



HAL
open science

Modélisation hybride et multi-échelle pour la simulation des écoulements et des transferts thermiques dans les micro-canaux

van Huyen Vu

► **To cite this version:**

van Huyen Vu. Modélisation hybride et multi-échelle pour la simulation des écoulements et des transferts thermiques dans les micro-canaux. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Université Paris-Est, 2016. Français. NNT : 2016PESC1163 . tel-01555614

HAL Id: tel-01555614

<https://theses.hal.science/tel-01555614>

Submitted on 4 Jul 2017

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.

THÈSE

Présentée pour l'obtention du grade de
DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PARIS-EST

Spécialité : Science de l'ingénieur

présentée par

Van Huyen VU

**Modélisation hybride et multi-échelle
pour la simulation des écoulements et des
transferts thermiques dans les
micro-canaux**

Soutenue le 13 décembre 2016 devant le jury composé de :

Guillaume Galliéro	Professeur	Univ. de Pau et des Pays de l'Adour	Rapporteur
Irina Graur	Professeur	Univ. d'Aix-Marseille	Rapporteur
Eric Chénier	MCF	Univ. Paris-Est MLV	Directeur de thèse
Stéphane Colin	Professeur	INSA de Toulouse	Examineur
Céline Léonard	Professeur	Univ. Paris-Est MLV	Examineur
Benoît Trouette	MCF	Univ. Paris-Est MLV	Examineur
Quy-Dong To	MCF	Univ. Paris-Est MLV	Invité



Laboratoire Modélisation
et Simulation Multi Echelle

Thèse effectuée au sein du **Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle**
(MSME) - UMR 8208 CNRS

de l'Université Paris-Est Marne-la-Vallée
5, Boulevard Descartes
77454 Marne-la-Vallée Cedex 02
France

Remerciements

Tout d'abord, je remercie vivement tous les membres du jury. Mes remerciements sont adressés à Professeur Léonard, le président du jury de thèse ainsi qu'à Professeur Galliéro, Professeur Graur qui ont pris du temps pour rapporter mes travaux avec beaucoup de conseils constructifs. Je remercie également Professeur Colin qui a accepté de participer au jury et qui a bien voulu juger mon travail.

La personne à qui j'adresse toute ma reconnaissance est mon directeur de thèse, Éric Chénier, quelqu'un de très bien tant au niveau scientifique qu'au niveau humain. Je suis vraiment ravi d'avoir été encadré par vous. Merci pour vos disponibilités, vos aides, vos conseils.

Au fond de mon cœur, toute ma gratitude s'adresse à Benoît Trouette, Merci bien pour ton excellent encadrant et ta disponibilité ainsi que ta gentillesse. J'ai particulièrement beaucoup apprécié tes précieux conseils et tes qualités pédagogiques qui m'ont permis d'avancer dans mes recherches.

Je remercie également Quy-Dong To, qui est là pour perfectionner toutes les choses. Grâce à toi, au-delà des connaissances scientifiques, j'ai beaucoup appris sur la mentalité, la philosophie de la vie. Je n'oublie jamais nos discussions scientifiques et les échanges très riches sur tous les aspects quotidiens. Les mots ne suffisent pas pour exprimer ma reconnaissance pour toi.

Je tiens à remercier le reste des membres de l'équipe TCM pour leurs soutiens. Je remercie plus particulièrement Prof. Lauriat Guy, Prof. Vincent Stéphane, M. Nicolas Xavier et Mme. Ould-Rouiss Myriem pour ses gentillesse et ses encouragements chaleureux.

Mes remerciements vont également à mes amis vietnamiens et tous les membres du laboratoire MSME pour son accueil, notamment l'informaticien Guillaume Sauvenay pour les moyens qu'il a mis à ma disposition pour que mon travail se passe dans les meilleures conditions.

Merci beaucoup à ma famille au Vietnam qui m'a donné un soutien permanent et une source d'énergie éternelle. Ils ont été une grande source d'encouragement. Je remercie également à mes soeurs, mes amis pour leur soutien durant cette thèse. En fin, je m'adresse à ma femme (Nguyen Thi Tham), et ma fille (VU NGUYEN Bao Ngoc, Carole), deux personnes qui comptent beaucoup pour moi, qui dégagent du charme de l'amour et de l'intelligence ... Merci pour tous ... et encore merci ...

Paris, le 16 décembre 2016

A mes chers parents

Résumé

L'objectif de cette thèse est de mettre en œuvre une description multi-échelle adaptée aux écoulements de fluides dans des micro-/nano-conduites. Cette approche doit permettre de décrire, aussi bien les petites échelles relatives aux interactions du fluide avec les atomes du mur, que les grandes échelles de l'écoulement engendrées par les conditions aux limites d'entrée/sortie du canal. Pour cela, nous avons développé une méthode qui couple une modélisation continue des écoulements et des transferts de chaleur dans le cœur du canal avec une modélisation discrète proche des parois, basée sur une représentation atomistique du fluide et du mur.

Les équations de Navier-Stokes et de l'énergie, couplées à une équation d'état, sont approximées par une méthode de volumes finis dans le cœur de l'écoulement alors que des simulations de dynamique moléculaire sont utilisées pour représenter finement les interactions entre le fluide et la paroi. Cette approche hybride nécessite la transmission d'informations entre les modélisations : les grandeurs moyennées moléculaires sont imposées comme conditions aux limites pour le modèle continu, et la dynamique sous contrainte, couplée à un thermostat de Langevin, est utilisée pour piloter l'échelle moléculaire. Une représentation par des plots moléculaires locaux de petite taille, intelligemment répartis le long de l'interface entre le fluide et le mur, permet de traiter des écoulements et des transferts dans des canaux de très grands allongements, pour des coûts de calcul raisonnables.

Après une partie de validation, des simulations hybrides multi-échelles d'écoulements dans des canaux constitués de parois en platine ont été menées pour de l'argon en phase liquide (incompressible) ou gazeuse (compressible), en tenant compte éventuellement du changement de phase au voisinage de la paroi.

Mots-clé :

Micro/nano conduite – Simulation hybride – Multi-Echelle – Méthode de couplage Dynamique Moléculaire/Volume Finis – Transfert Thermique – Phénomène interfaciale – Condensation – Évaporation

Modélisation hybride et multi-échelle
pour la simulation des écoulements et des
transferts thermiques dans les
micro-canaux.

Abstract

The main objective of this thesis is to model the multi-scale heat and fluid flows in micro/nano channels. This method must be able of capturing at the same time the fluid/solid interaction at the small scale but also the flows induced by the inlet/outlet boundary conditions at the large scale. To this aim, we have adopted an approach coupling the continuum model in the bulks of the channel and the discrete model at the vicinity of the wall, based on an atomistic representation of the fluid and the solid.

The Navier-Stokes and energy equations, coupled with an equation of state, are approximated by a finite volume method and the molecular dynamics simulations are used to finely represent the interaction between the fluid and the solid. This hybrid method requires information transmission between the former two regions : averaged quantity in molecular dynamics simulations are imposed as boundary conditions for the continuous model and constrained dynamics, coupled with a thermostat Langevin, is used to control in the molecular level. A set of small molecular dynamics blocks, smartly distributed all along the wall/fluid interface, allows to treat flow and heat transfers in a long micro/nano-channel with a reasonable computational cost.

After a validation step, the hybrid multi-scale simulations of complex fluid flows in the channel composed of the platinum wall have been conducted for argon in incompressible liquid or compressible gaseous phase with and without phase change in the vicinity of the wall.

Keywords :

Micro/nanochannel – Hybrid simulation – Multi-scale flow – Coupled Molecular Dynamics/Finite Volume method – Heat transfer – Interfacial phenomena – Condensation – Evaporation

Hybrid and multi-scale modeling for the
simulation of fluid flows and heat transfer
in microchannels.

Table des matières

Nomenclature	xi
Introduction	1
1 Description microscopique	9
1.1 Équations du mouvement	10
1.2 Algorithme d'intégration	13
1.3 Grandeurs macroscopiques	15
1.4 Conditions aux limites périodiques	20
1.5 Thermostats	21
1.6 Initialisation du système	23
1.7 Techniques d'optimisation	23
1.8 Modèles de mur	29
1.9 Déroulement de la dynamique moléculaire	33
2 Modélisation hybride	35
2.1 Bibliographie	35
2.2 Modélisation macroscopique	42
2.3 Décomposition de domaine	44
2.4 Couplage spatial et zone de recouvrement	46
2.5 Couplage temporel ou couplage itératif	55
2.6 Synthèse de la méthode hybride proposée	56
3 Étude et paramétrage des schémas	59
3.1 Modèle hybride analytique	59
3.2 Structuration du fluide	64

3.3	Étude des paramètres de relaxation	65
3.4	Contraintes constantes ou linéaires	67
3.5	Thermostat 1D/3D	69
3.6	Contrôle de masse volumique	70
3.7	Conclusion	79
4	Simulations hybrides	81
4.1	Écoulements de Couette transitoires	82
4.2	Transfert thermique transitoire	87
4.3	Écoulements de Poiseuille	90
4.4	Écoulements avec changement de phase	94
4.5	Conclusion	98
5	Simulations hybrides multi-échelles	101
5.1	Application de la décomposition de domaine	101
5.2	Écoulements monophasiques non isothermes	104
5.3	Écoulements avec condensation en proche paroi	112
5.4	Écoulements gazeux compressibles	120
5.5	Conclusion	129
	Conclusion et Perspectives	131
	Table des figures	143
	Liste des tableaux	146
	Bibliography	153

Nomenclature

Lettres Latines

Symbole	Description	Unité
c_p	Capacité calorifique massique à pression constante	$m^2.s^{-2}.K^{-1}$
c_v	Capacité calorifique massique à volume constante	$m^2.s^{-2}.K^{-1}$
D	Coefficient de diffusion de masse	$m^2.s^{-1}$
$\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$	Vecteurs de base en coordonnée cartésienne	sans unité
x, y, z	coordonnées cartésiennes	sans unité
\mathbf{F}	Vecteur force	$Kg.m.s^{-2}$
H	Hauteur de canal	m
k	Raideur	N/m
k_B	Constante de Boltzmann	$Kg.m.s^{-3}.K^{-1}$
Kn	Nombre de Knudsen	sans unité
l, L	Profondeur et longueur de canal	m
L_x	Longueur du domaine moléculaire suivant la direction x	m
L_y	Longueur du domaine moléculaire suivant la direction y	m
L_{s-u}	Longueur de glissement dynamique	m
L_{s-T}	Longueur de glissement thermique	m
L_c	Longueur caractéristique	m
m	Masse	Kg
n_b	Nombre de plots moléculaire	sans unité
r_b	Raison	sans unité
N	Nombre de particules dans la boîte de simulation	sans unité
N_x	Nombre de cellules du domaine continu dans la direction x	sans unité
N_z	Nombre de cellules du domaine continu dans la direction z	sans unité
N_E	Nombre d'échantillons	sans unité
p	Pression	$Kg.m^{-1}.s^{-2}$
\mathbf{r}	Vecteur position	m
$\dot{\mathbf{r}}$	Vecteur vitesse	$m.s^{-1}$
$\ddot{\mathbf{r}}$	Vecteur accélération	$m.s^{-2}$
r_c	Rayon de coupure	m

\mathcal{R}	Vecteur des forces aléatoires	$Kg.m.s^{-2}$
r	Constante spécifique des gaz parfaits	$J.Kg^{-1}.K^{-1}$
t	Temps	s
T	Température	K
\mathbf{u}	Vecteur vitesse au niveau macroscopique	$m.s^{-1}$
u	Vitesse au niveau macroscopique dans la direction x	$m.s^{-1}$
v	Vitesse au niveau macroscopique dans la direction y	$m.s^{-1}$
w	Vitesse au niveau macroscopique dans la direction z	$m.s^{-1}$
U	Énergie interne	$Kg.m^2.s^{-2}$
V	Énergie potentielle	$Kg.m^2.s^{-2}$
Z	Facteur compressibilité	sans unité
C→M	Continu vers Moléculaire	sans unité
M→C	Moléculaire vers Continu	sans unité

Lettres grecques

Symbole	Description	Unité
α	Coefficient	sans unité
δt	Pas de temps de la dynamique moléculaire	s
Δt	Pas de temps du continu	s
δ	Épaisseur de condensat	m
Δz	Taille d'une cellule	m
ε	Profondeur du puits de potentiel	$Kg.m^2.s^{-2}$
λ	Conductivité thermique	$Kg.m.s^{-3}.K^{-1}$
$\bar{\lambda}$	Libre Parcours Moyenne	m
μ	Viscosité dynamique	$Kg.m^{-1}.s^{-1}$
ρ	Masse volumique	$Kg.m^{-3}$
σ	Diamètre atomique	m
τ	Temps caractéristique	s
$\bar{\tau}$	Tenseur des contraintes visqueuses	$Kg.m^{-1}.s^{-2}$
\mathbf{I}_d	Tenseur unité	sans unité
ξ	Coefficient	sans unité
∇	Opérateur gradient	sans unité
$\nabla \cdot$	Opérateur divergence	sans unité

Indices et exposants

Symbole	Description
f	Fluide
g	Phase gazeux

<i>in</i>	Entré
<i>l</i>	Phase liquide
<i>M</i>	Moléculaire
<i>C</i>	Continu
<i>O</i>	Zone de recouvrement
<i>w</i>	Mur
<i>a</i>	Analytique
<i>★</i>	Valeur intermédiaire ou valeur réduite
macro	Macroscopique

Introduction

Dans le discours visionnaire du lauréat du prix Nobel Richard Feynman [23], intitulé "Il y a plein de place en bas (*There's Plenty of Room at the Bottom*)", il pose les bases de la course à la miniaturisation qui nous fournit chaque année des ordinateurs, des smartphones, des objets intelligents plus puissants, plus fiables et moins chers. Ces technologies à petites échelles sont appelées micro ou nanotechnologies. Depuis lors, la science et la technologie ont fait un bond en avant, permettant de développer des compétences dans de nombreux domaines disciplinaires. On connaît alors un changement de paradigme de "le plus grand est meilleur" à "le plus petit est mieux". Du fait d'une grande variété d'applications dans le domaine biomédical et en ingénierie, les micro-nanotechnologies ont attiré beaucoup d'attention ces dernières années. La compréhension des caractéristiques hydrodynamiques aux échelles micro et nanoscopiques est importante dans la conception de microsystèmes. Dans les micro-nanotechnologies, la longueur caractéristique de l'échelle microscopique est de l'ordre de 100 nm à 100 μm et celle nanométrique varie de 1 à 100 nm. De plus, les échelles de longueur comprises entre 10 nm et 1 μm sont dites mésoscopiques. Dans ce travail, nous nous sommes intéressés aux écoulements de fluide dans des nano ou micro conduites, ce qui constitue le domaine de la micro-fluidique. La réduction d'échelle des appareils et des composants d'ingénierie apporte de nombreux avantages tels l'augmentation du rapport surface/volume, des systèmes plus légers, une plus faible consommation de matière, des coûts de productions moins élevés et des transferts de chaleurs plus efficaces. Par exemple, pour les applications aérospatiales, des produits plus légers et plus petits sont nécessaires pour réduire la masse et l'encombrement de la charge utile. Pour l'industrie de l'électronique, des échangeurs thermiques de taille microscopique, très efficaces, sont nécessaires pour le refroidissement rapide des circuits électroniques. Concernant les applications médicales, des appareils de laboratoire sur puce permettent d'analyser les maladies des patients sur des temps plus courts et à des coûts financiers moins chers que les méthodes classiques. De plus, ils utilisent des volumes plus faibles (par exemple : des échantillons de sang ou des réactifs coûteux). Un nombre considérable d'applications Micro-Electro-Mechanical Systems (MEMS) sont déjà sur le marché. Il est prévu que de nombreux appareils micrométriques futuristes continuent d'être mis au point.

L'introduction des MEMS (Micro-Electro-Mechanical Systems) dans l'industrie permet de miniaturiser les mécanismes et d'exploiter les effets d'échelles pour gagner en compacité et améliorer la performance. Un nouveau domaine de recherche important en micro/nanotechnologie se développe avec de nouvelles théories et techniques de modélisation pour sonder les phénomènes à ces échelles.

Les approches continues sont reconnues pour leur précision et leur efficacité de calcul lorsqu'elles sont appliquées à des systèmes de tailles macroscopiques. Toutefois, la miniaturisation des systèmes fluides permet d'augmenter les surfaces d'échange dans un volume donné pour, par exemple, accroître les transferts de chaleur à travers une paroi. La diminution des dimensions caractéristiques des écoulements par rapport au libre parcours moyen des molécules engendre l'apparition de phénomènes physiques qui sont classiquement masqués à plus grande échelle, notamment au voisinage des parois. Pour intégrer la physique qui opère à petite échelle, des modèles macroscopiques ont été développés. Ces derniers modélisent les sauts de vitesse Δu (modèle de Navier) et de température ΔT (modèle de Kapitza) et leurs liens *phenomonologiques* avec les contraintes τ et le flux de chaleur q

$$\Delta u = \frac{\tau}{\eta_s} \quad \Delta T = \frac{q}{\kappa_s} \quad (1)$$

et les constantes η_s et κ_s , qui doivent être connues a priori. Ces dernières dépendent du couple fluide-paroi et en particulier des coefficients TMAC (Tangential Momentum Accomodation Coefficient) et EAC (Energy Accomodation Coefficient) selon la théorie cinétique des gaz. Cependant, les relations $\eta_s = f(\text{TMAC})$ et $\kappa_s = g(\text{EAC})$ sont très nombreuses dans littérature. De plus, l'utilisation de deux paramètres est souvent jugée trop simple pour modéliser les collisions gaz-paroi et cela ne capte pas complètement la complexité de la physique proche de la paroi, par exemple l'adsorption, le changement de phase, la présence de la couche de Knudsen [19, 62, 71]. Il existe également des formulations alternatives des expressions (1) basées sur le gradient normal de la vitesse et de la température à la paroi $\partial/\partial \mathbf{n}$. En notant u la composante tangentielle de la vitesse à la paroi et \mathbf{n} le vecteur normal à celle-ci, les nouvelles formulations s'écrivent :

$$\Delta u = L_{s-u} \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} \quad \Delta T = L_{s-T} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} \quad (2)$$

dans laquelle les longueurs L_{s-u} et L_{s-T} sont les paramètres du modèle. Les résultats de la théorie cinétique des gaz montrent que ces deux constantes (L_{s-u} et L_{s-T}) sont également liées de manière implicite aux coefficients d'accommodations TMAC et EAC [36].

De ce constat, des méthodes numériques hybrides ont été développées afin de combiner les avantages de différentes approches pour traiter des écoulements de fluide dans des géométries présentant des échelles caractéristiques très différentes comme par exemple des

micros conduites de grand facteur de forme, des écoulements autour de nanostructures ou encore des microsystèmes complexes. Elles permettent une approche adaptée à la prise en compte de la plus petite échelle caractéristique du système, l'échelle microscopique, et de l'échelle macroscopique pour un coût de calcul raisonnable.

Lorsque l'hypothèse de milieu continu peut être effectuée, les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie (équations de Navier-Stokes et de l'énergie) sont adoptées. L'hypothèse de milieu continu peut être mise en défaut si les effets de parois sont dominants (grande valeur du nombre de Knudsen, effets de glissements dynamique et thermique considérables aux parois) et elle peut ne pas être suffisante si la loi constitutive du fluide est inconnue (pour les fluides non newtoniens). Une approche microscopique adaptée à ces situations doit alors être adoptée pour déterminer les propriétés de glissement et/ou le tenseur des contraintes. Dans la grande majorité des travaux présentant des méthodes hybrides, la dynamique moléculaire est utilisée pour décrire l'échelle microscopique. Néanmoins son coût de calcul prohibitif ne permet de l'utiliser que sur des domaines de simulation de quelques nanomètres et sur quelques nano secondes. De plus, elle est particulièrement bien adaptée à la modélisation de systèmes présentant des conditions aux limites périodiques.

Trois grandes classes de méthodes existent dans la littérature. Elles sont présentées dans la suite sur l'exemple d'une conduite rectiligne micrométrique de grand rapport de forme (voir Fig. 1a).

Historiquement, la première est la méthode de décomposition de domaine DDM (Domain Decomposition Method), comme illustrée dans la figure 1b, introduite par O'Connell et Thompson [53]. L'approche microscopique est utilisée pour décrire les interactions fluide/solide dans des micro-conduites pour des parois lisses ou rugueuses, ou autour de nanotube de carbone. Elle a également été mise en pratique au niveau de singularités apparaissant dans la modélisation continue (coin cavité entraînée). L'approche macroscopique est quant à elle utilisée dans le cœur de l'écoulement, loin des parois. Les équations incompressibles de Navier-Stokes et de l'énergie sont généralement résolues mais une approche de type Boltzmann sur réseau peut également être utilisée. La difficulté est de faire cohabiter les approches micro (dynamique moléculaire) et macroscopique (Navier-Stokes). Pour se faire une zone de recouvrement entre les zones microscopique et macroscopique est utilisée et certaines variables sont échangées de sorte à assurer la continuité des variables primaires et celle des flux associés. Plusieurs approches dédiées aux choix des variables transmises et des conséquences sur la qualité du couplage ont été développées [56]. Afin de supprimer la condition périodique dans la direction orthogonale à l'écoulement, une force de volume est ajoutée afin de maintenir les objets microscopiques dans le domaine de simulation. Initialement la méthode de décomposition traitait uniquement de problème dynamique mais de récentes évolutions ont permis d'y incorporer les transferts thermiques.

Elle permet également une synchronisation temporelle des solutions microscopique et macroscopique où les échelles de temps sont alors couplées. Le temps de simulation est donc contraint par la modélisation microscopique.

Le deuxième type d'approche est la méthode Hybrid Multiscale Method (HMM) introduite par Weiqing et Weinan [57] (voir Fig. 1c). Le domaine est entièrement décrit par une approche macroscopique et des micro résolutions sont utilisées en différents endroits du domaine pour estimer localement des quantités manquantes au solveur macroscopique. Comme pour la méthode de décomposition de domaine, des micro domaines peuvent être placés au niveau des parois pour estimer les propriétés de glissement dynamique et thermique. De plus, ils peuvent être disposés au cœur de l'écoulement pour évaluer des coefficients macroscopiques, comme la viscosité, la conductivité ou le tenseur des contraintes. Néanmoins elle ne permet pas le couplage entre les échelles de temps ; les écoulements traités sont nécessairement stationnaires.

Une dernière approche plus récente (Internal Multiscale Method IMM), est dédiée aux situations où les effets de parois sont prépondérants [7, 8, 10, 54]. Cette dernière méthode est illustrée sur la figure 1d. Des résolution moléculaires sont effectuées dans différentes sections droites de la conduite et les équations de conservation permettent de coupler ces domaines microscopiques. La section des conduites est alors limitée à quelques nanomètres. Seuls les aspects dynamiques sont pris en compte actuellement. Aucune loi constitutive n'est supposée et les différents algorithmes mis en place se basent sur les principes de conservation de la masse et de la quantité de mouvement. Un autre avantage est que cette méthode fonctionne avec des conditions aux limites périodiques des domaines microscopiques dans la directions de l'écoulement. Cette approche a été également utilisée pour l'étude de microsystemes de géométries complexes. Compte tenu des faibles tailles de simulation, cette approche permet, au moins sur des cas simples, des comparaisons avec des simulations de pure dynamique moléculaire. Cette approche est simple à mettre en œuvre car elle ne nécessite pas la connaissance de propriétés macroscopiques particulières de l'écoulement (propriétés de glissement ou de relation sur le tenseur des contraintes). En revanche, cette méthode n'est pas adaptée aux transferts thermiques.

Dans notre approche la décomposition de domaine est utilisée mais l'intégralité de la paroi n'est pas modélisée (voir Fig. 1e). De façon similaire aux méthodes HMM et IMM, le voisinage de la paroi est discrétisé en micro éléments. Dans la suite un micro élément sera dénommé "plot" moléculaire. De cette façon des micro conduites de grande longueur peuvent être simulées ; le transfert d'information des domaines microscopiques au domaine continue est réalisé à partir d'interpolations entre les micros simulations. Cette approche permet de garder les avantages de la méthode de décomposition de domaine pour un coût de calcul limité. Une paroi de longueur millimétrique est substituée par quelques micro simulations de longueur nanométrique. Une attention particulière est portée sur le contrôle

de la masse volumique dans chaque micro simulation. L'algorithme proposé nécessite un découplage des échelles temporelles.

Dans ce travail nous essaierons de distinguer autant que possible le coté hybride, c'est-à-dire le mariage entre les méthodes numériques moléculaire et continue, de l'aspect multi-échelle. Ce dernier fait référence à des situations pour lesquelles plusieurs échelles caractéristiques sont en jeu dans le système étudié. On parlera alors de simulation, ou d'approche hybride multi-échelle lorsque l'approche hybride est utilisée conjointement. Dans les classes de méthodes présentées ci-dessus, les méthodes HMM et IMM sont par nature hybrides et multi-échelles. Elles n'ont que peu d'intérêt pour l'étude de problèmes périodiques ou homogènes. L'approche hybride que nous avons développée fonctionne également pour des problèmes périodiques, comme l'écoulement de Couette, de diffusion thermique et de Poiseuille.

Ce rapport est organisé en cinq chapitres.

Après cette introduction résumant les grandes lignes du travail, le premier chapitre décrit la méthode de dynamique moléculaire. Nous détaillons notamment les interactions, les conditions aux limites, les algorithmes d'intégration et diverses optimisations numériques. Nous présentons également des méthodes de calcul des grandeurs macroscopiques à partir des données issues de simulations de dynamique moléculaire.

Le deuxième chapitre est dédié à la méthode hybride qui consiste à coupler, et si nécessaire à synchroniser, la dynamique moléculaire avec une approche macroscopique. Une analyse des contributions antérieures et des difficultés liées à la méthode de couplage utilisant la décomposition de domaine est dans un premier temps présentée. L'approche macroscopique est ensuite introduite. Nous détaillons enfin les différentes techniques et algorithmes utilisés afin de pouvoir échanger des informations, la masse volumique, la vitesse et la température entre les deux approches.

Dans le troisième chapitre, les paramètres numériques des différents schémas sont analysés. Un modèle hybride analytique permettant d'illustrer la convergence de la méthode hybride et présenté. Il sera également utilisé pour initialiser et paramétrer les simulations multi-échelle. Nous examinons ensuite des principales difficultés rencontrées dans la méthode hybride. Ce chapitre se termine par l'introduction de la méthode de contrôle de la masse volumique dans la région moléculaire.

Le chapitre 4 est consacré aux résultats obtenus en utilisant la méthode hybride sur des problèmes classiques 1D ayant des solutions analytiques. Nous nous sommes intéressés notamment à des problèmes transitoires (Couette et diffusion thermique) ainsi qu'à l'écoulement de Poiseuille en régime stationnaire. Nous examinons enfin des problèmes de changement de phase (condensation et évaporation).

