le nombre d'apprentissages : Tant que  $cpt \leq cpt_{max}$ 
  - (a) Sauvegarde des extrema des anciennes données  $X_m^{(old)} = X_m^{(new)}$ ,  $X_M^{(old)} = X_M^{(new)}$  et extraction des extrema des nouvelles données  $X_m^{(new)} = (\min_x p^{(c)}(x, h), \min_x u^{(c)}(x, h))$ ,  $X_M^{(new)} = (\max_x p^{(c)}(x, h), \max_x u^{(c)}(x, h))$ .
  - (b) Comparaison des extrema des données entre deux itérations successives pour vérifier s'ils ont changé :
    - Si  $|X_{m,1}^{(new)}/X_{m,1}^{(old)} - 1| > \varepsilon_1$  ou  $|X_{m,2}^{(new)}/X_{m,2}^{(old)} - 1| > \varepsilon_2$  alors
      - **Modèle de proche paroi** avec  $p^{(p)}(h) = X_{m,1}^{(new)}$  et  $u^{(p)}(h) = X_{m,2}^{(new)}$  ; calcul de  $(\partial u^{(p)})/(\partial y)(h)$
      - Ajout d'un triplet dans la base potentielle d'apprentissage :  $B_{pot} = B_{pot} \cup [X_{m,1}^{(new)}, X_{m,2}^{(new)}, (\partial u^{(p)})/(\partial y)(h)]$
      - Remise à zéro du compteur pour la convergence,  $cpt = 0$
    - Si  $|X_{M,1}^{(new)}/X_{M,1}^{(old)} - 1| > \varepsilon_1$  ou  $|X_{M,2}^{(new)}/X_{M,2}^{(old)} - 1| > \varepsilon_2$  alors
      - **Modèle de proche paroi** avec  $p^{(p)}(h) = X_{M,1}^{(new)}$  et  $u^{(p)}(h) = X_{M,2}^{(new)}$  ; calcul de  $(\partial u^{(p)})/(\partial y)(h)$
      - Ajout d'un triplet dans la base potentielle d'apprentissage :  $B_{pot} = B_{pot} \cup [X_{M,1}^{(new)}, X_{M,2}^{(new)}, (\partial u^{(p)})/(\partial y)(h)]$
      - Remise à zéro du compteur pour la convergence,  $cpt = 0$
  - (c) Apprentissage supervisé :



- Extraction de la base d'apprentissage de la base potentielle :  $B_{app} = \{B = (B_1, B_2, B_3) \in B_{pot} \mid (B_1, B_2) \in [X_{m,1}^{(new)}, X_{M,1}^{(new)}] \times [X_{m,2}^{(new)}, X_{M,2}^{(new)}]\}$
- Recherche des données  $X^{(new)} = (p, u)$  sur lesquelles la variance déterminée par la méthode bayésienne est maximale sur la base d'apprentissage,  $B_{app}$
- **Modèle de proche paroi** avec  $p^{(p)}(h) = X_1^{(new)}$  et  $u^{(p)}(h) = X_2^{(new)}$ ; calcul de  $(\partial u^{(p)})/(\partial y)(h)$
- Ajout d'un triplet dans les 2 bases d'apprentissage :  
 $B_{pot} = B_{pot} \cup [X_1^{(new)}, X_2^{(new)}, (\partial u^{(p)})/(\partial y)(h)]$   
 et  $B_{app} = B_{app} \cup [X_1^{(new)}, X_2^{(new)}, (\partial u^{(p)})/(\partial y)(h)]$
- Calcul de la régression bayésienne sur la base d'apprentissage,  $B_{app}$

$$\left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{y=h} = f(u(h), p(h))$$

- Ajout de 1 au compteur d'apprentissage supervisé,  $cpt = cpt + 1$
  - (d) **Modèle de cœur** : Calcul de  $p^{(c)}(x, y)$  et  $\bar{v}^{(c)}(x, y)$  par la méthode des volumes finis avec une condition de Neumann donnée par la régression bayésienne,
5. Calcul convergé, fin

## 4 Résultats préliminaires

Nous évaluons la précision de notre schéma hybride en le comparant à une simulation Navier-Stokes complète calculée en imposant directement la vitesse de glissement issue du modèle continu donné par l'équation (1).