Au chapitre 5, l'approche développée en chapitre 2 est étendue pour tenir compte du

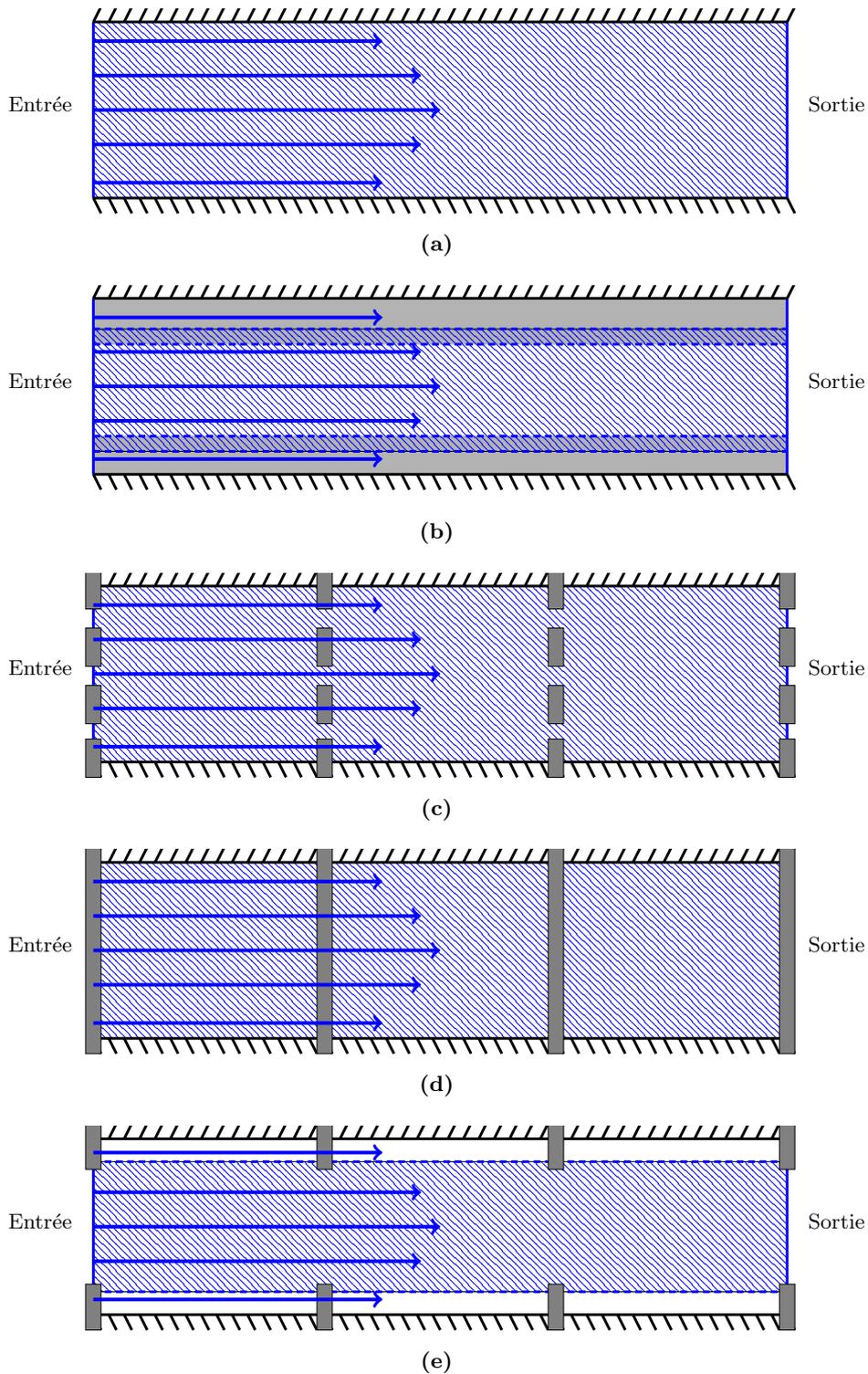


Figure 1 : Schémas des différentes méthodes hybrides multi-échelles adaptées aux écoulements de fluides dans une micro-/nano-conduites (a) par : (b) décomposition du domaine, (c) la méthode HMM, (d) la méthode IMM et (e) la méthode proposée dans ce travail

caractère multi-échelle des transferts dans des écoulements de fluide en micro-conduites de grande extension. Dans un premier temps, la méthode est utilisée pour déterminer les établissements dynamique et thermique dans un micro-canal. Dans un deuxième temps, un écoulement d'un gaz et de son condensat est traité. Enfin, une simulation hybride multi-échelles d'un écoulement compressible est effectuée.

Enfin, nous en tirons des conclusions et présentons des perspectives.

Chapitre 1

Description microscopique

Sommaire

1.1	Équations du mouvement	10
1.2	Algorithme d'intégration	13
1.3	Grandeurs macroscopiques	15
1.4	Conditions aux limites périodiques	20
1.5	Thermostats	21
1.6	Initialisation du système	23
1.7	Techniques d'optimisation	23
1.8	Modèles de mur	29
1.9	Déroulement de la dynamique moléculaire	33

Dans ce chapitre, les principaux ingrédients de la méthode de dynamique moléculaire sont présentés, notamment les interactions, les conditions aux limites, les algorithmes d'intégration et diverses optimisations numériques. Plus de détails peuvent être consultés dans les références [3, 25, 55]. Le but principal est de déterminer les trajectoires d'un ensemble de particules en interaction les unes avec les autres. Cette évolution est obtenue par la résolution numérique des équations classiques du mouvement (équations de Newton). A partir de ces résultats, des quantités d'intérêts (variables thermodynamiques, coefficients ou grandeurs macroscopique, ...) peuvent être extraites afin d'alimenter, par exemple, une modélisation à une échelle de description supérieure, par exemple macroscopique.

Avec anticipation, nous nous excusons auprès du lecteur averti pour le vocabulaire employé pour décrire les aspects microscopiques ou moléculaires. En effet, nous traiterons des écoulements d'argon mais par abus de langage (mais aussi pour limiter les répétitions) nous utiliserons les termes d'*atome*, de *molécule* et de *particule* pour désigner un objet de la simulation de dynamique moléculaire. De même, le terme densité est parfois employé en référence à la masse volumique.

1.1 Équations du mouvement

La dynamique moléculaire classique est basée sur la mécanique newtonienne : les propriétés d'un ensemble de N atomes (ou particules) sont calculées en étudiant la trajectoire de chaque atome au cours du temps. Pour cela, on applique les lois de la mécanique classique aux atomes qui sont assimilés à des masses ponctuelles. Pour une particule i , les équations du mouvement à l'instant t s'écrivent :

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (1.1)$$

où \mathbf{r}_i , $\dot{\mathbf{r}}_i$, $\ddot{\mathbf{r}}_i$ et m_i sont respectivement les vecteurs position, vitesse, et accélération ainsi que la masse de la particule i . On note $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ le potentiel d'interaction entre ces particules dont l'expression sera donnée dans la suite. Le vecteur \mathbf{F}_i , dérivé de ce potentiel, représente la force exercée sur la particule i par l'ensemble des particules qui l'entoure.

Les forces d'interaction élémentaires (ou le potentiel dont elles dérivent) peuvent être calculées à partir des premiers principes de la mécanique quantique : on parle alors de la méthode *ab initio*. En revanche, le plus souvent, elles dérivent d'un potentiel fixé empiriquement : on parle alors de dynamique moléculaire classique.

L'énergie potentielle d'interaction (ou potentiel d'interaction), notée $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ a une expression tirée d'une description de la nature des interactions entre les atomes. Elle fait intervenir des potentiels d'interaction à deux corps, trois corps, ou plus. On peut donc décomposer l'énergie potentielle en termes dépendants des positions atomiques \mathbf{r}_i , des interactions par paires d'atomes \mathbf{r}_{ij} , par triplets et ainsi de suite [21] :

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i=1}^N V_1(\mathbf{r}_i) + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N V_2(\mathbf{r}_{ij}) + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \sum_{k>j>i}^N V_3(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}_{ik}) + \dots \quad (1.2)$$

Le premier terme $V_1(\mathbf{r}_i)$ représente l'énergie potentielle due à un champ extérieur au système. Le terme $V_2(\mathbf{r}_{ij})$ correspond à une interaction de paire, entre les particules i et j , respectivement en \mathbf{r}_i et \mathbf{r}_j . Il ne dépend que de leur position relative $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$, ou précisément de leur distance $r_{ij} = \|\mathbf{r}_{ij}\|$

$$V_2(\mathbf{r}_{ij}) = V_2(r_{ij}) \quad (1.3)$$

Avec le terme à trois corps $V_3(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}_{ik})$, on peut calculer l'interaction d'un triplet de particules en $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k$ qui s'écrit sous la forme

$$V_3(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}_{ik}) = V_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) \quad (1.4)$$

où θ_{jik} est l'angle entre les vecteurs \mathbf{r}_{ij} et \mathbf{r}_{ik} . Ces potentiels sont construits le plus souvent

de manière empirique afin que les simulations effectuées respectent au maximum les propriétés réelles du matériau [3]. En pratique, on se limite à un nombre fini de termes. Dans ce travail, on se contente d'utiliser les deux premiers termes V_1 et V_2 qui sont adaptés à la modélisation d'un fluide monoatomique (ici de l'argon) en interaction avec une paroi composée uniquement d'atomes de platine.

Dans le cas où il n'y a que des interactions de paires dans notre système, la force totale \mathbf{F}_i exercée sur l'atome i introduite dans (1.1) se décompose comme la somme des forces élémentaires \mathbf{f}_{ij} exercées par l'ensemble des molécules j sur la molécule i .

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \mathbf{f}_{ij}, \quad \text{avec} \quad \mathbf{f}_{ij} = -\frac{\partial V_2(r_{ij})}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (1.5)$$

Le potentiel de paire est souvent donné comme une fonction de la distance interatomique, ce qui permet de déterminer aisément la force élémentaire \mathbf{f}_{ij} de j sur i , par exemple

$$\mathbf{f}_{ij} = -\frac{\partial V_2(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial \mathbf{r}_i} = \frac{dV_2(r_{ij})}{dr_{ij}} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}}, \quad \mathbf{f}_{ij} = -\mathbf{f}_{ji} \quad (1.6)$$

La formule ci-dessus montre que la force d'interaction est colinéaire au vecteur joignant les deux atomes. Le potentiel de paire le plus utilisé est celui de Lennard-Jones (noté LJ) qui est basé sur l'approximation sphérique des molécules et combine un terme répulsif en $1/r^{12}$, et un terme attractif, issu des forces de Van Der Waals, en $1/r^6$. Pour deux particules i et j distantes de r , il s'écrit :

$$V(r) = 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right] \quad (1.7)$$

où l'intensité de l'interaction est donnée par ε_{ij} tandis que σ_{ij} est le diamètre atomique défini par la valeur nulle de l'énergie potentielle.

Comme en mécanique des fluides ou dans d'autres domaines de la physique, il est souvent utile d'utiliser le principe de similitude (ou loi des états correspondants) et de travailler avec des grandeurs sans dimensions (ou unités réduites) notées temporairement avec l'exposant $*$. Ainsi, les échelles microscopiques de longueur σ , d'énergie ε et de masse m ainsi que la constante de Boltzmann k_B permettent de définir les échelles de références nécessaires au passage des quantités physiques aux quantités réduites. Pour de l'argon à 120 K, les valeurs des échelles de base σ , ε et m ainsi que les échelles qui en sont déduites (vitesse, pression, ...) sont répertoriées dans le tableau 1.1.

Avec le principe de similitude et pour des interactions entre deux molécules du même type

Constante de Boltzmann	k_B	$1,3807 \times 10^{-23}$	J/K
distance intermoléculaire	σ	$3,405 \times 10^{-10}$	m
masse (1 molécule)	m	$6,6335 \times 10^{-26}$	kg
énergie	ε	$1,6540 \times 10^{-21}$	J
température	ε/k_B	120	K
temps	$\sqrt{m\sigma^2/\varepsilon}$	$2,1564 \times 10^{-12}$	s
vitesse	$\sqrt{\varepsilon/m}$	157,90	m/s
force	ε/σ	$4,8576 \times 10^{-12}$	N
pression	ε/σ^3	$41,8972 \times 10^6$	Pa
masse volumique	m/σ^3	1680,31	kg/m ³
puissance	$\sqrt{\varepsilon^3/m\sigma^2}$	$7,6703 \times 10^{-10}$	W
viscosité dynamique	$\sqrt{\varepsilon m}/\sigma^2$	$9,0345 \times 10^{-5}$	Pa · s
conductivité thermique	$k_B\sqrt{\varepsilon/m}/\sigma^2$	0,0188	W/m/K
capacité thermique volumique	k_B/σ^3	$3,49742 \times 10^5$	J/m ³ /K
capacité thermique massique	k_B/m	208,1405	J/kg/K

Tableau 1.1 : Définition des constantes et grandeurs de référence pour l'argon à 120 K.

($\varepsilon_{ij} = \varepsilon$ et $\sigma_{ij} = \sigma$), le potentiel d'interaction (1.7) s'écrit en unités réduites :

$$V^*(r^*) = 4 \left[\left(\frac{1}{r^*} \right)^{12} - \left(\frac{1}{r^*} \right)^6 \right]. \quad (1.8)$$

De même, la force résultante projetée sur le vecteur unitaire \mathbf{e}_r est :

$$F^*(r^*) = \mathbf{F}^*(\mathbf{e}_r) \cdot \mathbf{r}^* = 48 \left[\left(\frac{1}{r^*} \right)^{14} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r^*} \right)^8 \right] r^* \quad (1.9)$$

avec r^* la distance entre deux molécules et \mathbf{e}_r le vecteur unitaire portée par la droite passant par \mathbf{r}_i et \mathbf{r}_j . Les fonctions $V^*(r^*)$ et $F^*(r^*)$ sont présentées en figure 1.1.

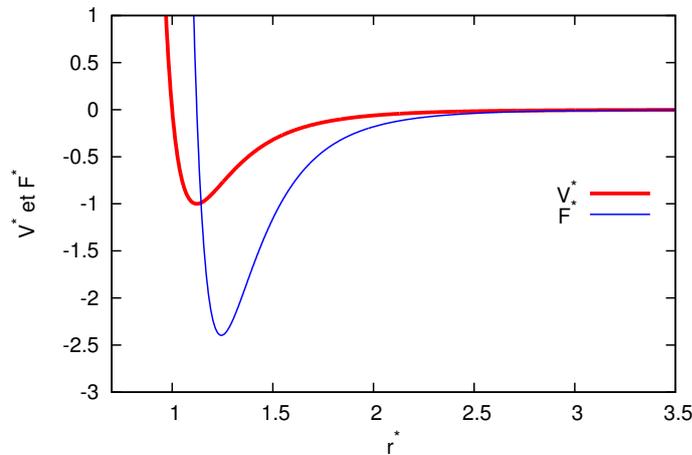


Figure 1.1 : Potentiel de Lennard-Jones et force en unités réduites en fonction de la distance intermoléculaire réduite.

On illustre le changement de variable pour les grandeurs thermodynamiques pression, masse volumique et température ainsi que pour la masse d'une particule :

$$\begin{aligned} p^* &= \frac{\sigma^3}{\varepsilon} p \\ \rho^* &= \frac{\sigma^3}{m} \rho \\ T^* &= \frac{k_B}{\varepsilon} T \\ m_i^* &= \frac{m_i}{m} \end{aligned} \tag{1.10}$$

où σ , ε sont les paramètres du potentiel du couple en interaction, m la masse de la particule et k_B la constante de Boltzmann. L'utilisation de variables réduites permet de rendre universelle l'équation d'état d'un fluide de Lennard-Jones $p^*(\rho^*, T^*)$, qui ne dépend plus alors des paramètres moléculaires. Des lois d'état associées au potentiel de Lennard-Jones peuvent être trouvées dans les références [35, 37, 45, 49]. Dans la suite, par commodité d'écriture, les $*$ seront oubliés et toutes les variables ou paramètres seront, sauf précision contraire, présentés sans unité.

1.2 Algorithme d'intégration

Dans cette section, nous décrivons les algorithmes numériques qui sont utilisés pour résoudre les équations du mouvement présentées ci-dessus. La résolution des équations du mouvement se fait de manière discrète en utilisant la méthode des différences finies pour la discrétisation du terme temporel. Si à un instant donné t les vecteurs position, vitesse et accélération d'une particule sont connus, on peut alors calculer cet ensemble à l'instant $t + \delta t$, où δt est le pas de temps d'intégration. Pour réaliser des simulations de dynamique moléculaire efficaces et précises, on a donc besoin d'un algorithme ayant les qualités suivantes :

- une forme simple et facile à programmer.
- une grande précision pour un coût informatique le plus faible possible.
- autorisant l'utilisation de grands pas d'intégration δt .
- qu'il soit réversible en temps.
- demandant un calcul des forces peu fréquent.
- garantissant la conservation de l'énergie totale E du système et de son moment cinétique.

Ce dernier point est lié, à la fois à l'algorithme d'intégration temporelle et au choix du pas de temps. Le pas de temps δt est un élément très important de la simulation puisqu'il représente le temps qui s'écoule entre chaque mouvement discret des atomes. Lorsqu'il est trop petit, bien que l'on se rapproche de la solution exacte des équations différentielles,

le coût de calcul devient trop important. Si ce pas de temps est trop grand, la simulation devient instable à cause d'augmentation trop importante des erreurs numériques ce qui entraîne une dérive de l'énergie du système. Généralement, on prend $\delta t = 5 \times 10^{-3}$ (de l'ordre de quelques femtosecondes de 10^{-14} à 10^{-15} secondes).

Nous avons choisi dans la suite d'utiliser l'algorithme Verlet-Vitesse, qui est relativement simple à mettre en œuvre, demande peu de mémoire et assure une bonne conservation de l'énergie totale. Le schéma s'obtient par des développements de Taylor à l'ordre 4 en temps et génère une erreur de troncature locale en $\mathcal{O}(\delta t^3)$ pour les positions et les vitesses. La première étape consiste à calculer la position de chaque particule i au temps $t + \delta t$.

$$\mathbf{r}_i(t + \delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \delta t \dot{\mathbf{r}}_i(t) + \frac{1}{2} \delta t^2 \ddot{\mathbf{r}}_i(t) + \mathcal{O}(\delta t^3) \quad (1.11)$$

Ensuite, à partir de ces nouvelles positions, l'accélération au temps $t + \delta t$ est calculée en fonction du potentiel d'interaction :

$$\ddot{\mathbf{r}}_i(t + \delta t) = \frac{1}{m_i} \mathbf{F}_i(t + \delta t) \quad (1.12)$$

avec \mathbf{F}_i calculé à partir de l'équation (1.9). Enfin, on utilise l'expression de l'accélération pour obtenir la vitesse au temps $t + \delta t$

$$\dot{\mathbf{r}}_i(t + \delta t) = \dot{\mathbf{r}}_i(t) + \delta t \frac{\ddot{\mathbf{r}}_i(t) + \ddot{\mathbf{r}}_i(t + \delta t)}{2} + \mathcal{O}(\delta t^3) \quad (1.13)$$

Comme mentionné précédemment, l'erreur de troncature locale entre les pas de temps t et $t + \delta t$ varie en $\mathcal{O}(\delta t^3)$. Cet ordre est retrouvé en calculant l'erreur commise sur un pas de temps, en partant d'une solution exacte. Lorsqu'on intègre pour des temps plus longs, l'erreur cumulée est en $\mathcal{O}(\delta t^2)$.

On note que ce schéma est équivalent à une variante du schéma saute-mouton ou Leapfrog (présenté notamment dans [11, 55]) qui fait apparaître des vitesses intermédiaires au temps $t + \delta t/2$. L'erreur de troncature locale sur la demi-itération est en $\mathcal{O}(\delta t^2)$ mais celle sur l'itération complète reste en $\mathcal{O}(\delta t^3)$. Pratiquement, c'est cette dernière version qui est implémentée dans le code. La première étape est très similaire au schéma Verlet-Vitesse mais elle introduit la vitesse au temps intermédiaire $t + \delta t/2$:

$$\dot{\mathbf{r}}_i(t + \delta t/2) = \dot{\mathbf{r}}_i(t) + \frac{\delta t}{2} \ddot{\mathbf{r}}_i(t) \quad (1.14)$$

Afin de réduire le nombre d'opérations numériques effectuées à chaque itération, la position est recalculée à partir de la vitesse intermédiaire :

$$\mathbf{r}_i(t + \delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \delta t \dot{\mathbf{r}}_i(t + \delta t/2) \quad (1.15)$$

On retrouve (1.11) en injectant (1.14) dans (1.15). L'accélération $\ddot{\mathbf{r}}_i(t + \delta t)$ est mise à jour avec l'équation (1.12) puis la vitesse est recalculée au temps $t + \delta t$:

$$\dot{\mathbf{r}}_i(t + \delta t) = \dot{\mathbf{r}}_i(t + \delta t/2) + \frac{\delta t}{2} \ddot{\mathbf{r}}_i(t + \delta t) \quad (1.16)$$

Comme mentionné en préambule, ce schéma nécessite un seul calcul coûteux de la force d'interaction par pas de temps. De plus, pour un système composé de N atomes, cette dernière version du schéma requiert une allocation de $9N$ réels pour sauvegarder les $3N$ coordonnées des vecteurs position, vitesse et accélération. Les positions, vitesses et accélérations sont mises à jour à chaque itération sans avoir besoin de conserver leurs valeurs au pas de temps précédent.

Les erreurs numériques propres au choix du schéma d'intégration peuvent se manifester par une dérive de l'énergie totale du système au cours du temps. Il faut donc que le pas de temps δt soit petit devant le temps moyen entre deux interactions (équivalent à une condition de Courant-Friedrichs-Lewy en mécanique des fluides).

D'autres auteurs préfèrent des algorithmes de type Prédicteur-Correcteur de Gear [27] qui ont l'avantage d'être très stables et d'ordre plus élevé. En contrepartie, ils sont généralement non réversible en temps et gourmands en espace mémoire [55].

1.3 Grandeurs macroscopiques

La méthode de dynamique moléculaire permet de décrire explicitement les trajectoires de l'ensemble des atomes d'un système. Les propriétés physiques et les grandeurs macroscopiques associées au système peuvent être calculées avec précision à partir des positions et des vitesses des atomes. Dans la suite, on présente l'une des notions de base de l'ensemble statistique et la définition de quelques grandeurs statiques en introduisant la notion de moyenne instantanée. Nous détaillerons dans la suite plusieurs façons de définir et d'utiliser des moyennes afin d'améliorer la précision des grandeurs calculées.

1.3.1 Ensemble statistique

En physique statistique, l'une des notions de base est l'hypothèse ergodique dans laquelle les valeurs moyennes au cours du temps des grandeurs physiques sont égales aux valeurs moyennes statistiques. Soit une grandeur physique $\Phi(\mathbf{r}^N, \dot{\mathbf{r}}^N)$, fonction de l'état microscopique du système caractérisé par les N positions $\mathbf{r}^N = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ et les vitesses $\dot{\mathbf{r}}^N = (\dot{\mathbf{r}}_1, \dot{\mathbf{r}}_2, \dots, \dot{\mathbf{r}}_N)$ de ses N particules. Cette hypothèse est exprimée par :

$$\bar{\Phi} = \langle \Phi \rangle, \quad \bar{\Phi} \equiv \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \Phi(t) dt, \quad \langle \Phi \rangle \equiv \sum_i p_i \Phi_i \equiv \int \Phi f(\mathbf{r}^N, \dot{\mathbf{r}}^N) d\mathbf{r}^N d\dot{\mathbf{r}}^N, \quad (1.17)$$

où $\overline{\Phi}$ et $\langle \Phi \rangle$ sont respectivement la valeur moyenne au cours du temps et la valeur moyenne d'ensemble de la quantité Φ . On note p_i la probabilité de trouver le système dans l'état microscopique i et Φ_i est la valeur de Φ pour cet état microscopique i . La dernière expression représente la forme continue dans l'espace de phase du système avec l'introduction de la densité de probabilité f . Les systèmes physiques pour lesquels l'hypothèse ergodique est valable sont appelés systèmes ergodiques. Cette hypothèse nous permet de remplacer la moyenne de plusieurs échantillons par la moyenne d'un échantillon unique sur plusieurs instants, ce qui correspond à une moyenne temporelle. Cette technique convient parfaitement à la stratégie de calcul de la dynamique moléculaire dans le cas d'un unique échantillon. En pratique une simulation équivaut à un échantillon. Des moyennes d'ensemble peuvent être faites entre plusieurs simulations.

Les systèmes macroscopiques réels contenant de nombreuses particules sont des systèmes complexes. En principe, pour caractériser complètement un système à l'équilibre de N particules, nous devons connaître les trois composantes des vecteurs position et vitesse pour chaque particule. Il est impossible d'obtenir ces $6N$ quantités pour un système réaliste. Par exemple, à pression et température ambiante, un micromètre cube d'air contient 25 millions de molécules. Cependant, ne pas connaître toutes les informations sur toutes les particules n'empêche pas de calculer les propriétés macroscopiques du système à l'équilibre. En fait, les quantités telles que l'énergie, la température ou la pression sont calculées comme des quantités moyennes statistiques d'un assez grand nombre $n \ll N$ de particules supposé représenter correctement le système macroscopique réel à N particules.

Les caractéristiques macroscopiques qui restent constantes dans un ensemble sont souvent utilisées pour désigner cet ensemble. Par exemple, lors de l'intégration des équations de Newton pour un système de N particules occupant un volume V , l'énergie totale E du système est conservée. On se trouve alors dans le cas de l'ensemble statistique micro-canonique (NVE). Il existe d'autres ensembles statistiques, par exemple :

- l'ensemble canonique (NVT), où le nombre de particules N , le volume V et la température T sont constants. Cet ensemble est souvent utilisé en mécanique statistique.
- l'ensemble isobare-isotherme (NPT), où le nombre de particules N , la pression P et la température T sont constants, qui correspond aux conditions pour lesquelles plusieurs expériences physiques sont effectuées.
- l'ensemble grand-canonique (μVT), où le potentiel chimique μ , le volume V et la température T sont constants. Cet ensemble est souvent employé pour des systèmes ouverts (échange de chaleur et de matière avec l'extérieur).

Normalement, les algorithmes de dynamique moléculaire utilisent souvent l'ensemble micro-canonique (NVE). L'échantillonnage de l'espace des phases dans un autre ensemble statistique nécessite une modification des équations du mouvement.

1.3.2 Grandeurs statistiques

Les méthodes de dynamique moléculaire décrivent explicitement tous les atomes dans le système et les propriétés physiques du système peuvent être calculées avec précision à partir des positions et des vitesses des atomes.

L'énergie interne. Elle est définie comme la somme des énergies cinétique E_c et potentielle E_p . Ces dernières sont des grandeurs moyennes instantanées.

Pour un système à N particules, l'énergie potentielle E_p et l'énergie cinétique E_c sont données par :

$$E_p = \sum_{i=1}^N E_i^e + V_{pot} \quad (1.18)$$

$$E_c = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i (\dot{\mathbf{r}}_i - \mathbf{v})^2 \quad (1.19)$$

où E_i^e est le potentiel d'interaction externe appliqué à la particule i (terme V_1 de l'équation (1.2)) et V_{pot} est le potentiel interne total du système ($V_2 + V_3 + \dots$ de l'équation (1.2)). $\dot{\mathbf{r}}_i$ est la vitesse de la particule i et \mathbf{v} est la vitesse barycentrique du système.