### 4.1 Surface de réponses et incertitude d'apprentissage

Les figures 4 présentent les surfaces de réponse de la méthode de régression bayésienne polynomiale pour des fonctions de base en  $\{p, u\}$ . Ces surfaces sont obtenues en  $N = \{0, \dots, 4\}$  itérations de couplage. À  $N = 0$ , la base est initialisée par les valeurs obtenues lors d'initialisation en imposant les conditions d'**adhérence** dans le code qui résout les équations de Navier-Stokes. Ces surfaces de réponses montrent bien que la solution apprise (surface **bleue**) converge très rapidement vers la bonne solution (la surface **rouge**) correspondant à la solution analytique d'un couette-poiseuille glissant.

La figure 3 représente les incertitudes sur la prédiction  $\sigma_N$ , exprimé par l'équation (11), qui correspondent à la fois aux incertitudes sur les coefficients et celles sur les données. On remarque qu'elles décroissent avec la convergence et elles sont de l'ordre de  $\sigma_N \approx 10^{-3}$  à la fin de 10 apprentissages.

Idem, les valeurs de  $\varepsilon_\infty$ , correspondent aux erreurs entre la solution exacte et la prédiction en normes  $L_\infty$ , diminuent avec l'apprentissage.

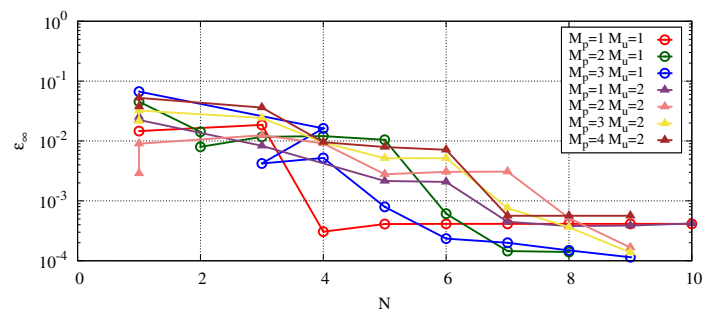


FIGURE 2 – Courbes de convergence entre la fonction apprise et la solution exacte en fonction de nombre d'apprentissages  $N$

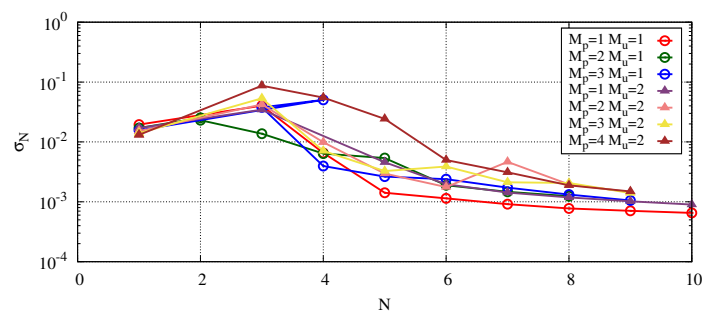


FIGURE 3 – Incertitudes sur la prédiction  $\sigma_N$  en fonction de nombre d'apprentissages  $N$

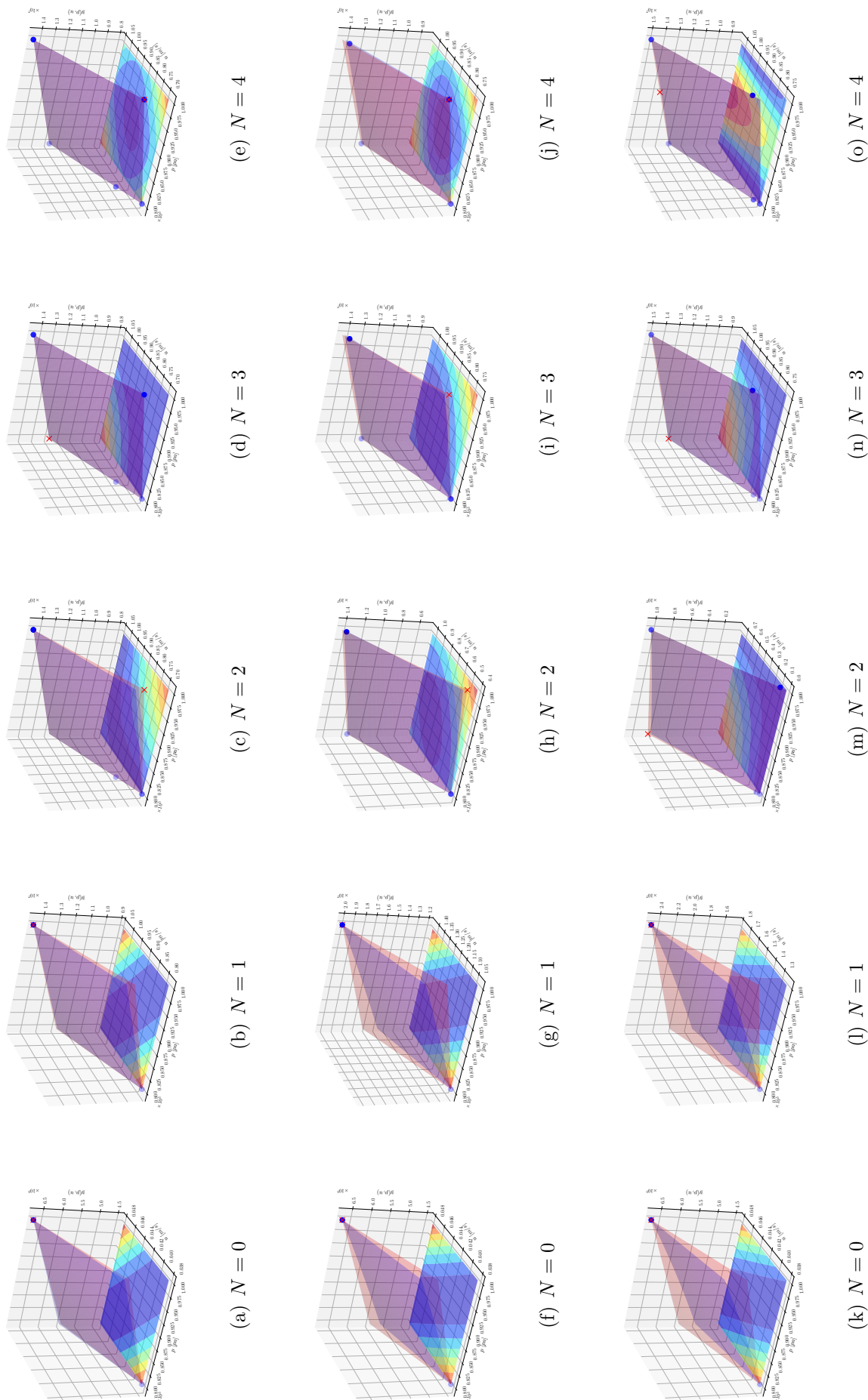


FIGURE 4 – Surfaces de réponses des cas d'apprentissage par la méthode de régression bayésienne polynomiale  $M_u = 1$ ;  $M_p = 1, 2, 3$  respectivement par ligne.

## 4.2 Erreur sur le couplage

La méthode utilisée pour la comparaison est la méthode de régressions bayésiennes polynomiales (ordre  $M_p = 1, \dots, 4$  en pression, de d'ordre  $M_u = 1, \dots, 2$  en vitesse).