La température. Comme évoqué précédemment, suivant le type de modélisation, la température n'est pas toujours constante. Elle peut être déduite de l'énergie cinétique du système grâce au théorème de l'équipartition de l'énergie qui énonce que l'énergie totale d'un système à l'équilibre thermodynamique est répartie en parts égales, en moyenne, entre ses différentes composantes. On obtient :

$$E_c = \frac{k_B T}{2} (3N - N_c) \quad (1.20)$$

où N_c est le nombre de contraintes externes exercées sur le système et k_B est la constante de Boltzmann. Pour un système avec $N_l = 3N - N_c$ degrés de liberté internes, la température s'écrit :

$$T = \frac{2E_c}{N_l k_B} \quad (1.21)$$

La pression. Elle est calculée à partir du théorème du Viriel et s'exprime comme la somme de deux termes : l'un correspond à une contribution de type gaz parfait (cinétique), l'autre fait intervenir les interactions entre les particules :

$$p = \frac{1}{3V_c} \left(2E_c + \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \mathbf{f}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij} \right\rangle \right) \quad (1.22)$$

où V_c est le volume de contrôle sur lequel est évaluée la pression, $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ le vecteur distance et \mathbf{f}_{ij} est la force d'interaction que j exerce sur i .

1.3.3 Calcul pratique des moyennes

Cette sous-section présente brièvement la façon dont les grandeurs macroscopiques sont calculées à partir des données issues de simulations de dynamique moléculaire. Pour faciliter la présentation, un schéma de principe est proposé en figure 1.2. Cette figure présente les différentes moyennes pour un seul domaine rectangulaire de dynamique moléculaire. Le domaine est discrétisé en 4×6 cellules élémentaires, à différents instants (t_1, \dots, t_4) pour trois échantillons indépendants (E_1 , E_2 et E_3). La moyenne spatiale d'une grandeur Φ , par exemple sur la sous-cellule $M_{(2,3)}$, pour l'échantillon E_1 et au temps t_2 s'écrit :

$$\langle \Phi \rangle_{M_{(2,3)}T_2E_1} = \frac{\sum_{i=1}^{N_{M_{(2,3)}}^{E_1}(t_2)} \Phi_i^{E_1}(t_2)}{N_{M_{(2,3)}}^{E_1}(t_2)}$$

avec $\Phi_i^{E_1}(t_2) = \Phi^{E_1}(\mathbf{r}_i(t_2))$ la variable à la position \mathbf{r}_i au temps t_2 pour l'échantillon E_1 et $N_{M_{(2,3)}}^{E_1}(t_2)$ le nombre de particules dans la cellule $M_{(2,3)}$. Comme le nombre de molécules est souvent trop faible pour obtenir une évaluation précise des grandeurs moyennes, cette dernière définition est étendue, grâce à l'hypothèse d'ergodicité, à un intervalle de temps (ex. $\langle \Phi \rangle_{M_{(4,5)}T_{1-4}E_3}$ en vert, Fig. 1.2), puis pour différents échantillons (ex. $\langle \Phi \rangle_{M_{(2,4)}T_{3-4}E_{1-3}}$ en bleu, Fig. 1.2). Donc, la moyenne d'une grandeur $\langle \Phi \rangle$ dans la cellule M , sur le temps $[t_0, t_0 + (N_T - 1)\delta t]$ et les échantillons N_E est définie par :

$$\langle \Phi \rangle_{MTE} = \frac{\sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_T} \sum_{i=1}^{N_M^{E_k}(t_j)} \Phi_i^{E_k}(t_j)}{\sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_T} N_M^{E_k}(t_j)} \quad (1.23)$$

avec $\Phi_i^{E_k}(t_j) = \Phi^{E_k}(\mathbf{r}_i(t_j))$, $N_M^{E_k}(t_j)$ le nombre de particules contenues dans la cellule M au temps $t_j \stackrel{\text{def}}{=} t_0 + (j - 1)\delta t$ et pour l'échantillon E_k et N_T le nombre d'itérations temporelles. Il convient de souligner que l'équation (1.23) restitue les définitions habituelles pour des moyennes sur l'espace, simplement noté $\langle \Phi \rangle_M$, dans l'espace et le temps, $\langle \Phi \rangle_{MT}$, et puis dans l'espace pour plusieurs échantillons $\langle \Phi \rangle_{ME}$. Par exemple, les grandeurs macroscopiques instantanées de la vitesse et de la température pour l'échantillon E_1 , dans la cellule qui a N particules, s'écrivent :

$$\mathbf{u}(t) = \langle \dot{\mathbf{r}}(t) \rangle_M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \dot{\mathbf{r}}_i(t)$$

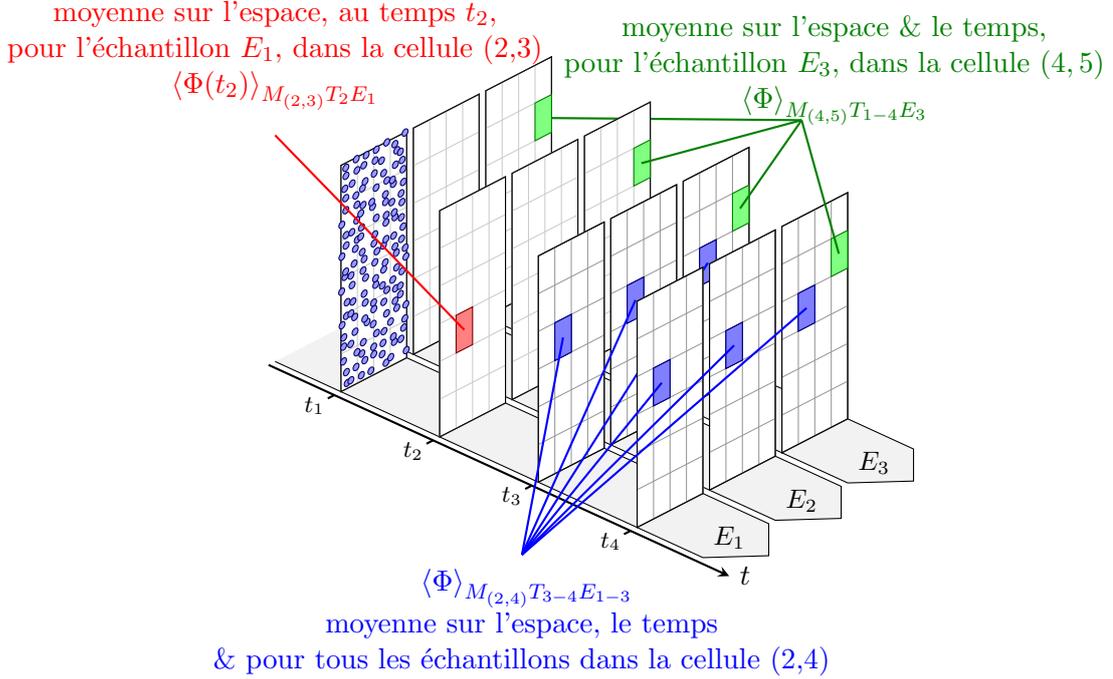


Figure 1.2 : Représentation graphique des trois types de moyenne. Un domaine moléculaire 2D rectangulaire est dessiné à 4 instants (t_1, \dots, t_4) et pour 3 échantillons (E_1, E_2, E_3). Ce domaine est également sous-divisé en 4×6 sous-domaines rectangulaires. Trois types de moyennes peuvent être calculés en fonction de l'espace (sur une ou plusieurs sous-divisions du domaine), du temps ou des échantillons, ou bien toute combinaison de ces variables.

et

$$T(t) = \frac{2}{3k_B} \left\langle \frac{1}{2} m (\dot{\mathbf{r}}(t) - \mathbf{u}(t))^2 \right\rangle_M = \frac{2}{3k_B} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m (\dot{\mathbf{r}}_i(t) - \mathbf{u}(t))^2 \right)$$

Un autre type de moyenne est souvent utilisé dans la littérature. Il consiste à calculer la vitesse macroscopique en mesurant la vitesse moyenne des particules dans une cellule, puis une moyenne de cette moyenne sur les échantillons. Mais pour les systèmes loin de l'équilibre, c'est-à-dire lorsque le gradient de vitesse ou de température est grand, un biais peut apparaître avec cette dernière définition, contrairement à la formule donnée dans (1.23). Une étude et une synthèse de l'utilisation des différents types de moyennes peuvent être consultées dans la référence [73].

Une valeur moyenne est généralement assortie d'une déviation ou écart type. Son calcul n'est possible que si on compare à une valeur moyenne des grandeurs du même ordre. On ne peut donc, par exemple, pas construire d'écart type avec les vitesses instantanées de chaque molécule et la vitesse moyenne puisque $\|\dot{\mathbf{r}}_i\| \gg \|\mathbf{u}\|$.

L'écart type est construit dans ce travail en regardant les fluctuations de la moyenne spatio-temporelle MT définie pour chaque échantillon, par rapport à la moyenne totale

MTE . Dans le cas où la moyenne $\langle\langle\Phi\rangle_{MT}\rangle_E$ est construite avec des pondérations de la moyenne $\langle\Phi\rangle_{MT}$, on trouve :

$$\langle\langle\Phi\rangle_{MT}\rangle_E = \sum_{k=1}^{N_E} \frac{N^{E_k}}{M} \langle\Phi^{E_k}\rangle_{MT} = \sum_{k=1}^{N_E} \frac{N^{E_k}}{M} \frac{\sum_{j=1}^{N_T} \sum_{i=1}^{N_M^{E_k}(t_j)} \Phi_i^{E_k}(t_j)}{\sum_{j=1}^{N_T} N_M^{E_k}(t_j)} = \langle\Phi\rangle_{MET} \quad (1.24)$$

où $N^{E_k} = \sum_{j=1}^{N_T} N_M^{E_k}(t_j)$ est le nombre de valeurs spatio-temporelles de l'échantillon E_k et $M = \sum_{k=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_T} N_M^{E_k}(t_j) = \sum_{k=1}^{N_E} N^{E_k}$ est le nombre total de valeurs.

L'écart type, construit sur le même principe, est donné par

$$\begin{aligned} \sigma_\Phi^E &= \sqrt{\sum_{k=1}^{N_E} \frac{N^{E_k}}{M} (\langle\Phi^{E_k}\rangle_{MT} - \langle\Phi\rangle_{MET})^2} \\ &= \sqrt{\sum_{k=1}^{N_E} \frac{N^{E_k}}{M} \langle\Phi^{E_k}\rangle_{MT}^2 - 2 \sum_{k=1}^{N_E} \frac{N^{E_k}}{M} \langle\Phi^{E_k}\rangle_{MT} \langle\Phi\rangle_{MET} + \sum_{k=1}^{N_E} \frac{N^{E_k}}{M} \langle\Phi\rangle_{MET}^2} \quad (1.25) \\ &= \sqrt{\sum_{k=1}^{N_E} \frac{N^{E_k}}{M} \langle\Phi^{E_k}\rangle_{MT}^2 - \langle\Phi\rangle_{MET}^2} \end{aligned}$$

1.4 Conditions aux limites périodiques

Lors de la simulation, l'environnement des atomes périphériques est biaisé du fait des effets de bord comparés aux atomes situés au centre de la boîte. Pour s'en affranchir, il faut s'assurer que l'environnement des atomes devienne indépendant de leur position. On recourt ainsi aux conditions aux limites périodiques qui consistent à répliquer une boîte contenant un ensemble fini de particules dans les trois directions de l'espace (voir Fig. 1.3). Cela permet d'éviter les problèmes de modélisation de la réflexion sur les bords. Les forces agissant sur les particules sont alors équivalentes à celles d'un système beaucoup plus grand et donc plus réaliste. Les positions des atomes dans la boîte centrale sont copiées dans toutes les boîtes images. Par conséquent, si une particule quitte la boîte centrale au cours de la simulation, elle est remplacée par une particule image d'une boîte adjacente du côté opposé avec les mêmes vitesse et accélération. Le nombre d'atomes dans la boîte centrale reste donc constant. Dans la direction \mathbf{e}_x et pour un domaine compris entre $-L_x/2$ et $L_x/2$, si la molécule i sort du domaine au cours de l'intégration temporelle, sa nouvelle

position \mathbf{r}_i^{new} est corrigée :

$$\mathbf{r}_i^{new} \cdot \mathbf{e}_x = \begin{cases} \mathbf{r}_i^{old} \cdot \mathbf{e}_x - L_x & \text{si } \mathbf{r}_i^{old} \cdot \mathbf{e}_x > L_x/2 \\ \mathbf{r}_i^{old} \cdot \mathbf{e}_x + L_x & \text{si } \mathbf{r}_i^{old} \cdot \mathbf{e}_x < -L_x/2 \end{cases} \quad (1.26)$$

où \mathbf{r}_i^{old} est la position après intégration sans prise en compte de la périodicité. Cette modification se généralise également aux distances lors du calcul des forces.

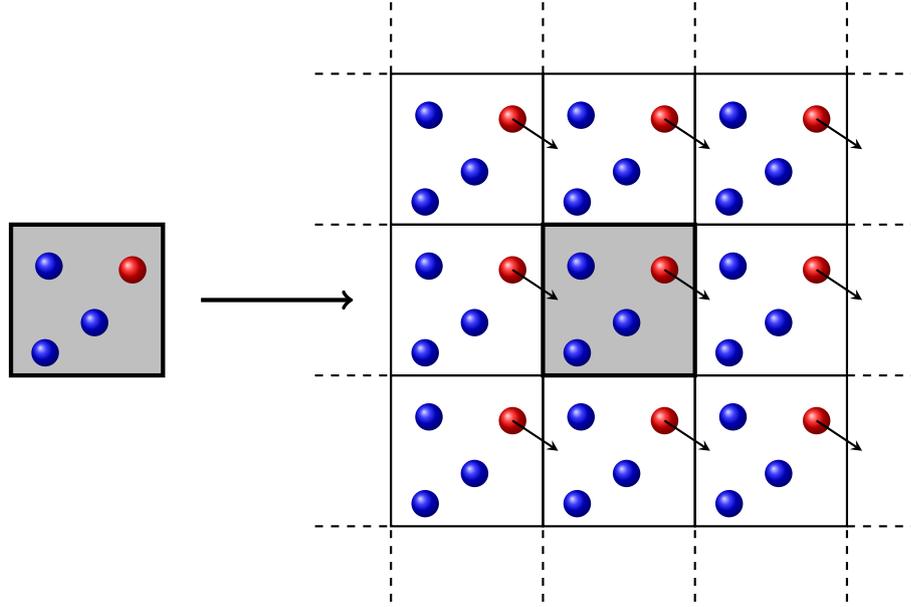


Figure 1.3 : Conditions périodiques aux limites. La boîte de simulation est représentée au centre en gris. Les boîtes images sont sur fond blanc. Une molécule (rouge) qui quitte le domaine de simulation est ré-introduite à l'opposé.

Les calculs d'énergie sont effectués sur les molécules de la boîte centrale. Les interactions non liées aux molécules proches des frontières de la boîte centrale sont calculées à l'aide des molécules virtuelles des boîtes avoisinantes.

Avec la méthode des conditions aux limites périodiques, on ne peut toutefois pas étudier des fluctuations d'amplitudes plus grande que la demi-dimension de la boîte.

1.5 Thermostats

Les simulations classiques de dynamique moléculaire se font en général dans l'ensemble micro-canonique NVE , c'est-à-dire dans un ensemble où le nombre de molécules N , le volume V et l'énergie totale E sont des constantes. Pour certains problèmes, il est néanmoins préférable de travailler dans d'autres ensembles, par exemple dans l'ensemble canonique NVT si l'on veut travailler avec une température T_0 constante. Il faut alors mettre en place un contrôle de la température du système via un thermostat. Il existe plusieurs façons de

réaliser cela [5, 33, 52, 55]. Dans ce travail, trois grandes méthodes sont présentées pour des systèmes à l'équilibre (de vitesse moyenne nulle) : la mise à l'échelle des vitesses (ou scaling) ainsi que les thermostats de Berendsen et Langevin.

1.5.1 Scaling des vitesses

Cette technique [55], sans doute la plus simple, consiste à recalibrer périodiquement les vitesses. Si la température du système est T et celle de contrôle est T_0 , alors au cours d'une itération, on multiplie toutes les vitesses microscopiques $\dot{\mathbf{r}}_i$ par le facteur $\sqrt{T_0/T}$:

$$\dot{\mathbf{r}}_i^{new} = \dot{\mathbf{r}}_i^{old} \sqrt{\frac{T_0}{T}} \quad (1.27)$$

où $\dot{\mathbf{r}}_i^{new}$ est la vitesse après thermalisation et $\dot{\mathbf{r}}_i^{old}$ l'ancienne vitesse de la particule i .

Cependant, cette méthode entraîne des sauts artificiels d'énergie totale du système. De manière générale les thermostats ne permettent pas une conservation de l'énergie du système (ensemble NVT). C'est pourquoi elle est plutôt utilisée au cours de l'initialisation du système (mise à l'équilibre, thermalisation).

1.5.2 Thermostat de Berendsen

Cette technique [5, 34] consiste à relaxer la température instantanée T vers une valeur de référence T_0 . Ainsi, les vitesses des particules se trouvent modifiées de telle sorte que :

$$\dot{\mathbf{r}}_i^{new} = \dot{\mathbf{r}}_i^{old} \sqrt{1 + \frac{\delta t}{\tau_T} \left(\frac{T_0}{T} - 1 \right)} \quad (1.28)$$

où τ_T est un paramètre qui contrôle le temps de relaxation de la température du système, $\dot{\mathbf{r}}_i^{new}$ est la vitesse après thermalisation, $\dot{\mathbf{r}}_i^{old}$ l'ancienne vitesse de la particule i et δt est le pas d'intégration. Si $\tau_T = \delta t$, on retrouve la méthode précédente qui peut être vue comme une relaxation instantanée vers la température souhaitée.

1.5.3 Thermostat de Langevin

Dans cette méthode, on utilise l'équation du mouvement de Langevin qui permet de coupler le mouvement des atomes à un bain thermostatique par l'inclusion de termes de friction et stochastiques dans l'équation de Newton de la dynamique classique [5, 34, 43] :

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i - m_i \gamma_i \dot{\mathbf{r}}_i + \mathcal{R}_i(t) \quad (1.29)$$

où γ_i est un terme de friction dissipatif qui s'oppose au mouvement de l'atome i et $\mathcal{R}_i(t)$ est une force aléatoire due au mouvement brownien des particules virtuelles et qui vérifie $\langle \mathcal{R}_i(t) \rangle = \mathbf{0}$. Les termes γ_i et $\mathcal{R}_i(t)$ sont couplés :

$$|\mathcal{R}_i(t)| = \sqrt{\frac{2m_i\gamma_i k_B T}{\delta t}} \xi(t) \quad (1.30)$$

où $\xi(t)$ représente une variable aléatoire tirée d'une distribution gaussienne d'écart type unitaire à chaque instant t . Dans la dynamique de Langevin, l'échange de chaleur avec le bain thermique virtuel est continu.

1.6 Initialisation du système

Avant qu'une simulation ne puisse être réalisée, il est nécessaire de définir les positions, les vitesses et les accélérations initiales pour toutes les particules du système. Par exemple, si l'objectif de la simulation est d'obtenir une propriété macroscopique caractérisant l'état du fluide à l'équilibre, le choix de l'état initial ne doit avoir aucun effet sur les résultats de la simulation. Ceci est vrai uniquement si l'état d'équilibre est unique. La taille de la boîte de simulation doit être choisie de manière appropriée en fonction du type de système étudié. En général, deux techniques sont utilisées pour initialiser le système.

La première consiste, soit à placer les particules selon un réseau cristallin bien précis, soit de les disposer de manière totalement aléatoire. Les vitesses initiales sont tirées à partir de la distribution de Maxwell-Boltzmann correspondant à la température moyenne du système considéré. Les accélérations initiales sont toujours nulles. Cependant cette méthode ne permet pas d'obtenir la température souhaitée dès les premières itérations. On utilise alors un thermostat de type *scaling des vitesses* pour contrôler T .

La deuxième technique consiste à considérer des positions, vitesses et accélérations d'une simulation précédente comme configuration initiale de la nouvelle simulation. Cette dernière technique est utilisée lorsque des simulations de dynamique moléculaire successives doivent être menées.

1.7 Techniques d'optimisation

Dans cette sous section sont présentées différentes techniques permettant de réduire le coût de calcul d'une simulation de dynamique moléculaire. Elles s'ajoutent au fait que les simulations sont effectuées en parallèle sur plusieurs échantillons, chaque échantillon étant simulé sur un cœur de calcul différent (ou processus). Lors du calcul des moyennes (cf. Sec. 1.3.3), l'ensemble des échantillons communique via la norme MPI [1, 28].

Cette vision parallèle permet d'obtenir de très bonnes performances parallèles puisque

chaque processus abrite la même simulation, seule l'initialisation des quantités microscopiques diffère entre chaque simulation. En effet, il n'est pas utile de communiquer des informations entre chaque processus à chaque itération mais seulement lorsque qu'on veut calculer ou afficher une valeur moyenne. Elle permet également de réduire le temps de restitution à l'utilisateur. À intervalle de temps fixé pour le calcul des moyennes temporelles, elle augmente le temps de calcul cumulé sur l'ensemble des cœurs de calcul. Il est alors nécessaire de trouver un bon compromis entre le nombre de processus utilisé et les intervalles de temps choisis lors des moyennes.

1.7.1 Rayon de coupure

Pour chaque atome i , on définit une distance notée r_c au-delà de laquelle les interactions de la particule i avec les atomes j ne sont plus calculées. Cette approximation est d'autant plus intéressante que la portée des interactions est faible. La convention de l'image minimale implique que le rayon de coupure r_c doit être plus court que la moitié de la dimension du plus petit côté de la boîte.

Afin de limiter le temps de calcul, on utilise classiquement un rayon de coupure défini comme $r_c = C\sigma_{ij}$ où C est une constante très souvent comprise entre 2 et 5. On suppose qu'au delà de cette distance l'influence des particules non incluses dans le calcul des forces, sur la propriété que l'on cherche à étudier, est négligeable. Par exemple, lorsque $C = 2,5$, l'erreur introduite dans le calcul du potentiel est égal à $0,0163 \varepsilon_{ij}$ en r_c . Ce dernier s'écrit alors :

$$V(r) = \begin{cases} 4 \left[\left(\frac{1}{r}\right)^{12} - \left(\frac{1}{r}\right)^6 \right] & \text{si } r \leq r_c \\ 0 & \text{si } r > r_c \end{cases} \quad (1.31)$$

La contribution des forces au delà de r_c a néanmoins un effet sur le calcul de certaines quantités comme la pression ou l'énergie. Ces aspects seront discutés en section 1.7.3.

1.7.2 Liste des voisins

On sait que les forces dérivent du potentiel d'interaction qui dépend uniquement des coordonnées spatiales des particules. C'est le calcul de ces forces qui représente la partie la plus coûteuse en temps de calcul. Pour une simulation de N particules et si on tient compte du principe d'action réaction, on doit parcourir en mémoire $N(N-1)/2$ paires (voir Fig. 1.4) : le temps de calcul évolue donc en N^2 . En effet, il faut tester chaque paire, pour voir si elle traite des particules en interaction, c'est-à-dire dont la distance est inférieure au rayon de coupure.

Deux méthodes permettent d'améliorer cette situation. D'abord, il n'est pas nécessaire de tester chaque paire de particules, car seulement les particules qui se trouvent proches

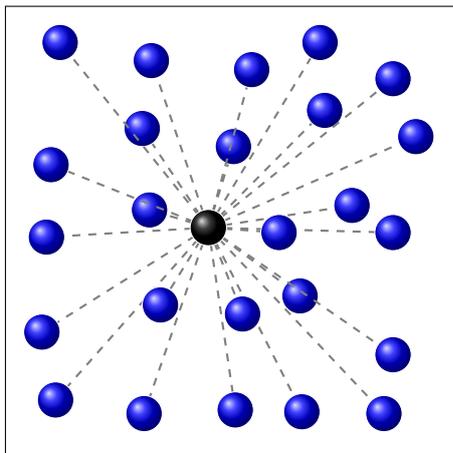


Figure 1.4 : Calcul des interactions pour toutes les paires

l'une de l'autre ont une grande énergie d'interaction en comparaison de celles qui sont éloignées. Pour rappel, la force d'interaction entre deux particules tend vers 0 quand $r \rightarrow \infty$. Visuellement, on peut voir que l'essentiel de la variation de la force se fait pour des distances inférieure à C (voir Fig. 1.1).

Le principe d'une *liste de voisins* est de repérer les molécules j dont les distances à la molécule i (pour laquelle on construit la liste) sont inférieures à r_c . Cette liste est construite en deux étapes, ce qui permet de minimiser le nombre d'opérations numériques.

La première consiste en une décomposition géométrique cartésienne du domaine de simulation en sous-domaines de tailles réduites l . Elle est illustrée sur la figure 1.5a pour une boîte carrée de côté L . La valeur de l est la plus petite longueur supérieure à \tilde{r}_c telle que L/l soit entier. L'expression de \tilde{r}_c , qui correspond à un rayon de coupure particulier, sera explicitée plus loin. La recherche des paires de particules qui peuvent interagir se réduit alors à des tests entre les particules qui se trouvent dans le même sous-domaine et dans les sous-domaines voisins. Par exemple, pour la particule noire (voir Fig. 1.5a), on ne cherchera que les interactions dans le domaine grisé. De plus, toujours en vertu du principe d'action-réaction, seule la moitié des cellules voisines est prise en compte. Ceci est illustré en 2D : seules les particules des cellules comprises dans le motif rouge sont testées pour la construction de la liste de la particule noire. En parcourant l'ensemble des cellules, cette technique assure l'identification des paires d'interactions possibles pour un coût de calcul optimal. En 3D (voir Fig. 1.5b), en plus de la cellule contenant la particule i , cela revient à tester les particules de 13 cellules voisines (au lieu des 26 totales). Pour être efficace, les longueurs du domaine moléculaire doivent être supérieures à $3\tilde{r}_c$ de façon à ne pas avoir à traiter de cas particuliers liés à la périodicité. On note que cette technique est d'autant plus efficace que la boîte de simulation est grande par rapport à \tilde{r}_c .

Connaissant les boîtes voisines, et donc les molécules susceptibles d'interagir, la seconde

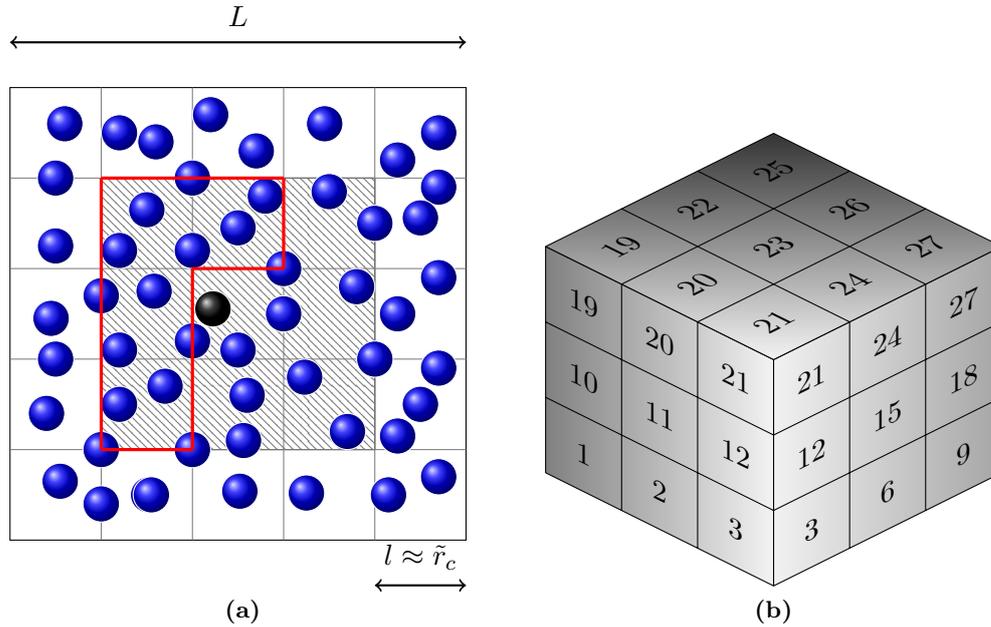


Figure 1.5 : Calcul des interactions : (a) Illustration de la sous-division cartésienne en deux dimensions. La molécule noire de la boîte centrale interagit potentiellement avec les molécules des boîtes voisines grisées. (b) Sous-division pour le cas 3D.