Les figures 7(a) et 5(a) montrent que pratiquement tous les polynômes donnent une erreur relative de même ordre sur la vitesse (respectivement  $\varepsilon \approx 7 \times 10^{-3}$ ) dans le cas de Couette-Poiseuille et ( $\varepsilon \approx 10^{-3}$ ) dans le cas de Couette. À partir des figures 7(b) et 5(b) correspondant à l'erreur sur le cisaillement, on voit que les fonctions de base polynomiales ( $p^1, u^1$ ) d'ordre 1 en pression et en vitesse sont les meilleures fonctions à prendre pour pouvoir apprendre la pente avec lesquelles on peut atteindre une erreur de l'ordre de ( $\varepsilon \approx 1 \times 10^{-4}$ ) en seulement 3 itérations.

Dans le cas correspondant  $h \gg \lambda$ , où la maille est en dehors de la zone de Knudsen, les erreurs sont de l'ordre de 7% à 10%. Les erreurs semblent moins faibles dans le cas du modèle de Couette-Poiseuille. Cela est dû au gradient de pression utilisé. En effet, il s'agit plutôt d'un gradient de pression global et non pas local, c'est-à-dire  $\frac{dp}{dx} = \frac{P(L,y) - P(0,y)}{L}$

Les erreurs relatives sur la pression et la masse volumique sont négligeables pour tous les cas et toutes les méthodes.

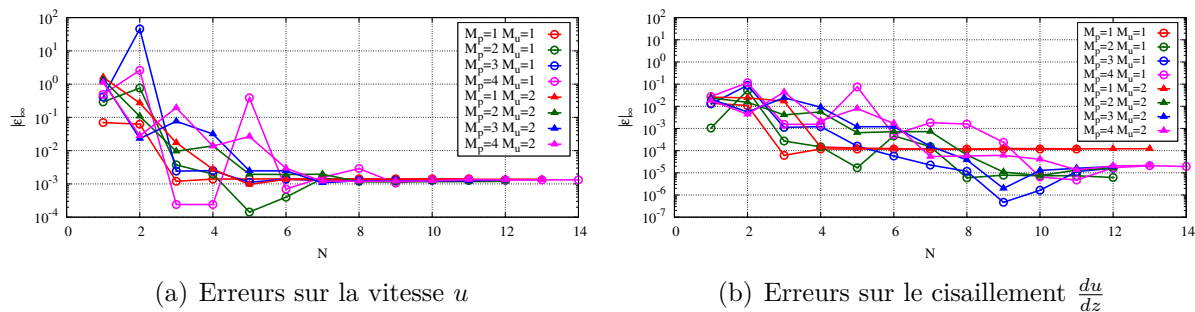


FIGURE 5 – Erreurs relatives sur les grandeurs physiques ( $u, \frac{du}{dz}$ ) : résultats comparés à un calcul Navier-Stokes glissant pour un écoulement de *Couette*. La comparaison se fait en utilisant les régressions bayésiennes polynomiales (ordre  $i = 1, \dots, 4$  en pression, de d'ordre  $i = 1, 2$  en vitesse).

## 5 Conclusion

Dans le cadre de cette contribution, nous avons présenté une amélioration des méthodes hybrides existantes [11]. Cette méthode hybride utilise des techniques d'apprentissage automatique permettant de prédire la relation reliant la vitesse de la première maille et sa pression au cisaillement, ce qui a permis de retrouver la vitesse de *glissement du fluide* à la paroi. Ce résultat est obtenu sans avoir à effectuer constamment des simulations moléculaires. Cette procédure permet de réutiliser les informations plusieurs fois, ce qui augmente considérablement l'efficacité des calculs, tout en offrant la possibilité de quantifier simplement les incertitudes. Dans cette étude, les grandeurs  $h$  et  $\lambda$  sont