étape consiste à affiner la liste des voisins en recherchant uniquement les paires de molécules qui interagissent, c'est-à-dire dont la distance est inférieure ou égale à r_c (voir Fig. 1.6). On appelle dans la suite une paire de molécules qui interagit, une *paire active*.

Au cours de cette seconde étape, il est encore possible d'optimiser le coût de calcul des forces car il n'est pas nécessaire d'identifier les paires actives à chaque itération. Les particules se déplaçant seulement d'une petite distance à chaque pas de temps, elles vont donc garder les mêmes voisines sur plusieurs itérations. Il suffit donc de mettre à jour une liste de paires actives à intervalle de temps régulier ou selon un critère. Cela nécessite une légère modification de la seconde étape de la construction de la liste des voisins : on définit une zone tampon d'épaisseur δr qui s'ajoute à r_c lors de la construction de la liste (voir Fig. 1.6). L'expression \tilde{r}_c utilisée précédemment est donc $\tilde{r}_c = r_c + \delta r$. La liste contient alors des paires actives (paire noires-bleues sur la figure) et des paires non-actives (paires noires-vertes). Ces molécules en réserve permettent de mettre à jour la liste des voisins quand la particule la plus rapide dans le domaine s'est déplacée d'une distance égale à la moitié de cette séparation critique δr . Un exemple de construction de la liste des voisins est montré dans la figure 1.6 : lors de sa construction, les particules grises ne sont pas enregistrées dans la liste de la particule noire. Les particules bleues interagissent avec la particule noire. Les vertes sont en réserve et n'interagiront que si leur distance à la noire devient inférieure à r_c .

Les deux techniques présentées, sous-décomposition en boîtes du domaine et liste des

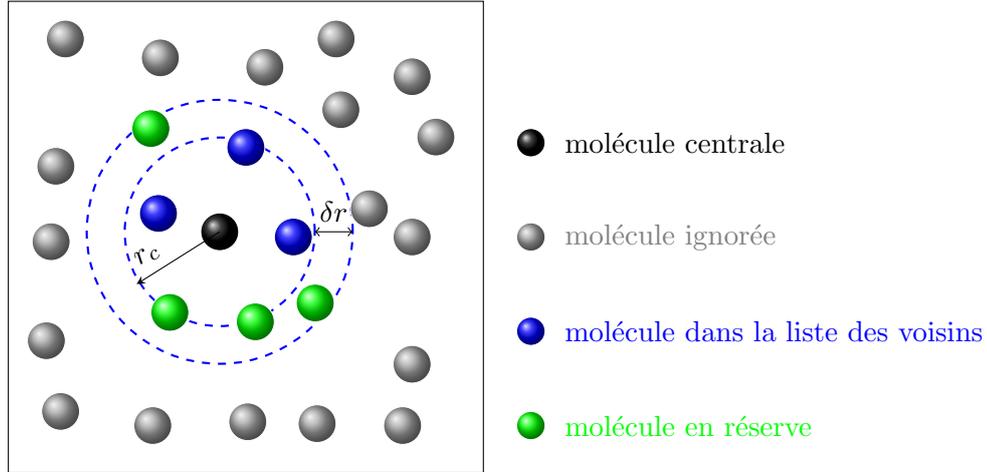


Figure 1.6 : Calcul des interactions : liste des voisins de la molécule centrale (noire). Les particules grises ne sont pas enregistrées dans la liste des voisins. Les particules bleues interagissent avec la particule noire pendant que les vertes sont en réserve.

voisins, se combinent pour réduire le temps de calcul. Dans ce travail, ces méthodes qui sont disponibles dans le code en langage C fourni avec le livre de Rapaport [55], constituent la base de notre code de dynamique moléculaire que nous avons développé en langage Fortran.

1.7.3 Effets liés à la troncature

L'utilisation d'un rayon de coupure pose un problème de continuité dans l'évaluation de la force. Pour y pallier, des formes modifiées du potentiel tronqué sont suggérées par différents auteurs pour assurer la continuité de la force. La plus simple est de modifier l'interaction de la façon suivante [41, 50] :

$$V_0(r) = \begin{cases} V(r) - V(r_c) & \text{si } r < r_c \\ 0 & \text{si } r \geq r_c \end{cases} \quad (1.32)$$

Cependant, la dérivée première de $V_0(r)$ est discontinue en $r = r_c$, ce qui provoque une erreur importante dans l'intégration numérique si la position d'un atome devient inférieure à r_c au cours du pas de temps δt . En effet, l'utilisation d'un potentiel tronqué peut influencer les propriétés de transport du fluide ainsi que son diagramme de phase [4, 58]. La modification de la partie répulsive peut avoir un effet similaire [2, 32]. Une autre formule plus utilisée est [61, 63] :

$$V_1(r) = \begin{cases} V(r) - V(r_c) - V'(r_c)(r - r_c) & \text{si } r < r_c \\ 0 & \text{si } r \geq r_c \end{cases} \quad (1.33)$$

Ce potentiel nous donne une force continue en $r = r_c$. Cependant, la valeur du puits de potentiel ε est plus petite que celle du potentiel de Lennard-Jones classique comme montré en figure 1.7a. Il est également plus coûteux car il impose de calculer le carré de r qu'il faut estimer pour chaque couple d'atomes. Il faut bien tenir compte de l'erreur que ces nouveaux potentiels introduisent dans les grandeurs thermodynamiques par rapport au potentiel original. Les figures 1.7a et 1.7b montrent les variations des différents potentiels [41, 50, 63] ainsi que les forces correspondantes.

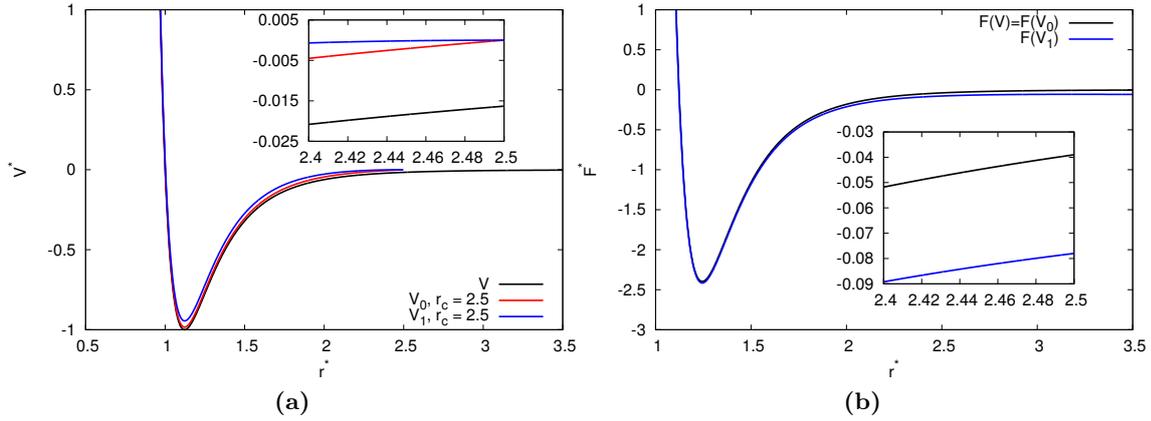


Figure 1.7 : (a) Potentiels tronqués. (b) Forces tronquées.

Au cours de ce travail nous utiliserons des corrélations donnant les propriétés de transport ainsi qu'une loi d'état issue de simulations avec le potentiel classique tronqué. Nous garderons donc la formulation (1.31) du potentiel.

Pour le calcul de la pression, il faut prendre en compte les interactions au delà du rayon de coupure. Bien que \mathbf{f}_{ij} soit négligeable, le deuxième terme de l'équation (1.22) ne l'est pas nécessairement. Dans ce cas, on suppose que la fonction de distribution radiale, qui donne une mesure de la structuration du fluide, est égale à 1 pour des distances supérieures au rayon de coupure. La contribution longue distance de la pression peut s'écrire comme :

$$p_{ld} = -16\pi \left(\frac{N}{V_c}\right)^2 \frac{\varepsilon\sigma^3}{3C^3} \left(1 - \frac{2}{3C^6}\right) \quad (1.34)$$

où C est la constante introduite pour définir le rayon du coupure. On a la contribution longue distance à l'énergie interne :

$$E_{ld} = -8\pi \left(\frac{N}{V_c}\right)^2 \frac{\varepsilon\sigma^3}{3C^3} \left(1 - \frac{1}{3C^6}\right) \quad (1.35)$$

Ces deux termes sont pris en compte lors de l'évaluation de la pression et de l'énergie.

1.8 Modèles de mur

Dans ce travail, nous étudierons un fluide confiné entre deux murs solides et parallèles pour lesquels nous avons considéré des descriptions différentes : dans un premier temps, nous avons utilisé un mur virtuel pour lequel les atomes ne sont pas explicitement décrits. On appelle ce type de mur un mur *stochastique* ; il sera principalement utilisé pour valider le code de couplage.

Dans un deuxième temps, un mur explicitement constitué d'atomes de platine distribués selon un réseau cristallin de type *Cubique Face Centré* (CFC) est mis en place. Évidemment, la modélisation de tous les atomes solides est plus coûteuse en temps de calcul et prend une part importante dans la simulation d'autant plus que la phase fluide est diluée.

1.8.1 Mur thermique

Un des problèmes liés aux systèmes moléculaires est l'effet de frontières solides sur un système de taille finie et la modélisation microscopique des conditions aux limites.

Dans une étude classique, Maxwell [44] a fait la première tentative pour exprimer "les conditions qui doivent être remplies par un gaz en contact avec un mur solide".

Il a examiné deux types de surface : une surface parfaitement lisse et une surface très inégale, de faible masse volumique granulaire. Chaque molécule qui frappe la surface parfaitement lisse est réfléchiée de façon spéculaire. En revanche, celles qui frappent la surface granulaire sont soumises à une série de collisions à l'intérieur de la surface avec les différentes molécules de la surface, et par conséquent, leur vitesse de libération devient aléatoire et non corrélée à leur vitesse initiale. La distribution des vitesses des molécules qui quittent cette surface est déterminée par la température de la paroi. Ce type de surface est appelé *mur thermique* (ou mur stochastique). Pour une surface quelconque, Maxwell suppose qu'une fraction f des atomes qui la frappent est thermalisée (voir Fig. 1.8a), tandis que la fraction restante $(1 - f)$ est réfléchiée de façon spéculaire (voir Fig. 1.8b). Avec les progrès des simulations moléculaires et des intérêts pour les géométries confinées, le problème des limites de la modélisation est de nouveau d'un intérêt central.

Pour les simulations où la structure microscopique précise des parois est sans importance, le choix le plus simple pour modéliser la paroi est le modèle introduit par Maxwell : les parois réfléchissantes et thermiques. La mise en œuvre de la paroi réfléchissante est simple : la composante normale de la vitesse d'une molécule heurtant la paroi est inversée, la composante tangentielle reste inchangée.

Une paroi thermique peut être assimilée à un réservoir thermique [67, 72]. Il faut alors prendre en compte la distribution des vitesses des particules sortantes d'un tel réservoir. Une molécule incidente en collision avec un mur thermique quitte la paroi avec les deux

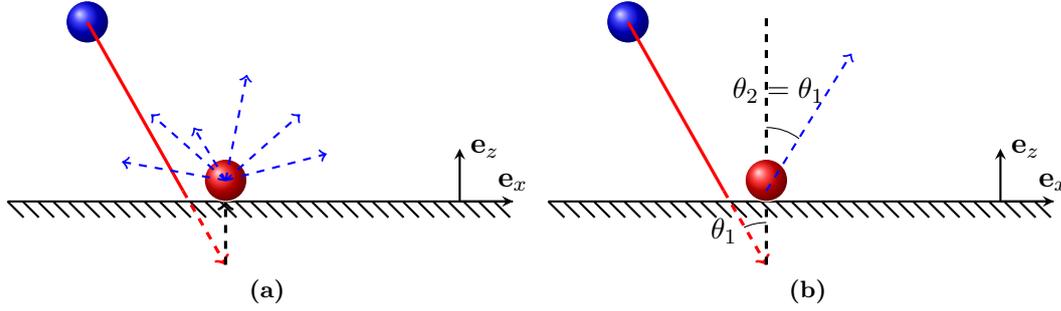


Figure 1.8 : Représentation d'un mur stochastique (a) : en bleu, particule avant l'interaction, en rouge, la particule qui remplace celle qui passe à travers le mur. La flèche rouge représente la trajectoire de la particule avant l'interaction tandis que les flèches en bleu présentent les différentes trajectoires possibles. Mur spéculaire (b) : la flèche bleu présente le trajectoire spéculaire. Dans ces deux cas, l'approximation qui positionne la molécule après interaction à la verticale (pointillés noirs) de sa position à la fin du pas de temps (pointillés rouges) est justifiée si le pas de temps est suffisamment petit.

composantes tangentielles $v_{\parallel i}$ de sa vitesse, $i = 1, 2$, chacune déterminée par un processus aléatoire dont les valeurs sont issues de la distribution gaussienne liée à la température T_w de la paroi :

$$\phi_G(v_{\parallel i}) = \sqrt{\frac{m_i}{2\pi k_B T_w}} \exp\left[-\frac{m_i v_{\parallel i}^2}{2k_B T_w}\right] \quad (1.36)$$

où m est la masse de la molécule. La valeur de la composante normale v_{\perp} est quant à elle tirée à partir de la loi de distribution de Rayleigh [67, 72]

$$\phi_R(v_{\perp}) = \frac{m}{k_B T_w} v_{\perp} \exp\left[-\frac{m v_{\perp}^2}{2k_B T_w}\right] \quad (1.37)$$

Le signe de v_{\perp} doit être choisi de manière appropriée selon l'emplacement du mur. Si \mathbf{n} est la normale au mur pointant vers le domaine fluide, on doit avoir $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} > 0$.

Avec ces différentes lois de probabilité pour les composantes tangentielle et normale, la norme du vecteur vitesse suit la loi de Maxwell-Boltzmann.

Il est probable que ce choix a son origine dans l'idée qu'une paroi à une température particulière doit émettre des particules avec une distribution gaussienne correspondant à cette température. Les conditions aux limites correctes doivent aussi tenir compte de la probabilité, dépendant de la vitesse, avec laquelle les particules du système entrent en collision avec la paroi.

La combinaison des deux types d'interactions présentées en figure 1.8 permet de construire des modèles plus évolués, par exemple les modèles de Maxwell-Yamamoto [77] ou de Cercigliani-Lampis [15]. Ils permettent de s'affranchir d'une description atomique du mur. La difficulté est le calibrage du modèle, dont les paramètres sont les coefficients d'accou-

modations dynamique et thermique, de sorte à ce qu'ils rendent compte des interactions réelles entre le fluide et le mur décrit de façon explicite. Un paramétrage ainsi que des comparaisons des différentes modélisations peuvent être consultées dans les travaux de Spijker et al. [59, 60]

1.8.2 Mur atomique

Un mur atomique désigne dans la suite une situation où les atomes composant le mur sont explicitement décrits par leurs vecteurs position, vitesse et accélération.

La figure 1.9 schématise dans le plan un mur atomique et l'interaction avec une molécule de fluide (en bleu). Ce mur est constitué de particules régulièrement réparties selon une structure de type Cubique Simple (dans les simulations des structures cristallines Cubique Face Centrée sont utilisées, notamment CFC111). Le cercle en rouge représente la région dans laquelle il y a une interaction entre les molécules fluides et solides ($r \leq r_c$). L'interaction entre la particule du fluide et la particule du solide est décrite par un potentiel de type Lennard-Jones avec les paramètres ε_{sf} et σ_{sf} . En pratique, les valeurs de ε_{sf} et σ_{sf} sont issues de la littérature [43, 63].

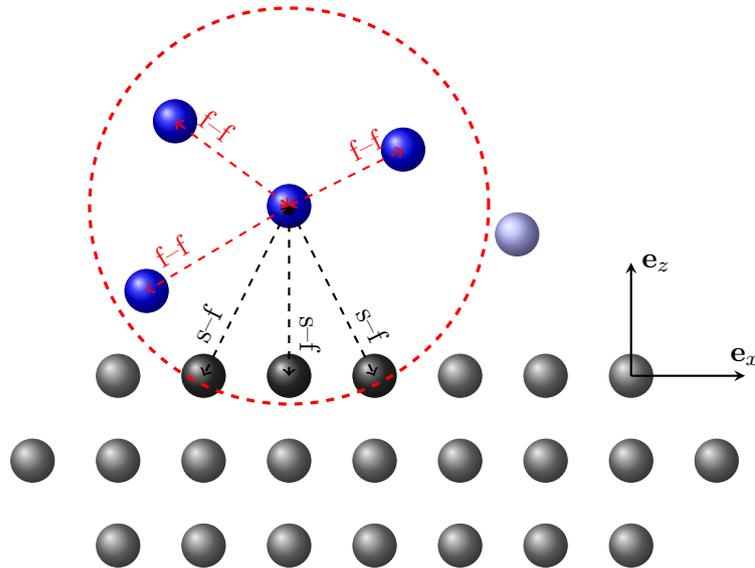


Figure 1.9 : Représentation d'un mur atomique et de la nature des interactions.

La façon la plus complète de simuler un mur atomique est de construire ou supposer un potentiel d'interaction (de paire ou plus complexe) entre les atomes solides. Comme pour le fluide, un rayon de coupure peut être choisi afin de limiter le nombre d'interactions lors de l'intégration des équations du mouvement. Néanmoins, un solide étant une structure compacte, le nombre d'interactions à traiter est toujours plus grand que pour un fluide, à rayon de coupure donné. Le coût de la partie solide d'une simulation peut alors devenir très importante. Ajoutons que les équations de Newton doivent être intégrées avec des pas

de temps plus petits que lors de la simulation d'un fluide seul.

Cependant, des modélisations plus simples de murs atomiques sont souvent utilisées dans la littérature. Tout en gardant un comportement physique admissible du mur, elles tendent à réduire le coût de simulation en limitant le nombre de voisins en interactions et en permettant l'utilisation de pas de temps plus grands.

Mur d'Einstein. Il est basé sur la théorie d'Einstein : les atomes du mur vibrent de façon harmonique autour de leur position initiale \mathbf{r}^0 à la même fréquence [14]. L'équation (1.38) donne le potentiel d'interaction d'une molécule i du mur. Il peut être vu comme un potentiel de type ressort qui ramène la molécule vers sa position initiale. Il s'écrit

$$V_w(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{2}k\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_i^0\|^2 \quad (1.38)$$

avec k une constante de raideur. Au cours de la simulation, on utilise le thermostat de Langevin (cf. Eq. (1.29)) sur l'ensemble des atomes pour que la température du solide soit contrôlée à T_w . Cette technique ne permet alors pas de rétroaction du fluide sur la température du solide qui a donc une conductivité infinie.

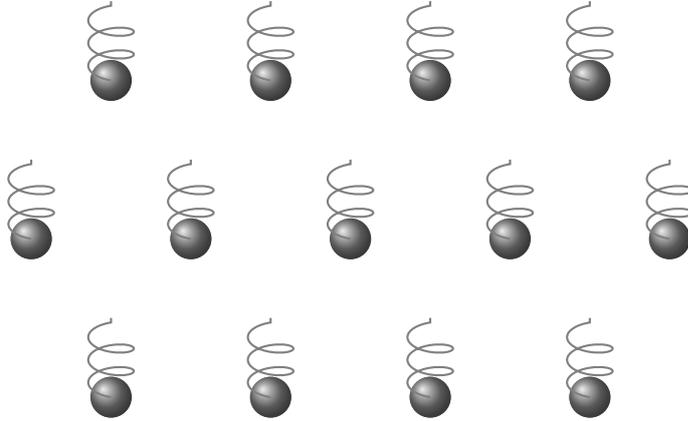


Figure 1.10 : Mur d'Einstein.

Mur fantôme [42, 43]. Un exemple de ce type mur, initialement proposé par Maruyama et Kimura [43], est illustré dans la figure 1.11. Il est composé de 5 couches d'atomes répartis selon une structure de type CFC111. Les trois premières couches modélisent les atomes réels dont les interactions se font via des ressorts harmoniques dont la constante de raideur est k . La quatrième couche (couche fantôme) est faite de molécules *fantômes*. Enfin, la dernière couche est immobile.

Les interactions entre les molécules sont schématisées en figure 1.11. Celles entre molécules fantômes et réelles se font via un ressort de raideur $2k$ pour les déplacements verticaux et $0,5k$ pour les déplacements horizontaux. La raideur du ressort pour les déplacements

horizontaux entre les molécules fantômes et fixes est $3,5k$. De plus, un amortissement, issu d'un thermostat permet de contrôler la température de l'ensemble en thermalisant uniquement la couche fantôme via un thermostat de Langevin.

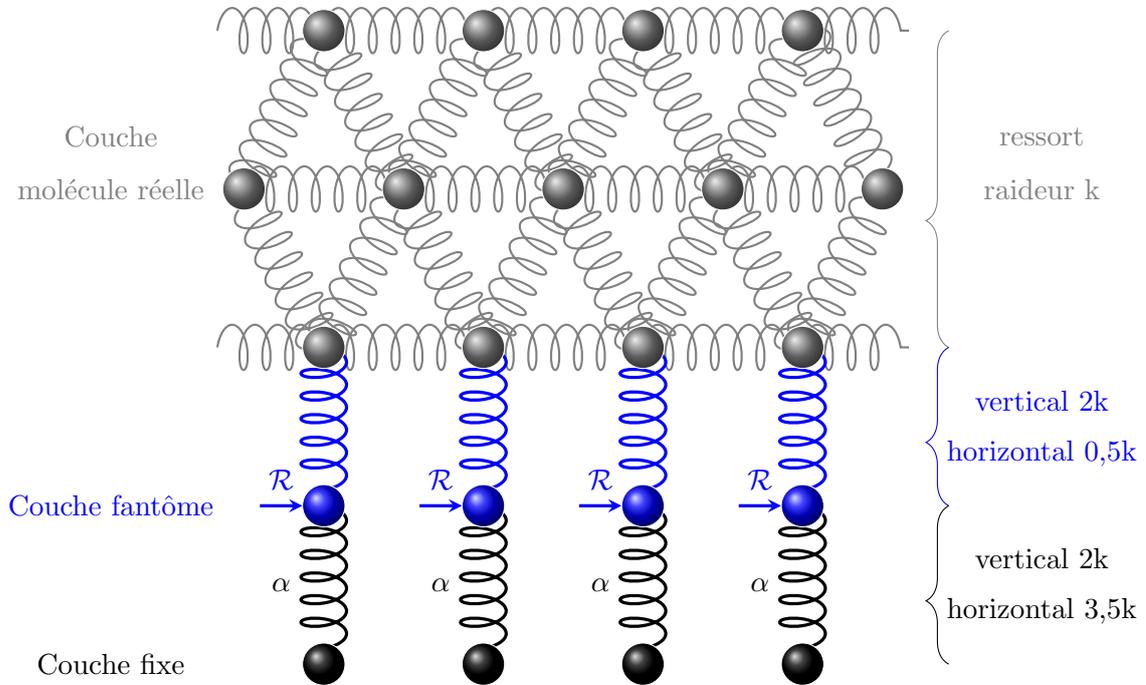


Figure 1.11 : Mur fantôme.

Dans notre travail, nous avons utilisé une modélisation de mur spéculaire ou réfléchissant au niveau de la frontière supérieure du domaine moléculaire. Au niveau du mur inférieur, le mur thermique est considéré dans les cas de validation alors qu'un mur atomique est utilisé lorsque nous étudions l'interaction entre le solide et le fluide pour des problèmes de changement de phase.

1.9 Déroulement de la dynamique moléculaire

De nombreux aspects de la méthode de dynamique moléculaire sont similaires à des expériences réelles. Expérimentalement, on procède de la sorte : on prépare d'abord un échantillon du matériau à étudier, on couple cet échantillon à un appareil de mesure puis on mesure une propriété d'intérêt sur un intervalle de temps. Et enfin, plus on réalise d'expériences identiques, plus la propriété d'intérêt est obtenue, via des moyennes, de façon précise.

Dans la simulation par la méthode de dynamique moléculaire, on suit exactement la même approche. D'abord, on prépare un échantillon contenant N particules. Ce système est résolu par l'intégration des équations du mouvement jusqu'à ce que les grandeurs ca-

ractéristiques, par exemple l'énergie, ne varient plus au cours du temps. Dès que le système atteint l'équilibre, on peut déterminer des propriétés d'intérêt.

Le schéma de principe d'un programme de dynamique moléculaire est illustré dans la figure 1.12. Les différentes étapes, faisant intervenir des techniques ou méthodes qui ont été détaillées au cours de ce chapitre, sont les suivantes :

1. La première étape consiste à lire des paramètres qui précisent les conditions du problème étudié (par exemple la masse volumique, le pas de temps, nombre de particules, la température initiale, ...)
2. La deuxième étape vise à initialiser le système.
3. La troisième étape est le calcul des forces pour toutes les particules.
4. La quatrième étape est l'intégration des équations de Newton. Cette étape et la troisième étape est le cœur d'une simulation.
5. Les grandeurs moyennées sont ensuite calculées et on teste leur convergence.
6. Si les grandeurs d'intérêt ont convergé, on arrête le calcul.

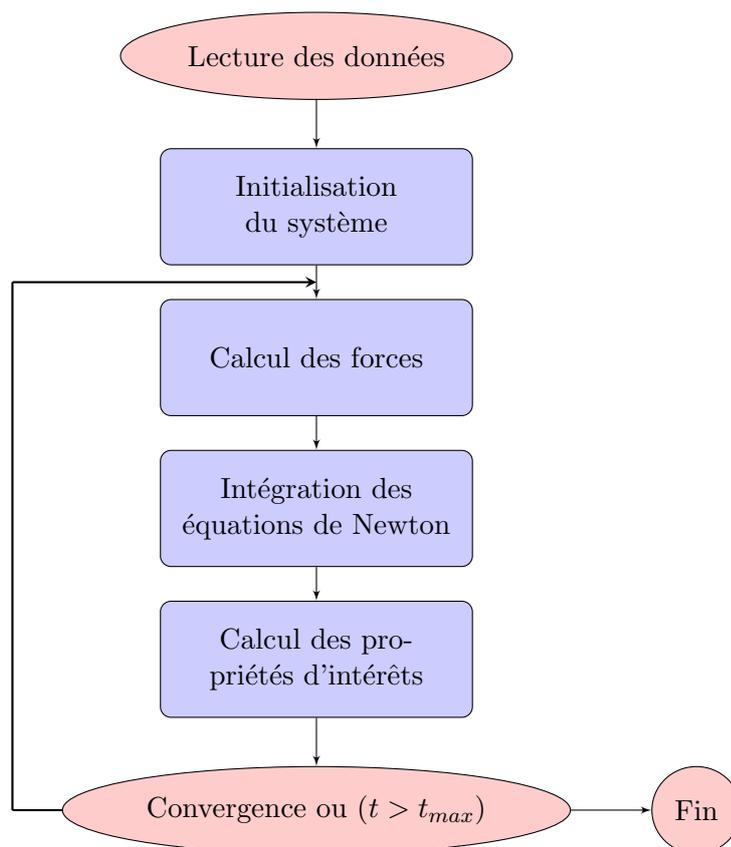


Figure 1.12 : Vision simplifiée d'un programme de dynamique moléculaire.

Chapitre 2

Modélisation hybride Microscopique/Macroscopique

Sommaire

2.1	Bibliographie	35
2.2	Modélisation macroscopique	42
2.3	Décomposition de domaine	44
2.4	Couplage spatial et zone de recouvrement	46
2.5	Couplage temporel ou couplage itératif	55
2.6	Synthèse de la méthode hybride proposée	56

Ce chapitre présente la méthode hybride, combinant les approches microscopique et macroscopique, qui a été développée dans cette thèse. Après une bibliographie des travaux antérieurs, l'approche macroscopique est brièvement introduite avant de détailler le fonctionnement de la décomposition de domaine et de couplage spatial et temporel entre les deux descriptions.

2.1 Bibliographie

Les paragraphes qui suivent dressent un panorama des contributions concernant principalement le couplage utilisant la méthode de décomposition de domaine présentée dans le chapitre introductif. Nous aborderons essentiellement le transfert d'informations du domaine continu vers le domaine moléculaire ; la réciproque ne pose pas de difficulté particulière, hormis l'estimation des quantités macroscopiques à partir de moyennes.

A notre connaissance, le premier modèle de couplage microscopique/macroscopique entre l'approche de dynamique moléculaire et la modélisation continue par les équations de Navier–Stokes incompressibles et isothermes à été développé par O'Connell et Thompson

en 1995 [53]. Les auteurs proposent un couplage introduisant une zone de recouvrement entre les deux approches par l'échange de la variable primaire de la vitesse dans la direction de l'écoulement x . La méthode de décomposition de domaines utilisée dans leur travail est schématisée en figure 2.1. Ici, un canal est divisé en deux sous domaines : un moléculaire Ω_M , et un continu Ω_C . Une zone de recouvrement, notée Ω_0 , permet d'échanger des informations entre Ω_M et Ω_C . Elle est divisée en une série de j cellules.

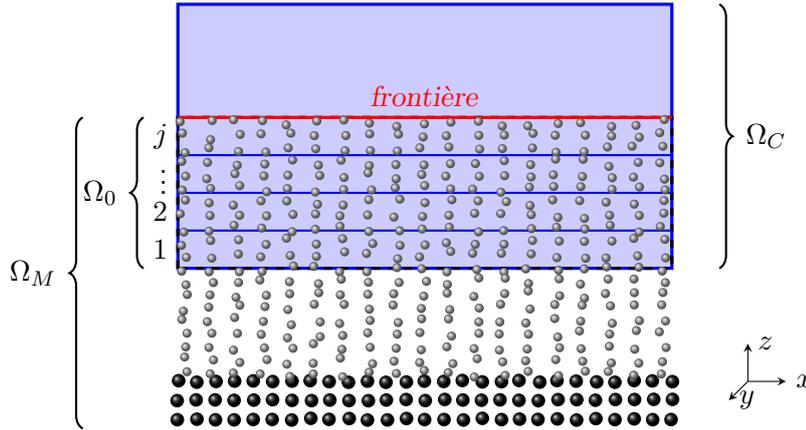


Figure 2.1 : Un schéma général pour la décomposition du domaine en deux sous-domaines. Le domaine moléculaire (Ω_M) et le domaine de continu (Ω_C) coïncident dans la zone de recouvrement (Ω_0). La frontière indiquée par l'arrête rouge est la limite supérieure du domaine moléculaire.

Dans leur travail, la vitesse moyenne des particules, qui se trouve à la fin de la région moléculaire (cellule j sur la figure), est contrainte à l'aide d'une méthode de relaxation de sorte que la vitesse moyenne des particules coïncide avec la vitesse locale issue du domaine continu. La contrainte suivante a été utilisée :

$$\sum_{i=1}^N m_i \dot{r}_{ix} - M^j v_x^j = 0, \quad (2.1)$$

où M^j est la masse totale du fluide contenu dans la cellule j du domaine continu, v_x^j est la vitesse moyenne issue du domaine continu suivant x et N est le nombre total de particules dans le domaine j . Cette contrainte est ensuite introduite dans l'équation du mouvement des particules en corrigeant les vitesses microscopiques :

$$\dot{r}_{ix} = \dot{r}_{ix} + \xi \left[\frac{M^j}{m_i N} v_x^j - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \dot{r}_{ix} \right] \quad (2.2)$$

Le paramètre de relaxation ξ (avec $\xi \in (0; 1]$) permet d'imposer la vitesse macroscopique de manière à ne pas trop perturber la dynamique individuelle de chaque particule dans le domaine moléculaire. La valeur $\xi = 0,01$ est choisie dans leur travail pour relaxer,

en moyenne, les vitesses microscopiques vers la valeur macroscopique. La méthode est appliquée avec succès à l'écoulement établi de Couette entre deux plaques planes. Le couplage des échelles de temps macroscopique et microscopique n'est pas considéré et l'approche ne permet pas encore le transfert de masse ou de température.

En 1997, Hadjiconstantinou et Patera [31] proposent la méthode dite du *Démon de Maxwell* pour imposer la valeur de la vitesse moyenne dans un sous domaine moléculaire. Les molécules dans la zone d'échange sont agitées aléatoirement avec des valeurs tirées dans une distribution de Maxwell dont la moyenne et la variance sont compatibles avec la vitesse et la température du domaine continu. Les auteurs introduisent également le couplage des échelles de temps macroscopique et microscopique et donc la synchronisation des modèles. Leurs résultats obtenus pour un écoulement stationnaire autour d'un nano tube de carbone [31], ainsi que la simulation du problème de la ligne de contact dynamique proposé par Hadjiconstantinou [29], sont en bon accord avec des simulations purement continues ou purement moléculaire.

En 2004, Nie et al. [50], toujours dans le cadre d'écoulements isothermes, proposent une méthode dans laquelle la dynamique sous contrainte est utilisée. La force agissant sur chaque molécule dans la zone d'échange est modifiée de sorte que la vitesse moyenne des molécules dans cette zone tende vers la vitesse macroscopique issue du domaine continu. Dans leur travail, ils ont proposé une modification du schéma de couplage de O'Connell et Thompson [53] en travaillant sur l'accélération afin d'imposer en moyenne la vitesse issue du domaine continu aux particules de la couche contrainte. L'équation du mouvement modifiée d'une particule i est la suivante :

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} - \xi \left[\frac{1}{m_i N} \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_j - \frac{D\mathbf{u}}{Dt} \right] \quad (2.3)$$

où $\ddot{\mathbf{r}}_i$ est l'accélération et \mathbf{F}_i la force exercée sur particule i , N est le nombre de particules se trouvant dans la zone de contrainte et \mathbf{u} est la vitesse moyenne issue du domaine continu. Contrairement à [53], la formulation est plus générale puisqu'elle s'applique sur des quantités vectorielles. La constante de relaxation maximale $\xi = 1$ est utilisée ce qui contraint fortement la vitesse. La méthode est mise en œuvre avec succès dans le cas de l'établissement de l'écoulement de Couette entre deux plaques (cas instationnaire) puis elle est utilisée pour l'étude de rugosités locales dans une conduite.

De plus, le transfert de masse entre les domaine est introduit. Compte tenu du flux de quantité de mouvement vertical (normal à la frontière représentée sur la figure 2.1), la masse volumique locale dans le domaine moléculaire est ajustée au cours du temps. Dans une autre contribution [51], les auteurs utilisent leur méthode pour traiter la singularité dans le problème de la cavité entraînée.

Le problème de transfert de masse est également étudié par Delgado-Buscalioni et Coveney en 2003 [20]. Indépendamment de toute stratégie de couplage, les auteurs introduisent un algorithme, nommé USHER (ce qui pourrait être traduit par *QUI PLACE* ou *PLACEUR*), permettant d'introduire des molécules dans une zone précise du domaine moléculaire tout en contrôlant l'énergie potentielle moyenne dans la zone considérée. Cet algorithme est par la suite utilisé dans une situation de couplage lorsqu'il y a transfert de masse entre les deux domaines moléculaire et continu.

Dans les situations de couplages, comme celles évoquées précédemment, une condition limite est généralement imposée au voisinage de la frontière du domaine moléculaire (en rouge sur la figure 2.1) afin de contrôler le nombre total de molécules (les simulations de dynamique moléculaire sont généralement faites à nombre de molécules constant (ensembles *NVE* ou *NVT*)). La plus répandue est l'application locale d'une force constante (comme par exemple dans [50]) telle que les molécules ne sortent pas du domaine. Une autre manière de procéder est de considérer la frontière comme un mur spéculaire sur lequel les molécules rebondissent. Malheureusement, ces deux approches génèrent une structuration du fluide non physique et peuvent dégrader le couplage. Pour y remédier, Werder et al. [76] ont proposé en 2005 une force additionnelle au voisinage de la frontière visant à minimiser la structuration du fluide. Combiné à un mur spéculaire, une force mimant l'action du fluide présent de l'autre côté de la frontière est appliquée. Les auteurs fournissent une corrélation permettant d'évaluer cette force en fonction de la masse volumique et de la température mais elle peut aussi être calculée numériquement ou déterminée en fonction de la fonction de distribution radiale (voir [11] par exemple). La stratégie de couplage est ensuite illustrée sur l'étude de l'écoulement d'argon liquide autour d'un nano-tube de carbone.

Suite aux travaux de Nie et al. [50], Liu et al. [41] élargissent le problème et s'intéressent aux transferts de chaleur. La température est également échangée entre les deux approches. Le couplage dynamique est effectué avec la méthode de la contrainte dynamique tandis qu'une remise à l'échelle des vitesses (cf. Sec. 1.5.1), modifiant l'intensité de la fluctuation de la vitesse, est utilisée pour amener la température de la zone moléculaire T_M à la température issue du domaine continu T_C

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \langle \dot{\mathbf{r}} \rangle + \sqrt{\frac{T_C}{T_M}} (\dot{\mathbf{r}}_i - \langle \dot{\mathbf{r}} \rangle) \quad (2.4)$$

où $\dot{\mathbf{r}}_i$ est la vitesse de la particule i , et $\langle \dot{\mathbf{r}} \rangle$ la vitesse moyenne dans la zone contrainte. Contrairement à la version initiale du thermostat proposée à l'équilibre, il faut ici soustraire la vitesse barycentrique du système dans la couche considérée. La méthode est à nouveau appliquée avec succès sur l'écoulement de Couette plan mais aussi sur une configuration de conduction pure entre deux plaques planes soumises à des températures différentes.

En 2007, paraissent deux contributions, portant essentiellement sur l'amélioration du couplage dynamique proposé par Nie et al [50]. Wang et He [75] proposent de contraindre la dynamique en adaptant le coefficient ξ à l'état courant. Ils déterminent la constante de relaxation de la méthode de dynamique sous contrainte à chaque itération ce qui permet de converger plus rapidement vers la solution. Dans leur travail, le paramètre de relaxation ξ est déterminé au cours de la simulation à partir de l'équation (2.3) :

$$\xi(t + \delta t) = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\ddot{r}_{ix}(t) - F_{ix}(t)/m_i)}{u(t) - (1/N) \sum_{i=1}^N \dot{r}_{ix}(t)} \quad (2.5)$$

où $\xi(t + \delta t)$ est le paramètre de relaxation à l'instant $t + \delta t$, N est le nombre total de particules dans la zone de contrainte, $u(t)$ est la vitesse issue du domaine continu à l'instant t , $\dot{r}_{ix}(t)$ et $\ddot{r}_{ix}(t)$ sont respectivement la vitesse et l'accélération de particule i à l'instant t dans la direction de l'écoulement x . Sous cette formulation, le paramètre de relaxation obtenu peut être différent à chaque pas de temps en fonction des caractéristiques de l'écoulement et l'arrangement des particules dans la zone de contrainte. La méthode est appliquée à l'établissement de l'écoulement de Couette et au second problème de Stokes qui est une configuration similaire à la configuration de Couette mais dans laquelle la paroi supérieure est animée d'une vitesse qui varie de façon sinusoïdale avec le temps.

Yen et al. [78] proposent quant à eux, de substituer les grandeurs instantanées apparaissant dans la méthode de dynamique sous contrainte par des valeurs moyennes spatio-temporelles sur l'intervalle $t - q\delta t$ à t .

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{F}_i(t)}{m_i} \approx \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{F}_i(t)}{m_i} \right\rangle_{q\delta t} \quad (2.6)$$

L'équation (2.3) peut alors s'écrire sous la forme suivante :

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = \frac{1}{(q/2 + 1)\delta t} \left[\mathbf{u}(t + \delta t) - \dot{\mathbf{r}}_i(t - \frac{q}{2}\delta t) \right] + \frac{\mathbf{F}_i(t)}{m_i} - \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{F}_i(t)}{m_i} \right\rangle_{q\delta t} \quad (2.7)$$

où $\langle \rangle_{q\delta t}$ désigne une valeur moyennée de $t - q\delta t$ à t . La valeur de $q = 0$ permet de retomber sur l'équation (2.3). Cette apport permet de réduire les fluctuations statistiques et d'améliorer la vitesse de convergence. La méthode est ensuite appliquée à l'établissement de l'écoulement de Couette. Dans leur travail, la valeur $q = 100$ est choisie mais elle doit être estimée pour chaque problème à partir de tests numériques.

Parallèlement au développement de méthodes basées sur l'échange des variables primaires, d'autres auteurs ont développé des méthodes utilisant des échanges de flux (flux de masse, de quantité de mouvement et d'énergie). Ce type d'approche a été initié par Flekkøy et al. en 2000 [24] et consiste à assurer la continuité des flux dans la zone de recouvrement entre

les deux approches. Par construction, elle nécessite une méthode d'insertion et de retrait des particules dans le domaine moléculaire. La validation de cette méthode est illustrée sur les aspects dynamiques par la simulation des écoulements de Couette et Poiseuille en régime stationnaire.

En 2003, Delgado-Buscalioni et Coveney [20] ont adopté une méthode hybride similaire à celle mise au point par [24], mais en considérant l'écoulement instationnaire et en introduisant l'échange des flux de chaleur entre les approches moléculaire et continue. L'algorithme USHER développé par [20] est utilisé pour contrôler la masse volumique dans la zone d'échange.

Sur la base des tests numériques, Nie et al. [50] ont affirmé que l'algorithme basé sur l'échange de flux, proposé par Flekkøy et al. [24], peut devenir instable pour des géométries complexes.

Une étude des différents modes de couplage est proposée par Ren en 2007 [56]. En fonction du rapport des pas de temps macroscopique et microscopique, l'auteur analyse la stabilité des schémas d'échange entre les domaines Moléculaire (M) et Continu (C) et réciproquement : variable(M)-variable(C), variable(M)-flux(C), flux(M)-variable(C) et flux(M)-flux(C). Il en conclut que les schémas de couplage variable-variable et flux-variable sont stables et adaptés à l'étude de problèmes statiques (fluide au repos) et dynamiques (écoulement de cisaillement) indépendamment du rapport des pas de temps. Le schéma variable-flux est stable à condition d'avoir un rapport petit entre les pas de temps tandis que le schéma flux-flux est instable sur des temps longs en raison d'une accumulation d'erreurs numériques liées au calcul du flux, qui demande de faire des moyennes beaucoup plus échantillonnées comparées aux moyennes nécessaires pour évaluer les variables primaires (voir par exemple Hadjiconstantinou et al. [30]).

En 2009, Sun et al. [63], proposent une méthode qui utilise la méthode de contrainte dynamique initiée par Nie et al. [50] ainsi que les apports dus à Delgado-Buscalioni et Coveney [20] pour le contrôle de la masse volumique et à Yen et al [78] pour l'amélioration de la vitesse de convergence et la stabilité du schéma. Ils introduisent en plus, un thermostat de Langevin afin de contraindre la température dans la zone souhaitée. Contrairement au traitement dans certains articles [69, 78], où le thermostat est appliqué seulement dans la direction transverse de l'écoulement y , le thermostat est appliqué dans toutes les directions et s'écrit :

$$\ddot{\mathbf{r}}_i(t) = -\alpha \left(\dot{\mathbf{r}}_i(t) - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \dot{\mathbf{r}}_j(t) \right) + \frac{\mathbf{F}_i(t)}{m_i} + \frac{\mathcal{R}_i(t)}{m_i} \quad (2.8)$$

où α est le coefficient d'amortissement et \mathcal{R}_i est une force aléatoire due aux collisions associées au mouvement brownien des particules environnantes et vérifiant la relation $\langle \mathcal{R}_i(t) \rangle = \mathbf{0}$. La méthode est validée pour de l'argon liquide sur l'établissement de l'écoulement

de Couette et de conduction puis elle est utilisée dans le cadre d'un problème de condensation d'argon dans des micro-conduites. C'est à notre connaissance la première contribution utilisant un état gazeux dans une approche de couplage microscopique/macrosopique.

Par la suite, Sun et al. [64] ont amélioré la méthode de couplage en permettant d'appliquer des valeurs non plus constantes, mais variant linéairement dans les zones moléculaires à contraindre. Dans ces travaux, le thermostat de Langevin est appliqué seulement dans la direction y pour contrôler la température dans le domaine moléculaire. Ils ont par la suite utilisé leur méthode pour étudier des écoulements dont les parois présentent de fortes rugosités [65, 66].

Entre temps, Bugel et al. [11, 13] proposent un schéma de couplage plus simple basé sur une relaxation des vitesses microscopiques des molécules dans la zone moléculaire vers la valeur de la vitesse macroscopique. L'équation (2.2) est utilisée dans leur travail. La méthode est appliquée avec succès au second problème de Stokes ainsi qu'à un écoulement de Couette disphasique.

De ce constat, les principales difficultés rencontrées dans le développement des approches couplées multi-échelles, combinant des descriptions macroscopique et microscopique, sont listées ci-dessous :

1. Les questions d'implémentation et de programmation :
 - La parallélisation du code hybride est généralement une priorité en raison de la dynamique moléculaire, et n'est pas une tâche triviale.
 - Le développement d'une méthode générale pour traiter des géométries complexes et des conduites de grande extension.
 - Il est probablement toujours nécessaire de mettre en œuvre un cadre de couplage qui gère toutes les conditions nécessaires au code de couplage, y compris l'étape de déploiement et d'exécution des codes individuels, ainsi que le transfert des informations entre les deux approches à des temps bien définis. De manière générale, les approches moléculaire et continue peuvent être résolues avec des codes écrits dans des langages de programmation différents. Ils doivent alors communiquer entre eux à l'aide d'un code commun.
2. Les modélisations spécifiques et les problèmes intrinsèques au couplage :
 - Les échanges des variables primaires ou des flux.
 - La synchronisation des échelles de temps.
 - Le transfert d'informations du domaine continu vers le domaine moléculaire est le point sensible des méthodes hybrides basées sur la décomposition de domaine. Il faut notamment faire attention à la compatibilité entre l'imposition d'une vitesse et d'une température dans une même zone.

3. Le choix, et l'identification par des critères (par exemple le nombre de Knudsen), des régions où l'approche continue n'est pas adaptée et où la modélisation moléculaire doit être mise en place.

2.2 Modélisation macroscopique

Dans le domaine continu, les équations de Navier-Stokes et de l'énergie [6] sont utilisées et couplées à une équation d'état qui lie les champs de masse volumique, de pression et de température :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}} \\ c_p \left(\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} T) \right) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \left(\frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T} \right) \frac{Dp}{Dt} + \bar{\bar{\tau}} : \nabla \mathbf{u} \\ f_{eos}(p, \rho, T) = 0 \end{array} \right. \quad (2.9)$$

où $\mathbf{u} = u \mathbf{e}_x + w \mathbf{e}_z$, p et T sont respectivement les champs de vitesse à deux dimensions, de pression et de température ; $\bar{\bar{\tau}}$ est le tenseur des contraintes visqueuses ; ρ , μ , λ et c_p sont respectivement la masse volumique, la viscosité dynamique, la conductivité thermique et la chaleur spécifique du fluide. Le fluide est supposé newtonien et l'approximation de Stokes est utilisée pour calculer la viscosité de volume. L'expression du tenseur des contraintes visqueuses est alors

$$\bar{\bar{\tau}} = \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{u} \mathbf{I}_d \quad (2.10)$$

où \mathbf{I}_d est le tenseur identité.

L'équation d'état est issue de l'article de Kolafa et Nezbeda [37]. Les auteurs fournissent une loi analytique obtenue à partir de simulations de dynamique moléculaire d'un fluide de Lennard-Jones. Elle donne une expression analytique qui dépend de la masse volumique, de la température et du facteur de compressibilité Z utilisé dans la relation suivante :

$$p = Z(\rho, T) \rho r T \quad (2.11)$$

où r est la constante spécifique des gaz parfaits. Avec le facteur de compressibilité $Z = 1$, l'équation d'état correspond au modèle des gaz parfaits.

Pour un fluide de Lennard-Jones, les coefficients μ et λ sont des fonctions de ρ et de T obtenues à partir des corrélations issues de [26] et [12], respectivement. Les valeurs sont en bon accord avec celles calculées via des simulations de dynamique moléculaire en équilibre ou non-équilibre [38, 46, 48, 55] ou extraites à partir des bases de données par [39]. Les

chaleurs spécifiques à pression constante c_p et à volume constant c_v sont données par les lois de thermodynamique classique :

$$c_p - c_v = \frac{T(\partial p/\partial T)^2}{\rho^2(\partial p/\partial \rho)} \quad \text{avec} \quad c_v = \frac{\partial U}{\partial T} \quad (2.12)$$

Dans cette équation, la pression $p = f_p(T, \rho)$, l'énergie interne $U = f_U(T, \rho)$ et leur dérivées partielles sont calculées à partir de l'équation d'état analytique d'un fluide de Lennard-Jones [37]. Notons que les auteurs fournissent la valeur de l'énergie interne résiduelle de configuration U^R ; l'énergie interne est donnée par $U = U^{GP} + U^R$ où U^{GP} est l'énergie interne pour un gaz parfait. Ajoutons également que d'autres lois d'états, compatibles avec celle utilisée, sont données par [35, 49] ou plus récemment par [45].

Il convient d'ajouter que la corrélation de Bugel et Galliéro [12] fait apparaître le terme \sqrt{Z} dans l'expression de la conductivité thermique ce qui conduit à une solution complexe si le facteur de compressibilité est négatif. Cela peut se produire à proximité ou dans la zone de mélange du diagramme de phase du fluide de Lennard-Jones. Par exemple, le couple de paramètres $(\rho; T)$ tel que $\rho = 0,6$ et $T = 1,1$ conduit à la valeur calculée (à partir de la simulation dynamique moléculaire) $\lambda = 3,405$ tandis que la corrélation donne $\lambda = 3,382 + 0,023i$. La corrélation doit ensuite être utilisée avec attention pour un état thermodynamique au voisinage de la courbe de coexistence des phases (voir Fig. 2.2).

Une remarque importante est que la courbe de coexistence des phases n'est pas définie de manière unique pour un fluide de Lennard-Jones. Différents auteurs [35, 37, 40, 45, 49] établissent une loi d'état en fonction de simulations moléculaires utilisant des grandes valeurs ($r_c > 4$) du rayon de coupure. Toutes ces lois s'accordent bien mais la courbe de coexistence des phases est très sensible aux paramètres numériques comme r_c ou le fait que le potentiel soit relevé (pour être raccordé à 0 en r_c) [35]. Comme évoqué en section 1.7.3 la modification du potentiel influe également sur le diagramme de phases. Comme le rayon de coupure $r_c = 2,5$ a été généralement utilisé dans ce travail, la courbe présentée en figure 2.2 ne donne qu'une indication approximative de l'état du système simulé. Pour être totalement autonome, une loi d'état, associée au choix du potentiel et des différents paramètres numériques pourrait être calculée.

La question se pose également pour les valeurs des coefficients de transport issus des corrélations. Cependant, comme précisé dans [11, 12], "les propriétés de transport directes (comme la viscosité, la diffusion de masse ou la conductivité thermique) dépendent surtout de l'occurrence des collisions et non de la nature de celles-ci (reliée à la forme du potentiel d'interaction)".

Des conditions aux limites sont imposées sur chaque frontière du domaine. Elles seront détaillées au cas par cas, en fonction du problème traité, dans les sections correspondantes.

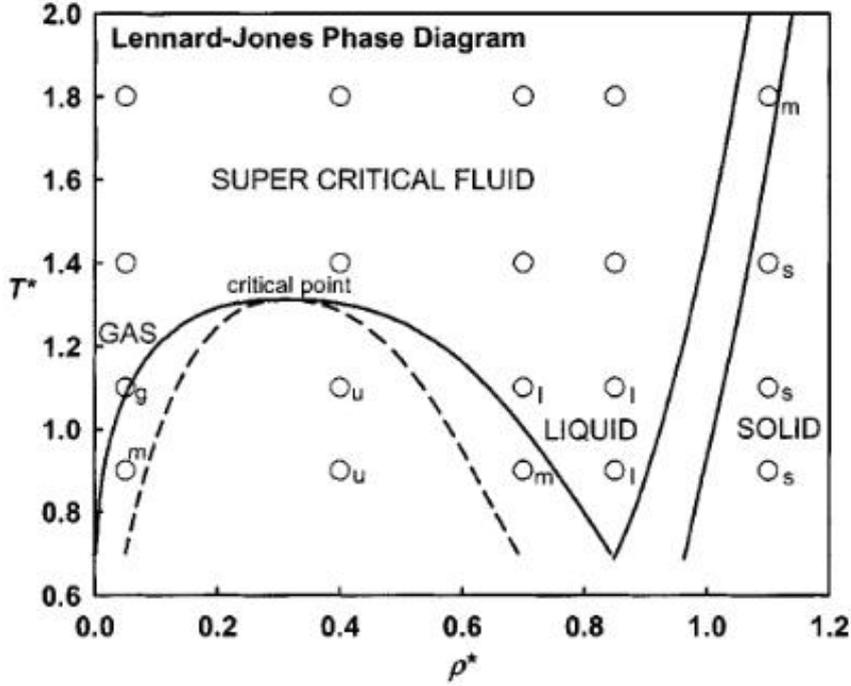


Figure 2.2 : Diagramme de phase d'un fluide de Lennard-Jones. Les axes sont présentés en unité réduite. Cette image est tirée de l'article de Lin et al. [40]. Les cercles creux représentent les points dans le diagramme (ρ, T) pour lesquels les simulations ont été faites. Les courbes pleines indiquent la courbe de coexistence de phases et la courbe de limite de stabilité (ligne spinodale pointillée) pour l'état d'équilibre liquide-gaz. Les étiquettes sont ajoutées à côté des cercles creux pour permettre d'identifier l'état thermodynamique de chaque point (s pour solide, l pour liquide, g pour gaz, m pour métastable et u pour instable).

Les champs discrets sont approximés par une méthode de Volumes Finis utilisant des variables colocalisées et des maillages non-structurés [16, 17]. L'algorithme est du second ordre en espace et en temps. Les équations non-linéaires, couplant implicitement l'ensemble des variables, sont résolues par un algorithme de Newton-Raphson. Les équations de Navier-Stokes et de l'énergie (2.9) peuvent également être résolues dans leur forme incompressible en supposant que la masse volumique reste constante. Dans ce cas, la chaleur spécifique est donnée par $c = c_p = c_v$.