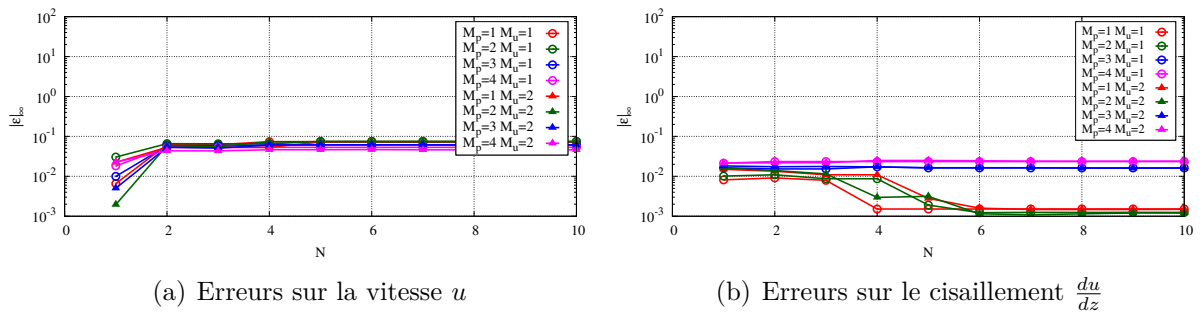


FIGURE 6 – Erreurs relatives sur les grandeurs physiques ( $u$ ,  $\frac{du}{dz}$ ) : résultats comparés à un calcul Navier-Stokes glissant pour un écoulement de *Couette*. La comparaison se fait en utilisant les régressions bayésiennes polynomiales en inverse de la pression  $\frac{1}{p}$  (ordre  $i = 1, \dots, 4$  en pression, de d'ordre  $i = 1, 2$  en vitesse).

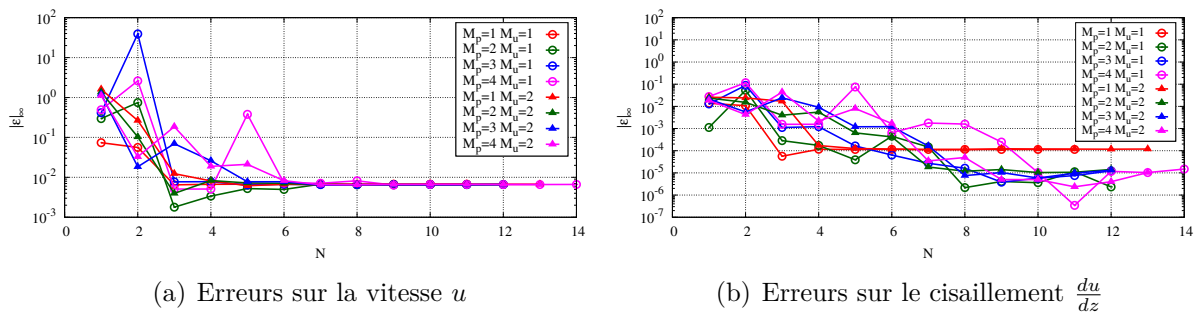


FIGURE 7 – Erreurs relatives sur les grandeurs physiques ( $u$ ,  $\frac{du}{dz}$ ) : résultats comparés à un calcul Navier-Stokes glissant pour un écoulement de *Couette-Poiseuille*. La comparaison se fait en utilisant les régressions bayésiennes polynomiales (ordre  $i = 1, \dots, 4$  en pression, de d'ordre  $i = 1, 2$  en vitesse).

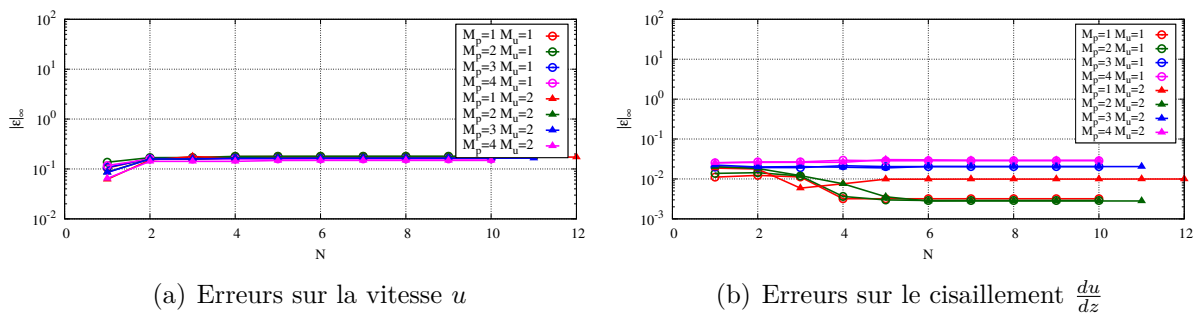


FIGURE 8 – Erreurs relatives sur les grandeurs physiques ( $u$ ,  $\frac{du}{dz}$ ) : résultats comparés à un calcul Navier-Stokes glissant pour un écoulement de *Couette-Poiseuille*. La comparaison se fait en utilisant les régressions bayésiennes polynomiales en inverse de la pression  $\frac{1}{p}$  (ordre  $i = 1, \dots, 4$  en pression, de d'ordre  $i = 1, 2$  en vitesse).

de même ordre de grandeur. Le raisonnement effectué dans les équations (5) et (4) ne correspond pas notre cas.

La solution polynomiale n'est alors pas la meilleure méthode pour obtenir la bonne

solution. Il devient alors judicieux de raisonner différemment et de faire l'apprentissage sans passer par la définition d'une fonction de base. Cette méthode est réalisée à l'aide de méthodes d'apprentissage par processus gaussiens. Ces méthodes se basent sur la définition d'un noyau gaussien.

## Références

- [1] Claude L.M.H. Navier. *Mémoires de l'Académie Royale des Sciences de l'Institut (imperial) de France*, volume 6, chapter Mémoire sur les lois du mouvement des fluides. Paris., 1823.
- [2] Jame C. Maxwell. Vii. on stresses in rarified gases arising from inequalities of temperature. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 170, 1879.
- [3] Stephen H. Maslen. On heat transfer in slip flow. *Journal of the Aerospace Sciences*, 25, 1958.
- [4] Xavier Nicolas, Eric Chénier, and Guy Lauriat. Thermal boundary conditions for convective heat transfer of dilute gases in slip flow regime. *International Journal of Thermal Sciences*, 135, January 2019.
- [5] Chungpyo Hong and Yutaka Asako. Some considerations on thermal boundary condition of slip flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53, 2010.
- [6] George Em Karniadakis, Ali Beskok, and Narayan Aluru. *Microflows and Nanoflows*. Springer-Verlag, 2005.
- [7] Dahia Chibouti, Benoît Trouette, and Eric Chénier. Jump in the conduction heat flux at the gas/solid interface in micro-channels. *International Journal of Thermal Sciences*, 159, 2021.
- [8] Eric Chénier, Robert Eymard, Raphaële Herbin, and Ouardia Touazi. Collocated finite volume schemes for the simulation of natural convective flows on unstructured meshes. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 56(11) :2045–2068, 2008.
- [9] Christopher Bishop. *Pattern Recognition and Machine Learning*. Springer, January 2006.
- [10] Cazhaow S. Qazaz, Christopher KI. Williams, and Christopher M. Bishop. An upper bound on the bayesian error bars for generalized linear regression. In *Mathematics of Neural Networks*. Springer, 1997.
- [11] Van Huyen Vu, Benoît Trouette, Quy-Dong To, and Eric Chénier. Hybrid atomistic-continuum multiscale method for fluid flow with density variation in microchannels. *International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, February 2018.