2.3 Décomposition de domaine

Comme initié par O'Connell et Thomson [53], le domaine total est décomposé en trois sous domaines (voir Fig. 2.3a) :

1. Le domaine Ω_C , de hauteur H_C , est modélisé par une approche continue et permet de simuler efficacement les grandes échelles.

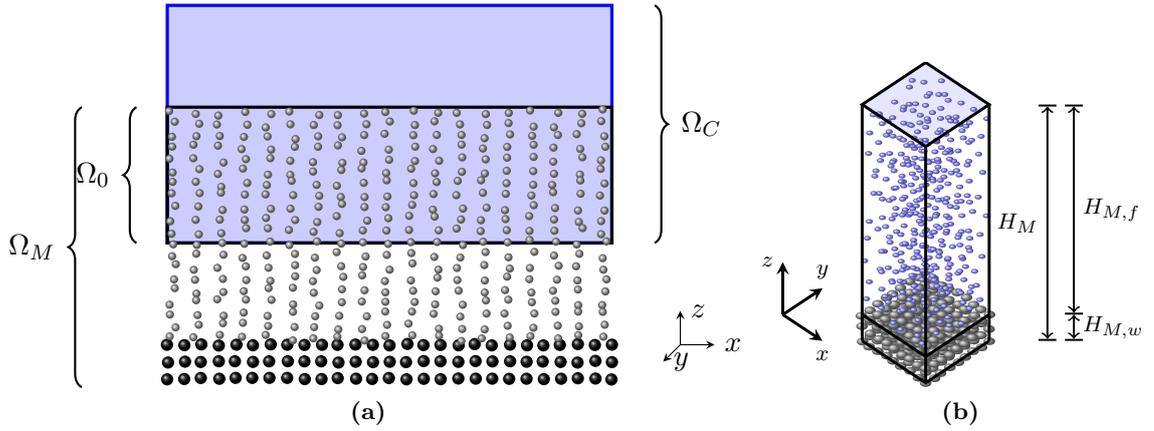


Figure 2.3 : Représentation de la décomposition de domaine pour la méthode de couplage. Le domaine moléculaire (Ω_M) et le domaine de continu (Ω_C) coïncident dans la zone de recouvrement (Ω_0). Des descriptions atomistiques (b) sont utilisées pour modéliser le mur et le fluide adjacent : le domaine de la simulation moléculaire de hauteur H_M comprend l'épaisseur du mur $H_{M,w}$ et de la région fluide $H_{M,f}$ ($H_{M,w} + H_{M,f} = H_M$).

2. Un domaine moléculaire Ω_M , de hauteur H_M , connecte la partie inférieure de la région continue à la paroi. Une modélisation moléculaire est utilisée pour rendre compte des interactions à petite échelle entre le fluide et le mur. Une illustration d'un domaine moléculaire seul est donné sur la figure 2.3b où on distingue un mur atomique d'épaisseur $H_{M,w}$ et une zone fluide de hauteur $H_{M,f}$ ($H_{M,w} + H_{M,f} = H_M$).
3. Une zone de recouvrement Ω_0 est conçue pour permettre les communications entre les deux échelles.

Un point important de la méthode de couplage proposée dans ce travail est que des conditions aux limites périodiques sont appliquées dans les directions x et y tangentiels à la paroi ; les transferts et le couplage seront alors purement mono-dimensionnels selon la direction verticale z .

La taille de la zone de recouvrement est typiquement 40% de la hauteur de la région moléculaire fluide $H_{M,f}$. De plus, cette zone est sous-divisée en 4 sous-couches :

- deux d'entre-elles garantissent les échanges entre les domaines du continu vers moléculaire (C→M) et inversement (M→C)
- une couche tampon assure la relaxation des valeurs échangées
- une couche de contrôle permet d'atténuer les effets de bord (voir Fig. 2.4) et, lorsque c'est nécessaire, de piloter la valeur de la masse volumique locale.

Ces différentes couches et la dynamique qui s'y opère seront détaillées dans la section suivante.

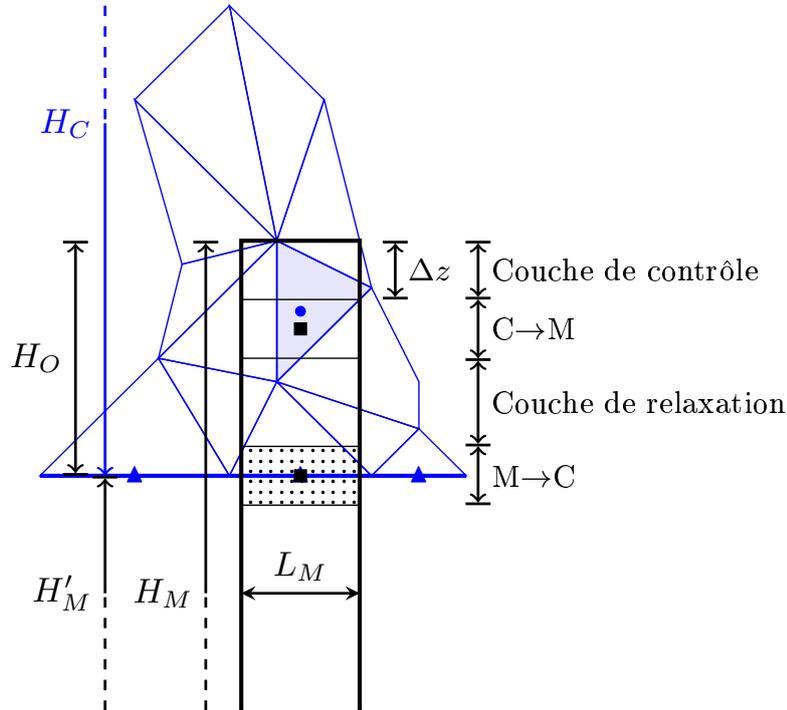


Figure 2.4 : Exemple de la zone de recouvrement de la hauteur $H_O = 4\Delta z$, garantissant la communication entre la région moléculaire de hauteur H_M et le domaine continu recouvert localement par un maillage de triangles.

2.4 Couplage spatial et zone de recouvrement

Avant de détailler le couplage, on rappelle que les variables primaires, c'est-à-dire les composantes du vecteur vitesse, la température et le cas échéant la masse volumique sont synchronisées en temps et en espace entre les deux méthodes de Dynamique Moléculaire et de Volumes Finis. Cela est effectué en échangeant les quantités macroscopiques à travers la zone de recouvrement. La continuité des flux est assurée si les coefficients de transport μ , λ sont identiques dans les deux domaines au niveau de la zone de recouvrement. De plus, la solution sera physiquement acceptable durant le régime transitoire d'établissement si la masse volumique ρ et la capacité thermique c_p sont elles aussi identiques.

Dans le modèle macroscopique, les paramètres physiques sont des données : il suffit de fixer leurs valeurs ou de donner leurs lois de variation. La difficulté vient de l'approche microscopique pour laquelle les valeurs μ , λ et c_p résultent de simulations. Pour ne pas avoir à les calculer localement pour chaque simulation couplée, on fixe leurs valeurs et variations à partir de données et de corrélations existantes dans la littérature (cf. Sec. 2.2)

2.4.1 Passage du moléculaire vers le continu : M→C

Les valeurs transmises du domaine moléculaire vers le domaine continu sont indicées par M→C.

Les composantes de la vitesse $\mathbf{u}_{M\rightarrow C}$ et de la température $T_{M\rightarrow C}$ sont calculées à partir de moyennes dans la zone M→C, sur un intervalle de temps $q\delta t$ et sur tous les échantillons (cf. Sec. 1.3.3, page 18). L'entier q est le nombre total de pas de temps microscopiques entre deux échanges successifs.

Pour le problème instationnaire, les variables sont synchronisées en temps, le pas de temps macroscopique est donc lié au pas de temps microscopique : $\Delta t = q\delta t$. En utilisant les définitions introduites précédemment, l'expression pour la vitesse $\mathbf{u}_{M\rightarrow C}$ s'écrit :

$$\mathbf{u}_{M\rightarrow C} = \langle \dot{\mathbf{r}} \rangle_{MET} \quad (2.13)$$

où les moyennes sont effectuées dans la cellule M→C. De la même manière, la température $T_{M\rightarrow C}$ est :

$$T_{M\rightarrow C} = \frac{2}{3k_B} \left\langle \frac{1}{2} m (\dot{\mathbf{r}} - \mathbf{u}_{M\rightarrow C})^2 \right\rangle_{MET} \quad (2.14)$$

où m est la masse réduite des atomes.

Les variables macroscopiques $\mathbf{u}_{M\rightarrow C}$ and $T_{M\rightarrow C}$ sont utilisées pour définir les conditions aux limites sur la frontière inférieure du domaine macroscopique.

Dans le cas d'une résolution stationnaire, les variables n'ont plus besoin d'être synchronisées. Un solveur stationnaire est utilisé pour la résolution des équations de Navier-Stokes et de l'énergie (cf. Eq. (2.9)). La valeur de q est choisie beaucoup plus grande, de l'ordre de 10^6 de sorte à avoir des moyennes précises. On note cependant que, durant le transitoire numérique entre les solutions initiale et stationnaire, cette valeur peut être réduite afin de diminuer le temps de calcul.

2.4.2 Passage du continu vers le moléculaire : C→M

Dans le sens inverse, du domaine continu à microscopique, les composantes de la vitesse $\mathbf{u}_{C\rightarrow M}$ et de la température $T_{C\rightarrow M}$ sont solutions des équations de Navier-Stokes et de l'énergie (2.9). Pour transmettre ces variables au domaine de dynamique moléculaire, l'équation du mouvement (1.1) est modifiée pour les $N_{MC\rightarrow M}^{E_k}(t_j)$ particules se trouvant dans la couche C→M, à l'instant t_j et pour l'échantillon E_k . Le procédé est le suivant :

Dans un premier temps, une méthode de dynamique sous contrainte est utilisée pour les molécules de la zone C→M de sorte à imposer un profil de vitesse macroscopique

linéaire [64] :

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i^*(t) = \mathbf{F}_i(t) - \langle \mathbf{F}(t) \rangle_{M_{C \rightarrow M} E} + \xi \frac{m_i}{\delta t} \left(\llbracket \mathbf{u}_{C \rightarrow M} \rrbracket (z) - \llbracket \langle \dot{\mathbf{r}}(t) \rangle_{M_{C \rightarrow M} E} \rrbracket (z) \right) \quad (2.15)$$

avec $\ddot{\mathbf{r}}_i^*(t)$ l'accélération intermédiaire de la molécule i appartenant à la zone C→M et \mathbf{F}_i la force qui dérive du potentiel (cf. Eq. (1.7)).

La notation $\llbracket \cdot \rrbracket (z)$ représente un opérateur linéaire de sorte que :

$$\llbracket \langle \dot{\mathbf{r}}(t) \rangle_{M_{C \rightarrow M} E} \rrbracket (z) \stackrel{\text{def}}{=} \langle \dot{\mathbf{r}}(t) \rangle_{M_{C' \rightarrow M'} E} + \frac{2(z - z_f)}{\Delta z} \left(\langle \dot{\mathbf{r}}(t) \rangle_{M_{C \rightarrow M} E} - \langle \dot{\mathbf{r}}(t) \rangle_{M_{C' \rightarrow M'} E} \right)$$

et

$$\llbracket \mathbf{u}_{C \rightarrow M} \rrbracket (z) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{u}_f + \frac{2(z - z_f)}{\Delta z} (\mathbf{u}_c(t) - \mathbf{u}_f(t))$$

où \mathbf{u}_c et \mathbf{u}_f sont respectivement les vitesses macroscopiques situées au centre (ordonnée z_c) et au milieu de la face inférieure (ordonnée z_f) de la couche C→M (voir Fig. 2.5 pour les notations). Ce dernier point est également au milieu de la nouvelle couche, notée C'→M' utilisée pour obtenir des grandeurs moyennées dans cette zone. Les valeurs \mathbf{u}_c et \mathbf{u}_f sont extrapolées à partir des vitesses approchées par la méthode des volume finis et leur gradient évalués au point de collocation \mathbf{x}_K le plus proche du centre de la couche C→M.

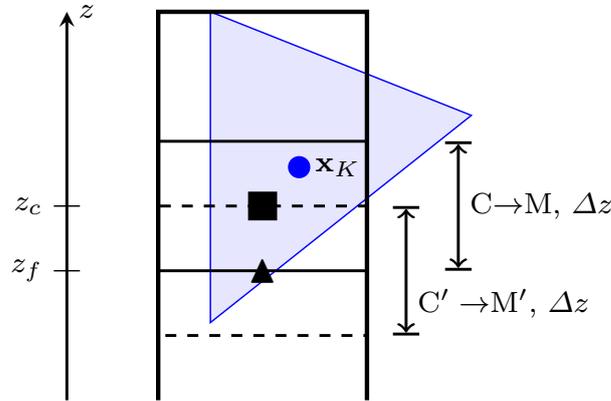


Figure 2.5 : Élargissement de la zone de recouvrement de la figure 2.4 autour de la couche C→M. Une couche supplémentaire étiquetée C'→M', de la hauteur Δz et centrée sur la face inférieure de la couche C→M (triangle), est introduite afin de gérer les contraintes dynamique et thermique dans la couche moléculaire C→M. Les valeurs de vitesse et température aux ordonnées z_f et z_c sont calculées à partir des valeurs et de leurs gradients au point de collocation \mathbf{x}_K (cercle plein bleu).

En plus des forces mentionnées dans l'équation (2.15) qui gèrent la vitesse moyenne des particules, la température est contrôlée à la valeur désirée au moyen du thermostat de Lan-

gevin [63, 64]. À l'accélération intermédiaire, qui tient compte de la contrainte dynamique, on ajoute le thermostat pour obtenir l'accélération au temps t :

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i(t) = m_i \ddot{\mathbf{r}}_i^*(t) - m_i \alpha_f \left(\dot{\mathbf{r}}_i(t) - \left[\langle \dot{\mathbf{r}}(t) \rangle_{MC \rightarrow ME} \right] (z) \right) + \mathcal{R}_i^f(z, t) \quad (2.16)$$

avec $\alpha_f = 1$ le coefficient d'amortissement et $\mathcal{R}_i^f(z, t)$ est une force aléatoire dont les composantes sont issues d'une loi gaussienne de moyenne nulle et d'écart type (fonction de z) construite sur la température du domaine macroscopique : $\sqrt{2\alpha_f m_i k_B \llbracket T_{C \rightarrow M} \rrbracket (z) / \delta t}$. Le profil linéaire de température linéaire ciblé $\llbracket T_{C \rightarrow M} \rrbracket (z)$ est approché de manière similaire à la vitesse.

Les écritures de la contrainte dynamique et du thermostat sont ici formelles. En pratique, le schéma de transport fait apparaître la vitesse $\dot{\mathbf{r}}_i$ à un pas de temps intermédiaire, soit décalé de $\delta t/2$.

La méthode proposée ici est une amélioration de [64]. Sun et al. avaient introduit l'imposition de contraintes linéaires dans la zone C→M qui jusqu'alors étaient constantes, ce qui nécessitait une hauteur de la zone de recouvrement petite par rapport à la hauteur du domaine moléculaire. Hormis les notations, l'équation sur la vitesse (2.15) est identique à celle proposée dans leur travail. La différence concerne l'équation (2.16) portant sur la température. Dans [64] le thermostat est appliqué uniquement dans la direction y où la vitesse moyenne de l'écoulement est nulle ce qui permet de ne pas introduire $\left[\langle \dot{\mathbf{r}}(t) \rangle_{MC \rightarrow ME} \right] (z)$. Dans un cas simple, la différence entre les deux méthodes sera illustrée dans le chapitre suivant.

La valeur du paramètre de relaxation ξ dans l'équation (2.15) doit être choisie avec attention. Une valeur trop faible ne permet pas de contraindre suffisamment la vitesse tandis qu'une trop grande valeur pourrait avoir des effets indésirables sur le champ de température. Sur la base des études précédentes, où ξ est soit fixé [53] soit lié au nombre d'itérations microscopiques q dans l'algorithme du couplage [63], la valeur de ξ sera étudiée dans le chapitre suivant.

Outre la vitesse et la température mentionnée ci-dessus, le gradient de pression $\partial_x p$ en z_c , assimilé au gradient de pression en \mathbf{x}_K ($\partial_x p \approx (\partial_x p)(\mathbf{x}_K)$), peut être transféré du domaine continu au domaine moléculaire grâce à une force volumique extérieure

$$\mathbf{F}_{i,\text{ext}} = (-m_i / \rho (\partial_x p)_K; 0; 0)^T \quad (2.17)$$

ajoutée dans l'équation du mouvement (1.1). Elle est appliquée sur toutes les molécules sauf celles comprises dans la couche C→M où la vitesse et température sont contrôlées. En pratique, la hauteur de la boîte de dynamique moléculaire est donc découpée en tranches horizontales et la force volumique extérieure est appliquée dans chacune des tranches en

fonction de la valeur de la masse volumique locale.

Pour des raisons de clarté, les notations sont abrégées dans la suite en supprimant les doubles crochets et dépendance à la variable z , par exemple, $\mathbf{u}_{C \rightarrow M} \stackrel{\text{def}}{=} \llbracket \mathbf{u}_{C \rightarrow M} \rrbracket (z)$ et $T_{C \rightarrow M} \stackrel{\text{def}}{=} \llbracket T_{C \rightarrow M} \rrbracket (z)$.

2.4.3 Couche de relaxation

Comme son nom l'indique, la couche de relaxation permet la relaxation des quantités imposées dans les couches $C \rightarrow M$ et $M \rightarrow C$. En effet, si les deux couches étaient superposées, les informations seraient échangées au même endroit et il n'y aurait pas d'évolution possible de leurs valeurs au cours du temps ou des itérations de couplage. La solution serait alors obtenue avec les valeurs initiales constantes dans les couches $C \rightarrow M$ et $M \rightarrow C$.

Alors que d'épaisseur $3\Delta z/2$ dans ce travail (voir Fig. 2.4), certains travaux (par exemple [11, 13]) ne la prennent pas explicitement en compte. Les couches $C \rightarrow M$ et $M \rightarrow C$ sont juxtaposées. La relaxation se fait alors sur la demie épaisseur de la couche $M \rightarrow C$ puisque celle-ci est centrée sur la frontière du domaine continu.

2.4.4 Couche de contrôle

Classiquement les simulations de dynamique moléculaire utilisent des conditions aux limites de type périodique (cf. Sec. 1.4, page 20). Dans la méthode de couplage, il n'y a pas lieu de les utiliser sur la face supérieure du domaine moléculaire (voir Fig. 2.3a). Dans ce cas, l'approche la plus simple pour éviter que les molécules quittent le domaine de calcul est de les faire réfléchir sur la face supérieure qui est alors une frontière fictive. On peut alors travailler dans un ensemble NVT ou NVE . Si on regarde les trajectoires, cela peut s'apparenter à une condition de symétrie. Néanmoins, cette approche génère une structuration du fluide proche de la frontière fictive, ce qui peut perturber le couplage.

On présente dans la suite une façon de réduire la structuration du fluide ainsi qu'une approche pour insérer ou enlever des molécules dans le but de tenir compte d'éventuels flux de masse.

2.4.4.1 Modèles de force limite

L'idée principale est d'ajouter aux molécules proches de la frontière fictive une force qui modélise l'action d'un réservoir dans les mêmes conditions thermodynamiques. Ces modèles de forces limites permettent alors de réduire la structuration du fluide. Ils sont utilisés essentiellement pour réduire le coût de calcul de la simulation. Une synthèse des différentes approches peut être consultée dans [79].

Une approche moins élégante serait d'augmenter la taille de la zone de contrôle, afin que la structuration et les effets de bords indésirables soient situés loin de la zone d'échange C→M.

Comme mentionné précédemment, on utilise une modélisation de mur spéculaire (réfléchissant) (cf. Sec. 1.8.1, page 29) au niveau de la frontière supérieure. Lorsqu'au cours d'une itération, un atome passe au travers, il est ré-inséré immédiatement au même endroit avec sa composante de vitesse normale inversée. Des perturbations locales de masse volumique et de température sont alors observées.

Pour palier ce problème on ajoute une force F^w aux particules qui permet de minimiser la structuration. L'équation du mouvement (1.1) est une nouvelle fois modifiée. Pour les molécules les plus proches de la paroi fictive, on a :

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i(t) = \mathbf{F}_i + F^w(r_w) \mathbf{e}_z \quad (2.18)$$

avec r_w la distance entre la particule i et la frontière fictive supérieure. L'expression de la force F^w peut être écrite en fonction de g , la fonction de distribution radiale, et du potentiel d'interaction fluide/fluide V_{ff} [76]. Son expression est donnée par :

$$F^w(r_w) = -2\pi\rho \int_{z=r_w}^{r_c} \int_{x=0}^{\sqrt{r_c^2-z^2}} g(r) \frac{\partial V_{ff}(r)}{\partial r} \frac{z}{r} x \, dx \, dz \quad (2.19)$$

avec $z_m = \min(r_c; r_w)$ et (x, z) les coordonnées cartésiennes locales centrées sur la particule (voir Fig. 2.6). La fonction de distribution radiale $g(r)$ est évaluée, soit via une expression analytique (par exemple [47]) à température $T_{C \rightarrow M}$ et à la masse volumique $\rho_{C \rightarrow M}$, soit déterminée explicitement dans une simulation séparée [76]. Elle donne, pour un fluide monoatomique, la structuration du fluide.

La force $F^w(r_w) \mathbf{e}_z$ résultant du calcul est dirigée selon l'axe z (voir Fig. 2.6). Elle est donc toujours normale à la paroi. Le calcul de l'intégrale peut se faire en pré-traitement. La méthode des rectangles est utilisée dans la thèse de Bugel [11]. La force est calculée pour tout $r_w \in [0; r_c]$ dont l'intervalle est discrétisé en 200 domaines élémentaires. Au cours du calcul, la force exprimée en r_w est déduite par une interpolation linéaire entre deux valeurs encadrant r_w . L'approximation obtenue est en très bon accord avec la corrélation proposée par Werder et al. [76].

Une alternative consiste à ne pas mettre de mur mais à ajouter une force de rappel (dirigée vers le domaine moléculaire) aux molécules pour les empêcher de sortir du domaine moléculaire. O'Connell et Thompson [53] ont utilisé une force limite constante modélisant l'action d'un réservoir à la pression p . Ils écrivent :

$$F^w = -\alpha p \rho^{-2/3}$$

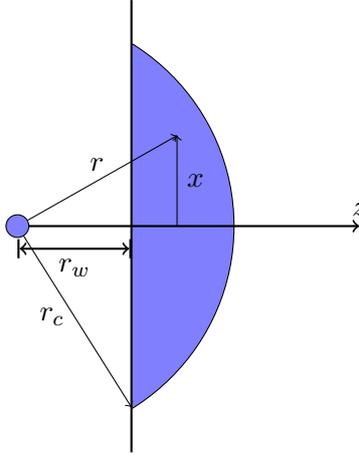


Figure 2.6 : Domaine d'intégration (bleu) pour la force F_m . Le nombre de particules se trouvant dans cette zone est $\iint 2\pi\rho_n g(r)xdxdz$ avec ρ_n la masse volumique moyenne et $g(r)$ la fonction de distribution radiale.

où α est un paramètre positif ajustable et ρ est la masse volumique locale. La distance à la paroi n'est pas prise en compte. Cette force est appliquée à toutes les molécules présentes dans la zone de contrôle.

Flekkøy et al. [24] ont proposé une autre force limite, toujours basée sur la pression :

$$F^w = -\frac{w(r_i)}{\sum_j w(r_j)pA}$$

où $w(r) = 1/r - 2/r_c + r/r_c$. Cette fonction de pondération diverge vers l'infini lorsque la distance r entre l'atome et la frontière tend vers à zéro.

Delgado-Buscalioni et Coveney [20] ont utilisé le même modèle de force limite que [24] en fixant $w = 1$.

Par ailleurs, Nie et al. [50] ont appliqué une autre force limite qui diverge en $r = 0$:

$$F^w = -\frac{\alpha p \sigma (r_c - r)}{[1 - (r_c - r)/r_c]}$$

La comparaison de ces différents modèles a été synthétisée dans le travail de Werder et al. [76]. La force limite proposée par les auteurs (cf. Eq. (2.19)) tient à la fois compte des forces attractives et répulsives alors que les autres modèles proposés ci-dessus n'ont que des forces répulsives. L'utilisation de la formule (2.19) est donc préconisée.

Concernant la structuration du fluide proche de la paroi, on trouve que le modèle de Werder et al. [76] est plus adéquat que les autres. Dans la figure 2.7, nous avons également comparé le profil de la force F^w obtenue par simulation de Dynamique Moléculaire, à celui issu de la fonction de distribution radiale de Morsali et al. [47]. Grâce à cette figure, on

voit que la force provenant de la simulation est bien cohérente à celle utilisant la fonction de distribution radiale. Des résultats sur la structuration seront présentés au chapitre 3.

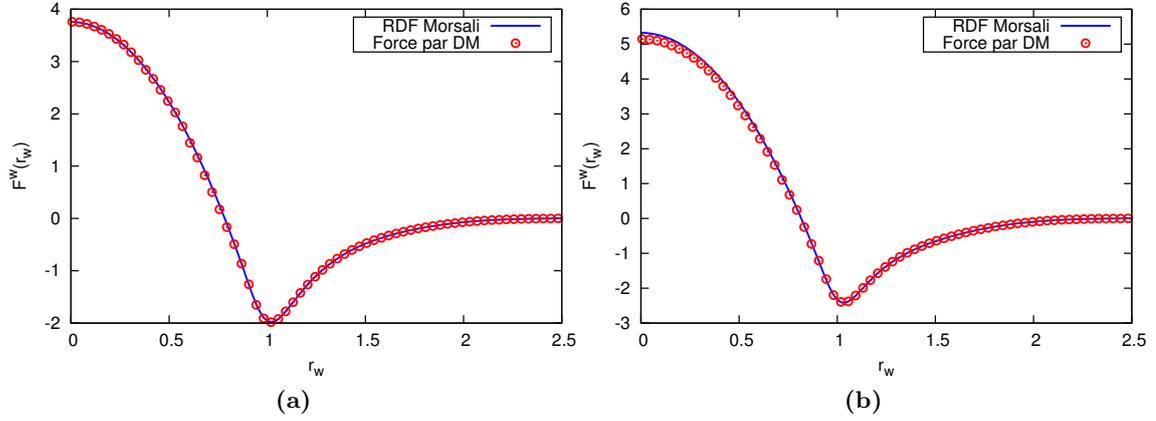


Figure 2.7 : Comparaison de la force $F^w(r_w)$ simulée en dynamique moléculaire sur une particule et celle évaluée avec la fonction de distribution radiale de Morsali et al. [47] pour (a) le cas supercritique de masse volumique $\rho = 0,6$ et de température $T = 1,8$; (b) pour le cas $\rho = 0,81$ et $T = 1,1$.

2.4.4.2 Contrôle de la masse volumique

La couche de contrôle est également utilisée dans certains cas pour piloter la masse volumique locale.

S'il existe un transfert de masse à travers l'interface, la continuité de la masse volumique dans la zone particulaire peut être assurée par l'insertion ou la suppression de particules selon que la masse est transférée vers ou à partir du domaine particulaire. Il existe plusieurs techniques pour traiter ce problème.

La première technique a été proposée dans [31]. L'idée principale est que le flux de masse peut être déterminé en fonction de la vitesse verticale au cours d'une itération de couplage. Cette approche est valide uniquement si les simulations moléculaire et continue sont synchronisées en temps. En notant s le nombre de particules à insérer ou à retirer au cours d'un pas de temps macroscopique Δt , la variation de masse ms s'écrit :

$$ms = -A\rho w\Delta t \quad (2.20)$$

où $A = \Delta x\Delta y$ est la surface de la frontière fictive, ρ est la masse volumique du fluide et w est la vitesse verticale macroscopique obtenue après résolution des équations de Navier-Stokes.

La valeur de s est calculée par la relation (2.20). Si elle est positive, s particules doivent être insérées au cours du pas de temps $\Delta t = q\delta t$. Il faut donc insérer s/q particule(s) à

chaque itération de dynamique moléculaire. Elles sont mises en place près de l'interface suivant la direction z et de façon aléatoire suivant les directions x et y . Pour empêcher que la distance r_{insert} entre les particules insérées et celles déjà présentes dans la boîte de simulation ne soit trop petite, le processus d'insertion est répété si $r_{insert} < r_{limit}$. La vitesse initiale de ces particules insérées est égale à la vitesse du domaine continu de sorte à ce que leur vitesse moyenne soit compatible avec la vitesse macroscopique.

Si s est négatif, les s particules qui sont les plus proches de l'interface sont enlevées au cours de l'intervalle Δt .

Une amélioration de la procédure d'insertion est proposée par Delgado-Buscalioni et Coveney [20]. L'objectif de l'algorithme USHER est de trouver un point d'insertion \mathbf{r} en préservant la valeur locale de l'énergie potentielle ou en fixant une valeur désirée. La première insertion $\mathbf{r}^{(0)}$ est choisie de façon aléatoire dans une zone bornée. La position \mathbf{r} est ensuite mise à jour via une méthode de descente en ciblant la valeur de l'énergie potentielle désirée (V_0). Le processus itératif s'écrit :

$$\mathbf{r}^{(n+1)} = \mathbf{r}^{(n)} + \frac{\mathbf{f}^{(n)}}{f^{(n)}} \delta s^{(n)} \quad (2.21)$$

où $\mathbf{f}^{(n)}$ est la force s'exerçant sur la molécule insérée et $f^{(n)}$ sa norme à l'itération n . Lors de cette étape de descente, les molécules déjà présentes ont leurs positions gelées. Le succès de la méthode réside dans le choix judicieux de $\delta s^{(n)}$. Une bonne performance a été atteinte en utilisant l'expression suivante :

$$\delta s^{(n)} = \begin{cases} \Delta s_{ovlp} & \text{si } V^{(n)} > V^{ovlp} \\ \min \left(\Delta s, \frac{V^{(n)} - V_0}{f^{(n)}} \right) & \text{si } V^{(n)} < V^{ovlp} \end{cases} \quad (2.22)$$

avec $\Delta s_{ovlp} = r_\sigma - (4/V^{(n)})^{1/12}$ un déplacement utilisé lorsque la position à l'itération précédente (généralement la position initiale) est très proche d'une molécule déjà existante et qui conduit à une valeur importante du potentiel $V^{(n)}$. La valeur r_σ doit être proche ou légèrement inférieure à une distance caractéristique de l'espacement entre deux particules (par exemple la distance donnée par le maximum dans la fonction de distribution radiale). Le seuil V^{ovlp} est fixé à une grande valeur qui représente une situation de superposition (typiquement, $V^{ovlp} = 10^4$). Lorsque de $V^{(n)} < V^{ovlp}$, la deuxième ligne de l'équation (2.22) permet de conduire la molécule insérée vers une position où son énergie potentielle tend vers V_0 . Le déplacement maximum $\Delta s \approx 0,1\rho^{-1,5}$ [20] est choisi dans ce travail. La position d'insertion est jugée correcte si l'écart à l'énergie potentielle ciblée $\|V^{(n)} - V_0\|/\|V_0\|$ est suffisamment petit (ici inférieur à 10^{-2}).

Plus de détails sur l'algorithme USHER peuvent être trouvés dans [20]. De plus, si on

veut insérer des molécules plus complexes, comme une chaîne polymère par exemple, l'algorithme USHER peut être remplacé par l'algorithme FADE [9] pour les procédures d'insertion et de retrait.

2.5 Couplage temporel ou couplage itératif

Dans la méthode hybride, la synchronisation entre les deux échelles micro et macroscopique dépend de la nature instationnaire ou stationnaire du problème étudié. Pour un problème stationnaire, les échelles de temps continu et moléculaire sont découplées : il n'y a pas de correspondance entre les pas de temps respectifs. En revanche, dans l'étude d'un écoulement instationnaire, elles doivent être couplées. Plusieurs schémas de couplage temporels existent dans la littérature. Un résumé peut être consulté dans la thèse de Bugel [11]. Pour ce travail il convient de trouver un schéma de couplage temporel ou itératif adapté à des situations instationnaires ou non. Le schéma que nous avons utilisé est représenté en figure 2.8.

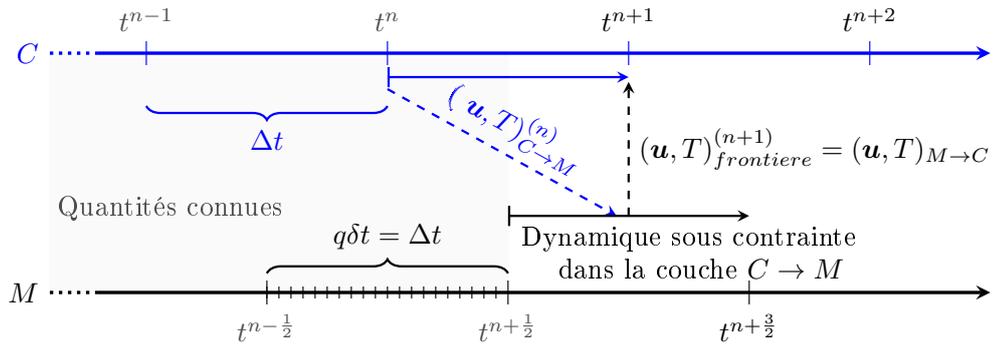


Figure 2.8 : Schéma de couplage temporel ou itératif. Toutes les grandeurs grisées sont connues. Au cours de l'intégration temporelle au niveau moléculaire (M) entre $t^{n+1/2}$ et $t^{n+3/2}$, la dynamique sous contrainte est utilisée dans la couche C → M de sorte que la moyenne de la vitesse et sa température au niveau microscopique convergent vers les valeurs issues de l'approche macroscopique du domaine continu (C) à l'instant t^n : $(\mathbf{u}, T)_{C \rightarrow M}^{(n)}$. Puis les valeurs moyennées, calculées à l'instant t^{n+1} dans la couche M → C, $(\mathbf{u}, T)_{M \rightarrow C}^{(n+1)}$, sont transférées au domaine continu par le biais de conditions aux limites à l'instant t^{n+1} .

Pour des situations instationnaires, les pas de temps microscopique et macroscopique sont liés afin de réaliser le couplage temporel entre les deux approches : $\Delta t = q\delta t$, $q \in \mathbb{N}^{*,+}$, avec une valeur typique de $q = 100$. Le premier point important est que les périodes d'intégrations temporelles des approches continue et moléculaire sont décalées d'un demi-pas de temps macroscopique $\Delta t/2$. En supposant que les positions et les vitesses de toutes les particules sont connues à l'instant $t^{n+1/2}$, l'évolution temporelle dans le domaine mi-

croscopique est effectuée par l'intégration des équations du mouvement (1.1) de $t^{n+1/2}$ à $t^{n+3/2}$ avec l'imposition des valeurs macroscopiques issues de l'instant t^n dans la couche $C \rightarrow M$: $\mathbf{u}_{C \rightarrow M}^{(n)}$ et $T_{C \rightarrow M}^{(n)}$. Ensuite, les équations de Navier-Stokes et de l'énergie (2.9) sont résolues à l'instant t^{n+1} avec les conditions aux limites $\mathbf{u}_{M \rightarrow C}^{(n+1)}$ et $T_{M \rightarrow C}^{(n+1)}$ calculées avec les moyennes $\langle \cdot \rangle_{M \rightarrow C} ET_{(n+1/2)-(n+3/2)}$.

Pour l'écoulement stationnaire, le couplage est toujours itératif, mais sans synchronisation temporelle. Supposons que les conditions aux limites macroscopiques soient connues à l'itération k . Les champs de vitesse et de température \mathbf{u}^k et T^k sont les solutions discrètes des équations de Navier-Stokes et de l'énergie (2.9) écrites sous leur forme stationnaire (les dérivées temporelles sont nulles). Une fois la solution d'équilibre atteinte, l'équation du mouvement (1.1) est intégrée dans le domaine moléculaire pour la période de $q\delta t$ avec les valeurs imposées $\mathbf{u}_{C \rightarrow M}^k$ et $T_{C \rightarrow M}^k$ dans la couche $C \rightarrow M$. Le nombre de pas de temps microscopique (ou q) diminue sensiblement, d'environ 10^6 à 10^4 , en fonction de l'augmentation l'écart relatif maximal, construit sur les variables échangées, entre deux itérations de couplage : $\max_{(M,\xi)} (\xi_M^{k-1} / \xi_M^k - 1)$ avec $M \in \{C \rightarrow M; M \rightarrow C\}$ et $\xi \in \{T, \mathbf{u}\}$. En d'autres termes, plus on est éloigné de la solution stationnaire, plus l'écart est grand et moins les variables échangées sont moyennées. Enfin, les nouvelles conditions aux limites de l'approche macroscopique à l'itération $k + 1$ sont mises à jour. Ce couplage itératif est plus efficace qu'un couplage temporel, à condition que seule la solution stationnaire soit recherchée.

2.6 Synthèse de la méthode hybride proposée

Dans ce chapitre, nous avons détaillé et étudié, dans le cadre de la technique de décomposition de domaine, les différentes méthodes proposées dans la littérature. De cette base, nous avons développé notre propre méthode hybride couplant une approche de dynamique moléculaire classique et les équations de Navier-Stokes compressibles et de l'énergie résolues par une méthode de Volumes-Finis adaptée à des maillages non structurés.

Une des principales approximations vient des conditions aux limites périodiques dans les directions tangentielles aux parois dans la région de dynamique moléculaire. Cela induit un couplage mono-dimensionnel dans la direction normale z . Lors du passage du vecteur vitesse du domaine continu au domaine moléculaire, l'équation vectorielle générale (2.15) sera utilisée avec $\mathbf{u}_{C \rightarrow M} = (u; 0; 0)_{C \rightarrow M}^T$. Cette approximation est d'autant plus valable que la zone moléculaire est localisée dans les couches limites de l'écoulement dans lesquelles la composante verticale de la vitesse peut y être négligée. Il faut donc que le rapport des hauteurs entre les zones continue et moléculaire soit grand ($\gg 1$). Ce dernier point justifie également la mise en place d'une méthode hybride. Celle-ci n'est avantageuse et efficace que si on utilise un modèle macroscopique dans une zone dont le coût de calcul serait

réhibitoire en dynamique moléculaire, ce qui n'est pas le cas si les domaines micro et macroscopique sont du même ordre de grandeur.

De même, lors de la remontée de l'information vers le domaine continu, le vecteur vitesse est tel que $\mathbf{u}_{M \rightarrow C} = (\langle \mathbf{r} \rangle \cdot \mathbf{e}_x; 0; 0)_{M \rightarrow C}^T$. On ajoute qu'il est également difficile de faire remonter des valeurs qui tendent vers 0. En effet, contrairement aux méthodes numériques adaptées aux systèmes de fonctions continues et régulières (Volumes-Finis, algorithmes de descente, ...), il est difficile de mesurer une grandeur qui tend vers 0 à la précision machine avec la méthode de dynamique moléculaire en raison des fluctuations et du calcul des moyennes.

La température est contrainte via un thermostat de type Langevin (2.16) dans la zone moléculaire. Comme pour la vitesse, l'algorithme employé permet d'imposer un profil linéaire. De plus, une force volumique extérieure, exprimée par l'équation (2.17), est utilisée afin que le gradient de pression macroscopique soit transféré du domaine continu au domaine moléculaire. L'approximation faite ici est que le gradient de pression ne varie pas dans la direction normale à la paroi.

La continuité des coefficients macroscopiques tels que la masse volumique ρ , la viscosité dynamique μ , la conductivité thermique λ et la capacité thermique à pression constante c_p est supposée. Pour ce faire, la masse volumique de la région moléculaire est contrôlée à celle de la zone continue au niveau de la zone de recouvrement. Les valeurs de μ et λ sont issues de corrélations pour un fluide de Lennard-Jones [12, 26] et c_p est calculé via l'équation (2.12) qui suppose la connaissance de la loi d'état du fluide [37].

Comme les variables vitesse et température sont échangées entre les deux approches, la continuité de μ et λ assure la continuité des flux de quantité de mouvement et de chaleur.

Enfin, pour atténuer la structuration du fluide à la frontière supérieure du domaine moléculaire, un modèle de force limite est ajouté [76] et l'algorithme d'insertion USHER [20] est utilisé lorsque la masse volumique doit être pilotée dans la région moléculaire.

Chapitre 3

Étude et paramétrage des schémas numériques

Sommaire

3.1	Modèle hybride analytique	59
3.2	Structuration du fluide	64
3.3	Étude des paramètres de relaxation	65
3.4	Contraintes constantes ou linéaires	67
3.5	Thermostat 1D/3D	69
3.6	Contrôle de masse volumique	70
3.7	Conclusion	79

Ce chapitre présente des résultats préliminaires concernant différents aspects de la méthode hybride développée dans ce travail. Après avoir mis en place un modèle hybride analytique pour tester et illustrer la convergence de la méthode, certaines difficultés liées à la résolution moléculaire sont discutées. On s'intéresse notamment aux effets de bords, à la compatibilité entre l'imposition d'une vitesse et d'une température dans une même zone ainsi qu'aux différentes façons d'appliquer les contraintes. Enfin, la méthode de contrôle de la masse volumique est introduite et discutée.

3.1 Modèle hybride analytique

Les simulations hybrides de problèmes stationnaires ou instationnaires exigent une initialisation cohérente de la solution à la fois dans les domaines moléculaire et continu.

Par exemple, lorsque la solution initiale est dynamiquement au repos et isotherme, la vitesse moyenne est nulle et la température est contrôlée à la valeur choisie. En considérant que ces conditions initiales sont facilement imposées aux variables macroscopiques du do-

maine continu, une plus grande attention doit être portée au domaine moléculaire. Dans un premier temps, les molécules du fluide et du solide peuvent être organisées selon une géométrie cristalline. Leurs vitesses initiales sont ensuite tirées à partir d'une loi de probabilité gaussienne de moyenne nulle et d'écart type correspondant à la température souhaitée. Cette initialisation n'étant pas suffisante pour imposer correctement la température, les équations du mouvement (1.1) sont alors intégrées en temps et un thermostat de Berendsen [5] (cf. Sec. 1.5.2, page 22) est appliqué sur l'ensemble des molécules fluides jusqu'à ce que la température initiale souhaitée soit atteinte. Une procédure similaire peut éventuellement être appliquée sur les molécules composant le solide.

Malgré la pertinence de la solution isotherme au repos comme condition initiale, il peut être plus approprié de choisir des profils de température et/ou de vitesse plus complexes, par exemple pour améliorer la vitesse de convergence de la méthode hybride vers une solution stationnaire. Le principe est alors d'initialiser le plus efficacement possible, notamment pour minimiser le nombre d'itérations de couplage et donc le coût du calcul. Pour cela, nous présenterons une variante de la méthode hybride dans laquelle la simulation de dynamique moléculaire, qui est la plus coûteuse, est substituée par des modèles analytiques simples qui modélisent le comportement des quantités macroscopiques échangées lors du couplage : la composante horizontale de la vitesse u et la température T . Cette approche est par la suite appelée *modèle hybride analytique*. Les solutions analytiques supposent un comportement du fluide à la paroi. Dans la littérature, et au cours de simulations, nous avons constaté que l'accommodation dynamique du fluide avec la paroi solide est toujours plus importante que l'accommodation thermique (TMAC > EAC). Une condition d'adhérence sera alors utilisée pour la solution analytique portant sur le champ de vitesse tandis qu'une condition de glissement thermique pourra être introduite dans la solution analytique de la température.

Les fonctions les plus simples sont les polynômes de degré 1 ou 2, selon que un ou deux points sont utilisés dans la zone de recouvrement (z_c ou z_c et z_f , voir Fig. 2.5, page 48). Le schéma de couplage est similaire à celui décrit en section 2.4.

Une fois la solution hybride analytique convergée, c'est-à-dire une fois que la solution couplée entre le modèle hybride analytique et la solution continue n'évolue plus au cours des itérations, le modèle analytique est substitué par la simulation de dynamique moléculaire. La dynamique des atomes ou molécules de cette dernière est modifiée localement afin que les profils de vitesse et de température correspondent localement à ceux obtenus avec le modèle hybride analytique. Cette étape est effectuée avec une méthode similaire à celle décrite pour la couche C→M dans la section 2.4.2 : le domaine moléculaire est dans ce cas divisé en 20 sous-domaines dans la direction z dans lesquels le mouvement des particules est intégré avec une contrainte dynamique (cf. Eq. (2.15)) et un thermostat de Langevin (cf. Eq. (2.16)) dont les valeurs par sous domaines sont issues du modèle hybride analytique.

Il convient de souligner que l'algorithme de couplage est fondamentalement identique entre

la méthode hybride standard, c'est-à-dire avec une simulation de dynamique moléculaire, et la méthode hybride analytique. Les communications entre le domaine continu modélisant le cœur de l'écoulement et le domaine moléculaire se produisent toujours dans la zone de recouvrement (dans les deux couches M→C et C→M) comme décrit en section 2.4. La différence est que les valeurs moyennes issues la zone moléculaire sont remplacées par les valeurs analytiques.

Pour illustrer la procédure itérative de convergence de la méthode hybride analytique, l'écoulement stationnaire de Poiseuille plan est simulé avec les approximations linéaires et quadratiques dans la zone moléculaire. L'algorithme de couplage est appliqué de manière itérative jusqu'à ce que l'état stationnaire soit atteint. Le critère retenu pour définir l'état stationnaire est basé sur les variables échangées entre les approches moléculaire et continue. La convergence est atteinte lorsque la variation de l'écart relatif maximum δ_{CL} des variables primaires transférées dans les couches C→M et M→C est inférieure à une valeur fixée δ_{tol} entre deux itérations couplées. On définit le critère par :

$$\delta_{CL} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\phi_i^{(k+1)} - \phi_i^{(k)})^2}{\sum_{i=1}^n (\phi_i^{(k+1)})^2}} \leq \delta_{tol} \quad (3.1)$$

où $\phi^{(k)}$ est un vecteur de rang n contenant l'ensemble des variables échangées entre les deux approches à l'itération k . Par exemple, si la composante horizontale de la vitesse et la température sont transmises, on a $n = 4$ et $\phi^{(k)} = \{u_{C \rightarrow M}^{(k)}, T_{C \rightarrow M}^{(k)}, u_{M \rightarrow C}^{(k)}, T_{M \rightarrow C}^{(k)}\}$. La valeur du critère de convergence retenue dans la suite est $\delta_{tol} = 0, 1\%$.

La figure 3.1 présente, dans le cas $H_{M,f}/H_C = 1$, le processus de convergence vers la

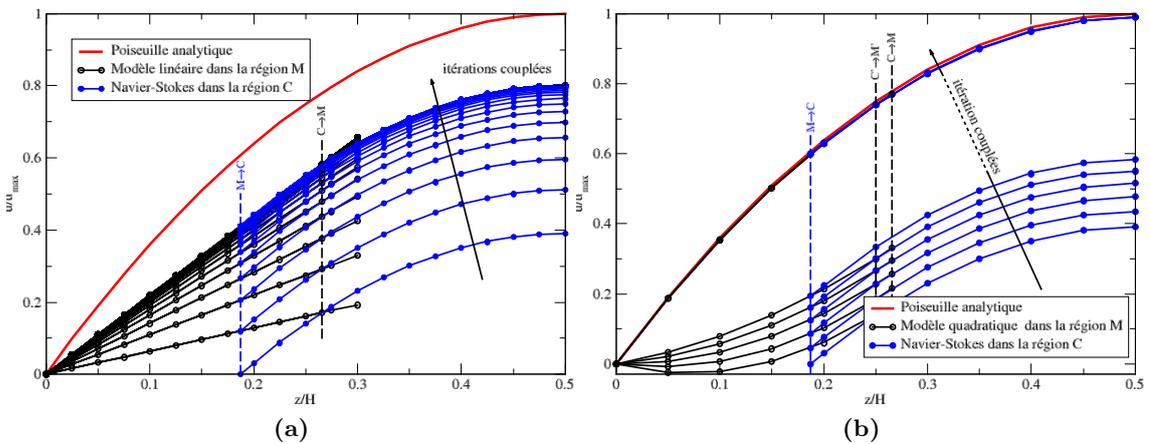


Figure 3.1 : Convergence itérative de l'algorithme de couplage pour la méthode hybride analytique avec le rapport des hauteurs $H_{M,f}/H_C = 1$ (a) Approximation linéaire. (b) Approximation quadratique; seulement les 5 premières et les 3 dernières itérations sont illustrées.

solution stationnaire. Cette dernière est atteinte après 17 itérations pour l'approximation linéaire (voir Fig. 3.1a) contre 56 pour un polynôme du second ordre (voir Fig. 3.1b). L'écart relatif quadratique sur l'ensemble du domaine entre la solution exacte et celle obtenue avec le modèle linéaire est d'environ 24% tandis que celle obtenue avec le modèle quadratique est inférieure à 1%. La valeur élevée du critère de convergence ($\delta_{tol} = 0,1\%$) explique le fait que le profil hybride analytique de la figure 3.1b ne converge pas exactement vers la solution exacte. En prenant $\delta_{tol} = 10^{-15}$, on obtient bien une erreur de l'ordre du zéro machine. Cependant, un critère si restrictif n'est pas applicable en dynamique moléculaire.

Nous avons ensuite construit un modèle analytique en supposant le profil de Poiseuille pour la vitesse dans le domaine moléculaire. Pour ce faire, le gradient de pression est pris en compte et il est superposé au profil linéaire de Couette. Pour la partie thermique, le profil de vitesse analytique obtenu est utilisé pour le calcul du terme de dissipation visqueuse. Dans ce cas, le profil de température est polynomial d'ordre 4. Pour la vitesse, la procédure itérative de convergence de la méthode hybride analytique est présentée dans la figure 3.2. Cette dernière est atteinte après 11 itérations. Ce modèle est donc plus judicieux

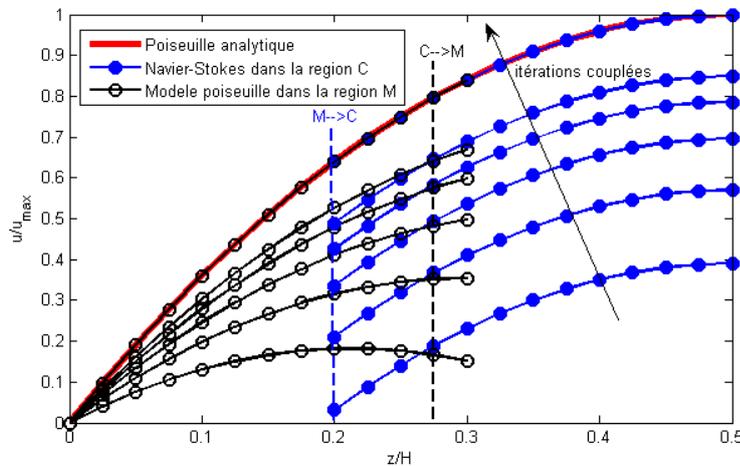


Figure 3.2 : Convergence itérative de l'algorithme de couplage pour la méthode hybride analytique avec le rapport des hauteurs $H_{M,f}/H_C = 1$ et en supposant un profil de Poiseuille dans la zone moléculaire. Seules les 5 premières et les 3 dernières itérations sont illustrées.

que l'utilisation de profils polynomiaux d'ordre 1 ou 2 (cf. paragraphe précédent). On peut noter que si le gradient de pression n'est pas introduit ou est très faible, on retombe sur des approximations linéaire pour la vitesse et quadratique pour la température qui sont solutions des équations de Navier-Stokes et de l'énergie incompressible avec dissipation visqueuse.

Par la suite, le modèle hybride analytique est utilisé pour obtenir une tendance servant à l'initialisation du système (cf. Sec. 4.3, page 90) ou au paramétrage de la méthode lorsqu'elle est appliquée à un problème multi-échelle (cf. Sec. 5.2.1, page 104). Des profils analytiques plus complexes seront également calibrés et utilisés en section 5.3.

Comme mentionné dans le chapitre précédent, le couplage hybride 1D est justifié si le rapport entre la hauteur de la zone continue et celle de la zone moléculaire est grand. La zone moléculaire est spatialement dans la couche limite dynamique dans laquelle la composante verticale de la vitesse peut être négligée en première approximation.

En utilisant l'approche hybride linéaire, les solutions stationnaires pour différents rapports $H_C/H_{M,f} = \{1; 2; 4; 8; \dots\}$ sont illustrées en figure 3.3. On constate que, au dessus

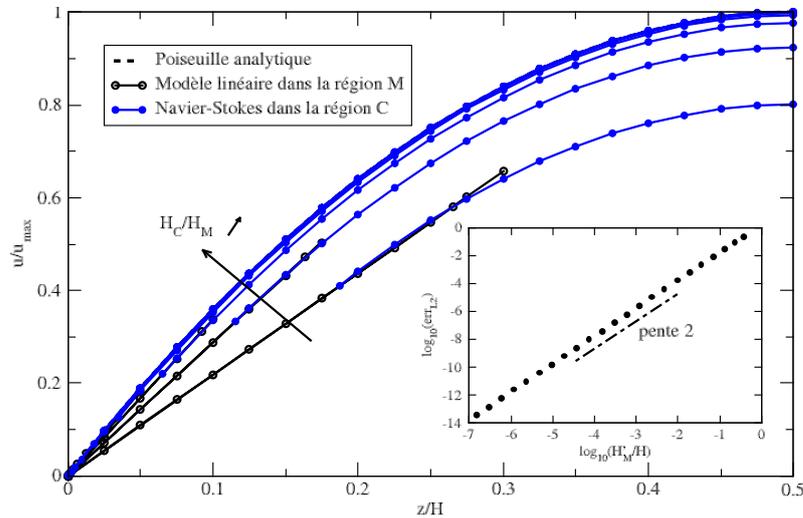


Figure 3.3 : Solution stationnaire du modèle hybride linéaire pour différents rapport $H_C/H_{M,f}$ allant de 1 à 512. La boîte encapsulée montre la diminution quadratique de l'erreur relative en norme L_2 par rapport à la solution de Poiseuille analytique en fonction du rapport H'_M/H .

d'un facteur 10 entre les hauteurs, l'erreur quadratique à la solution exacte sur l'ensemble du domaine n'est plus visible sur le tracé des profils. La figure encadrée présente le logarithme de cette erreur en fonction du logarithme de H'_M/H , H'_M étant la hauteur réduite de la zone moléculaire pure ($H'_M = H_{M,f} - H_O = 0,6H_{M,f}$). Cette erreur converge sans surprise de façon quadratique et atteint la précision machine quand $H_C/H_{M,f} \rightarrow \infty$.

L'étude menée ici a été faite avec des solutions analytiques dans les deux zones. À la précision numérique de la méthode, les résultats auraient été similaires si les équations de Navier-Stokes incompressibles avaient été résolues avec la méthode des Volumes-Finis dans la zone continue. L'obtention d'une solution est immédiate pour l'utilisateur.

La méthode hybride analytique sera utilisée dans la suite dans des situations plus com-

plexes pour lesquelles les équations de Navier-Stokes compressibles et de l'énergie seront résolues sur des maillages d'environ 1,5 million de mailles (cf. Sec. 5.2.1, page 104). Le coût de calcul, même s'il reste faible devant une simulation de dynamique moléculaire, n'est alors plus de l'ordre de la seconde mais plutôt de l'heure. En tenant compte du nombre d'itérations et du critère d'arrêt du processus itératif de couplage, le choix d'une approximation linéaire pour la vitesse associé à l'ajout du gradient de pression semble alors être le meilleur compromis entre la précision et le coût de calcul. Pour des valeurs de $H_C/H_{M,f} \gg 1$ on pourra toutefois se contenter d'un raccord linéaire pour les champs de vitesse et de température.

3.2 Structuration du fluide

Les conditions aux limites de type périodique sont souvent utilisées dans les simulations de dynamique moléculaire pour les systèmes homogènes. Cependant, pour la méthode hybride de cette thèse, cette condition est plus difficilement applicable, mais elle est justifiée en raison de l'inhomogénéité des quantités macroscopiques de la région moléculaire. Afin de supprimer la condition à la limite périodique de la région moléculaire au niveau de la borne supérieure de la zone de recouvrement (voir Fig. 2.4, page 46) et tout en gardant la pression moyenne correcte, une force limite [76] (cf. Sec. 2.4.4.1, page 50) est appliquée sur les atomes les plus proches de la frontière.

La figure 3.4 montre deux situations pour lesquelles le fluide est confiné entre deux murs parallèles. Dans le repère de la figure, les murs de gauche et de droite sont respectivement modélisés par des murs stochastiques et spéculaires (cf. Sec. 1.8.1, page 29). Dans le cas où

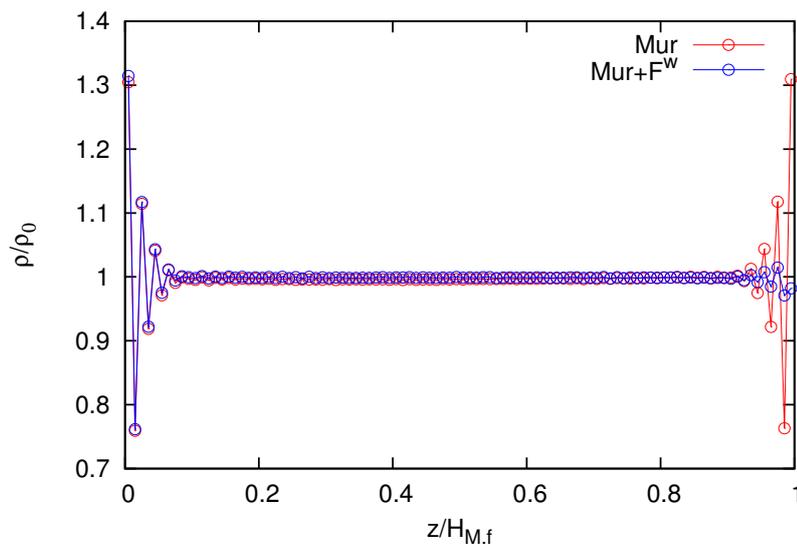


Figure 3.4 : Profil de masse volumique normalisé par la densité initiale dans une boîte de Dynamique Moléculaire, Murs seuls et Murs+Force F^w issue de [76]

aucun traitement particulier n'est appliqué, on observe dans le tracé de la masse volumique, une structuration du fluide à proximité des murs. Un modèle de force limite [76] est ensuite ajouté aux atomes voisins du mur de droite, ce qui a pour effet de réduire sensiblement la structuration (20% sur l'intensité maximale).

Comme dans la méthode de couplage hybride, la température et la masse volumique de la zone C→M sont susceptibles de varier, il faut donc pouvoir mettre à jour la force limite F^w au cours de la simulation.

3.3 Étude des paramètres de relaxation

Cette section a pour but d'étudier l'influence du paramètre de relaxation ξ qui a été présenté dans l'équation contraignant la vitesse (2.15) lorsque l'on souhaite imposer à la fois une vitesse et une température au niveau microscopique dans la zone C→M. Il faut remarquer que la compatibilité entre une contrainte de vitesse et celle d'une température dans une même zone n'est pas évidente ; les deux variables sont en effet liées entre elles par l'énergie cinétique. Comme mentionné dans le chapitre précédent, la dynamique sous contrainte (cf. Eq. (2.15)) est utilisée pour imposer la vitesse et le thermostat de Langevin (cf. Eq. (2.16)) est choisi pour contrôler la température.

Le paramètre de relaxation ξ joue un rôle déterminant lors de l'imposition de la vitesse, tandis que l'imposition d'une température fait intervenir le paramètre α_f . Il faut donc jouer sur ces deux paramètres pour obtenir la température souhaitée tout en ayant la vitesse correcte. Pour illustrer cette difficulté, l'écoulement stationnaire de Poiseuille plan est considéré. Les solutions sont paraboliques pour la vitesse et d'ordre 4 pour la température. Elles sont obtenues après la résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles et de l'énergie avec la prise en compte de la dissipation visqueuse.

Dans la littérature, la valeur de $\alpha_f = 1$ est typiquement utilisée. En gardant cette valeur, l'influence du paramètre de relaxation de la contrainte dynamique ξ est étudiée pour des configurations dense (argon en phase liquide) et diluée (phase gazeuse).

L'influence de ξ est présentée à travers les profils de vitesse et de température du fluide mais aussi avec l'écart relatif en norme L_2 (err_{L2}) entre les solutions moléculaire et continue dans la zone de recouvrement. En détail, cet écart est déterminé entre la solution dynamique moléculaire et l'approximation de la solution continue dans la zone de recouvrement pour $z/H \in [0, 375; 0, 5625]$. Des approximations polynomiales, compatibles avec la solution continue, d'ordre 2 et d'ordre 4, sont respectivement effectuées sur les profils de vitesse et de température. L'écart err_{L2} est alors défini par :

$$err_{L2} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\phi^M(z_i) - \phi^C(z_i))^2}{\sum_{i=1}^n (\phi^C(z_i))^2}} \quad (3.2)$$

où $\phi^M(z_i)$ et $\phi^C(z_i)$ sont respectivement, la grandeur (vitesse ou température) issue de la solution moléculaire et l'approximation de la solution continue calculée sur les n points discrets z_i équi-répartis dans la zone de recouvrement.

Dans un premier temps, le fluide considéré est de l'argon en phase liquide de masse volumique $\rho = 0,81$. La paroi du canal est maintenue à la température $T = 1,1$. Une illustration de la méthode hybride pour $\xi = 1$ est montrée en figure 3.5. La solution dynamique moléculaire est représentée avec des symboles creux et les symboles pleins se réfèrent à la solution continue. On note que le profil de vitesse (voir Fig. 3.5a) est admissible tandis que le profil de température présente des irrégularités au niveau de la zone de recouvrement (cf. Fig 3.5b). La valeur moyenne est correctement imposée dans la zone C→M mais une oscillation importante et non physique est observée à l'interface entre les couches de relaxation et C→M. En diminuant la valeur de ξ , et donc dans une certaine mesure le poids de la contrainte dynamique par rapport à la contrainte thermique, on peut voir sur la figure 3.5c que le profil de température est cette fois correctement imposé ; le profil de vitesse (non présenté) est quasiment inchangé.

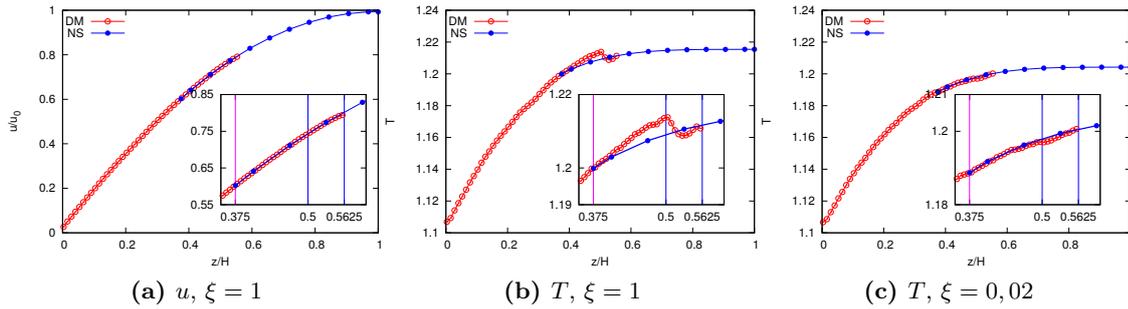


Figure 3.5 : Cas d'une phase liquide. Profils hybrides de vitesse (a) et température (b) et (c) pour différentes valeurs du paramètre ξ .

Le même travail a été réalisé pour un cas dilué. Pour ce faire, le fluide est de l'argon en phase gazeuse dont la masse volumique est $\rho = 0,05$. Dans la figure 3.6 sont présentés les profils de vitesse et de température avec la valeur $\xi = 0,02$. L'imposition de la vitesse est satisfaisante, mais la température n'est pas correctement contrôlée. Comme dans le cas liquide, la compatibilité entre l'imposition d'une vitesse et d'une température nécessite la diminution de la valeur de ξ . La valeur $\xi = 0,005$ permet d'obtenir un résultat satisfaisant (voir Fig. 3.6c).

En norme L_2 , les écarts relatifs entre les profils moléculaire et continu sont illustrés en figure 3.7 pour différentes valeurs du paramètre ξ . On trouve que l'écart relatif exprimé en pourcentage augmente pour la variable vitesse lorsque la valeur de ξ diminue, ce qui s'explique une fois encore par le fait que l'on donne moins de poids à la contrainte dynamique. Pour la température, on observe un minimum pour une valeur proche de $\xi = 0,007$

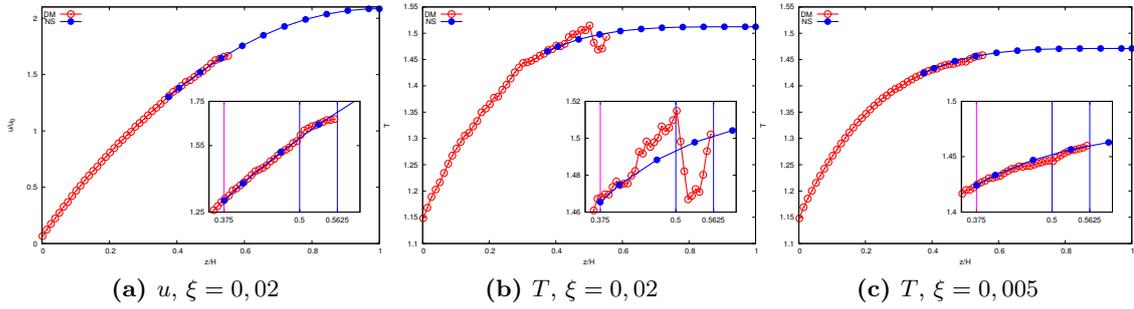


Figure 3.6 : Cas d'une phase gazeuse. Profils hybrides de vitesse (a) et température (b) et (c) pour différentes valeurs du paramètre ξ .

($\xi = 0,005$) dans la configuration dense (diluée).

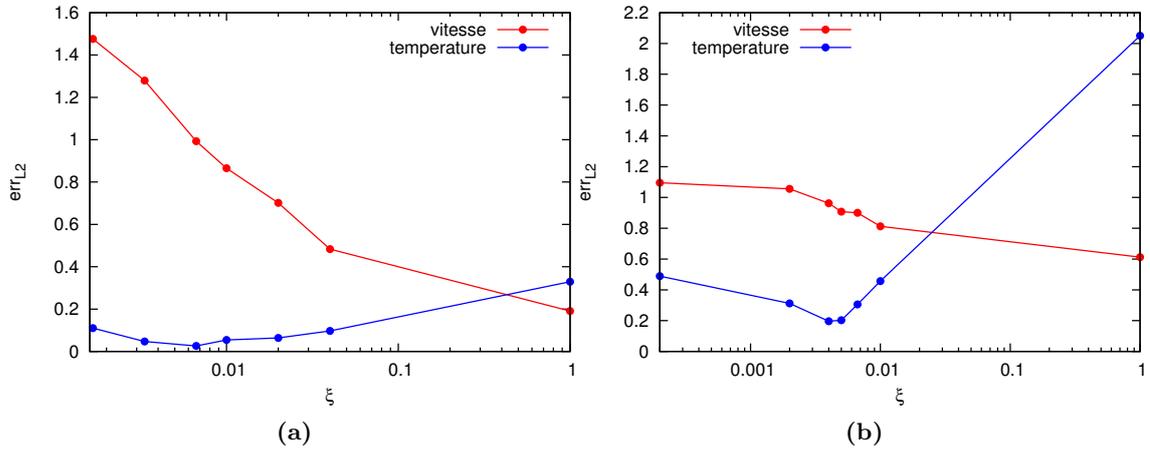


Figure 3.7 : Écart relatif en norme L_2 pour la variable vitesse et température dans la zone de recouvrement $z/H \in [0,375 : 0,5625]$, pour $\alpha_f = 1$: pour la phase liquide (a) et gazeuse (b)

Par la suite, pour avoir à la fois une imposition correcte de la vitesse et un profil de température acceptable, nous avons alors retenu la valeur de $\xi = 0,02$ lorsque l'on souhaite étudier des configurations denses et $\xi = 0,005$ pour des configurations diluées.

3.4 Contraintes constantes ou linéaires

Cette section a pour but de montrer la comparaison entre les résultats obtenus par la stratégie de couplage constant (l'imposition de contraintes uniformes dans la zone C→M) et celle du couplage linéaire (contraintes linéaires dans la zone C→M). Le couplage constant, historiquement antérieur au couplage linéaire, est utilisé dans plusieurs travaux comme [11, 50, 75, 78], et est justifié si la taille de la zone de recouvrement est petite par rapport à celle de la zone moléculaire. Si l'on veut augmenter ce rapport, il

est souhaitable, d'utiliser le raccord linéaire. Ceci est illustré dans cette section par un exemple formel puis sur les cas classiques d'écoulements de Couette, de Poiseuille et de conduction thermique.

La figure 3.8 montre le principe du schéma de couplage pour une variable quelconque (u ou T). La courbe abc est la solution désirée, tandis que la courbe $ab'c'$ est obtenue

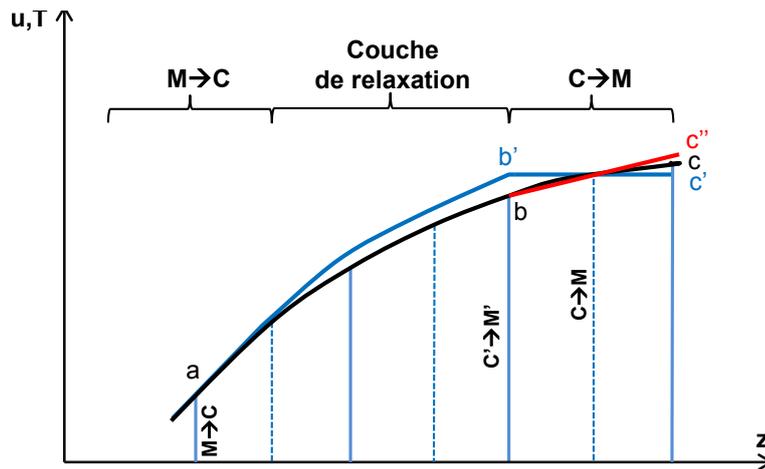


Figure 3.8 : Schématisation des deux types de couplage : constant (bleu) et linéaire (rouge). La courbe noire représente la solution souhaitée, figure inspirée de [65]. Le type de couplage linéaire a été initié en 2010 par Sun et al.

en utilisant un couplage constant dans la zone $C \rightarrow M$. Dans ce cas, une surestimation de la valeur à l'interface commune avec la couche de relaxation est observée. Cet écart est réduit avec l'utilisation du couplage linéaire (courbe abc'') qui est construit sur les valeurs prises au centre de la zone $C \rightarrow M$ et à l'interface. Cette approche a été détaillée en section 2.4 (page 46) et s'applique pour la vitesse (cf. Eq. (2.15)) et pour la température (cf. Eq. (2.16)).

Les deux approches sont illustrées sur des comparaisons de solutions numériques. Les équations (2.15) et (2.16) sont utilisées pour contraindre linéairement les profils de vitesses et de température mais aussi pour imposer des valeurs constantes. Dans ce cas, les variables sur la face x_f prennent la valeur du centre x_c de la cellule (voir Fig. 2.5, page 48). Les équations (2.15) et (2.16) sont alors similaires aux équations généralement proposées pour le couplage constant en vitesse (2.7) et en température (2.8).

En considérant les deux types de couplage, des problèmes stationnaires sont traités. La figure 3.9 illustre les profils de vitesse et de température de l'état stationnaire pour les trois problèmes considérés : Couette (voir Fig. 3.9a), conduction thermique (voir Fig. 3.9b) et Poiseuille (voir Fig. 3.9c). Les symboles rouges présentent la solution du couplage constant tandis que les symboles bleus représentent la solution du couplage linéaire. Grâce ces figures et aux zooms effectués dans la zone de recouvrement, on peut constater que l'écart

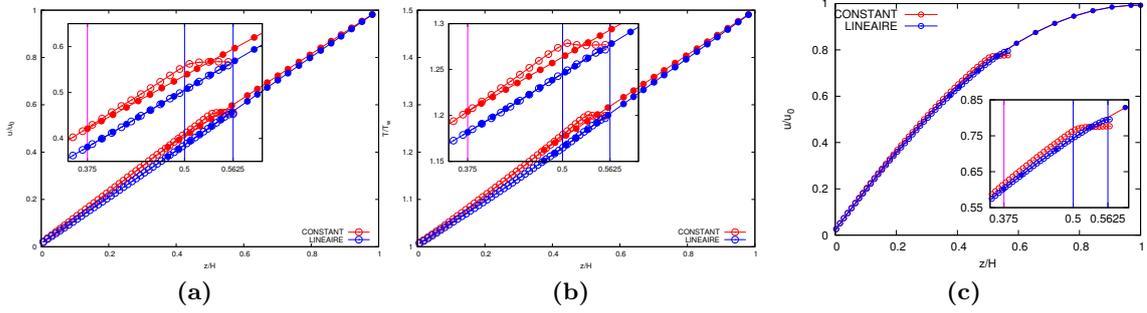


Figure 3.9 : Comparaison entre des contraintes constantes et linéaires simulées par le modèle hybride Dynamique Moléculaire/Volumes Finis : (a) écoulement de Couette, (b) Conduction et (c) écoulement de Poiseuille.

dans la couche $C \rightarrow M$ que nous avons mentionné ci-dessus est clairement dû à l'utilisation du couplage constant. Il est éliminé par le couplage linéaire. Les profils de vitesse et température sont modifiés et sont en meilleur accord avec une solution physique régulière. Dans la suite, bien que nécessitant un calcul de moyenne supplémentaire dans la couche $C' \rightarrow M'$ et une implémentation numérique plus complexe, le couplage linéaire est utilisé.

3.5 Thermostat 1D/3D

Cette section présente une comparaison des différentes façons d'imposer un profil de température linéaire avec l'utilisation d'un thermostat de Langevin. Initialement, bien que les problèmes traités soient globalement bi-dimensionnels (la dynamique moléculaire est toujours 3D), les méthodes hybrides utilisent un thermostat de Langevin appliqué uniquement dans la direction orthogonale au plan dans lequel s'effectue l'écoulement moyen. C'est notamment le cas des travaux [64, 69, 78]. Cette approche reprend l'équation (2.16) mais le thermostat est appliqué uniquement dans la direction y pour laquelle $\langle \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{e}_y \rangle = 0$. Il n'est alors pas nécessaire d'introduire la fonction de variation moyenne linéaire pour le champ de vitesse. Dans le travail de Sun et al. [63], le thermostat est appliqué dans les trois directions mais le terme $\left[\langle \dot{\mathbf{r}}(t) \rangle_{M_{C \rightarrow M} E} \right] (z)$ de l'équation (2.16) est constant dans la couche et égal à $\langle \dot{\mathbf{r}}(t) \rangle_{M_{C \rightarrow M} E}$. Leur version n'est donc, à notre avis, pas appropriée si la variation de température dans la couche $C \rightarrow M$ est importante.

La comparaison des directions d'imposition du thermostat, dans la direction orthogonale à l'écoulement (noté 1D dans la suite) ou dans toutes les directions (3D) est illustrée sur le problème de conduction thermique. La figure 3.10 présente les profils de température une fois le régime stationnaire atteint. Le profil souhaité (ligne noire continue) est imposé dans la couche $C \rightarrow M$. Les symboles rouges présentent la solution du thermostat 1D tandis que les bleus représentent la version 3D. On peut constater que le profil de température

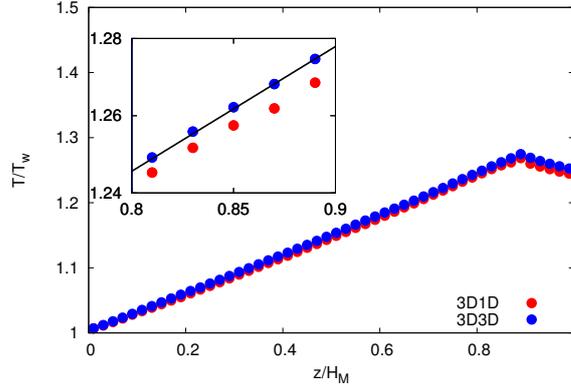


Figure 3.10 : Comparaison du type de couplage simulé par dynamique moléculaire avec le thermostat 3D (bleu) et 1D (rouge) pour le problème conduction. La ligne continue noire dans la figure encapsulée est le profil désiré.

issu du thermostat en 3D est en meilleur accord avec le profil souhaité. Par la suite, nous avons donc retenu le thermostat de Langevin appliqué dans les 3 directions de l'espace pour la méthode hybride.

3.6 Contrôle de masse volumique

La méthode de contrôle de la masse volumique est décrite dans cette section. L'intérêt d'un algorithme de contrôle est d'abord discuté via des exemples simples. Dans un second temps, l'algorithme principal est présenté et illustré sur deux problèmes de changement de phase.

3.6.1 Discussion sur la pertinence du contrôle de la masse volumique

Les simulations hybrides effectuées dans cette sous-section concernent des problèmes académiques. L'écoulement de Poiseuille plan, généré par une différence de pression, est une nouvelle fois considéré. La partie continue de la simulation est supposée incompressible, de masse volumique du fluide $\rho = \rho_{target}$ et de viscosité $\mu = \mu(\rho_{target}, T_{ref})$. Dans la sous-couche C→M, les valeurs de la vitesse et de la température sont échangées du domaine continu vers moléculaire. Lorsqu'il est activé, le contrôle de la masse volumique se produit également dans cette sous-couche C→M : la masse volumique $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$ est pilotée à la valeur désirée ρ_{target} qui est fixée à la valeur moyenne initiale $\langle \rho \rangle_{init}$ du domaine moléculaire.

La simulation hybride est effectuée pour un rapport de hauteurs $H_C/H_{M,f} = 2,45$, avec $H_{M,f} = 139,21$. Les coefficients macroscopiques sont évalués à la température de référence $T_{ref} = 1,25$ et à la masse volumique $\langle \rho \rangle_{init} = \rho_{target} = 0,05$. Les parois sont modélisées avec des murs fantômes (cf. Sec. 1.8.2, page 31). Cinq couches d'atomes de platine sont

réparties selon une structure de type Cubique à Face Centre (CFC111). L'écoulement de fluide est créé par deux valeurs du gradient de pression $\Delta p/L_x = g_0 = 7,77 \times 10^{-7}$ et $4g_0$. Au niveau moléculaire, la masse volumique dans la zone C→M est, soit laissée libre de façon à conserver $\langle \rho \rangle_{init} = \rho_{target}$ sur l'ensemble du domaine, soit pilotée à $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M} = \rho_{target}$

La figure 3.11 et le tableau 3.1 résument les principaux résultats. Quand le gradient de pression est $\Delta p/L_x = g_0$, la production de la chaleur induite par les termes visqueux dans l'équation de l'énergie est quasiment négligeable. Il en résulte que la masse volumique du domaine moléculaire varie très peu par rapport au profil initial constant. En conséquence, l'application (ou non) d'un contrôle de la masse volumique dans la couche C→M devrait être neutre.

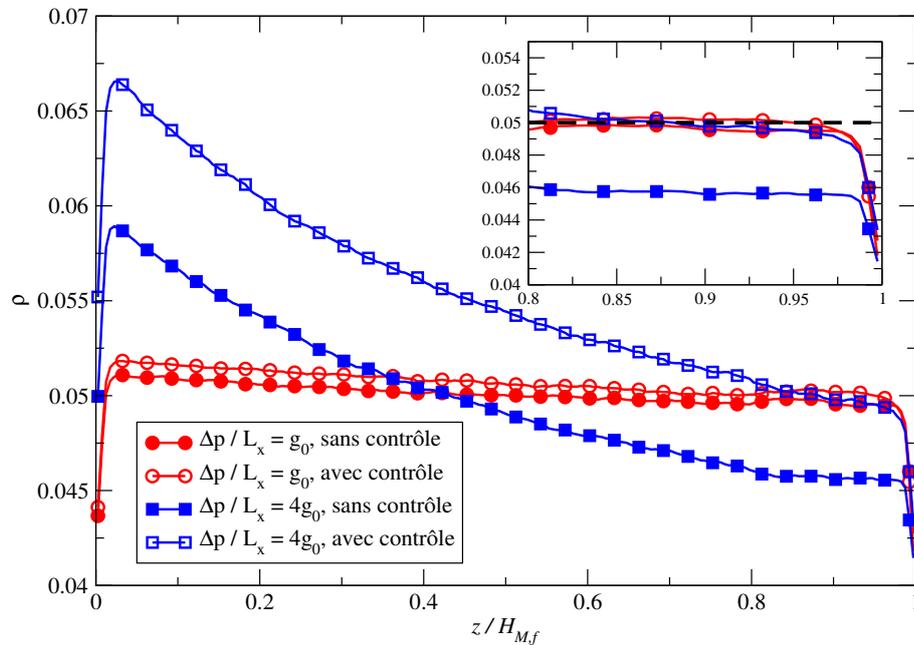


Figure 3.11 : Les profils de la masse volumique ρ dans le domaine moléculaire dans le cas de l'écoulement de Poiseuille avec deux valeurs différentes de la vitesse maximale u_{max} . Les symboles pleins présentent les profils sans contrôle de la masse volumique : la masse volumique initiale est choisie pour correspondre à celle désirée ρ_{ref} . Les symboles creux présentent les profils lorsque le contrôle est appliqué dans la zone de recouvrement tel que $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M} = \rho_{ref}$. Des valeurs supplémentaires sont données dans la tableaux 3.1. La figure encapsulée présente un zoom du profil dans la partie supérieure de la zone de recouvrement.

Cette analyse est confirmée en traçant les profils de masse volumique dans le domaine moléculaire et en calculant les valeurs moyennes sur tout le domaine $\langle \rho \rangle$ et locale $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$, en pilotant ou non la masse volumique à la valeur ρ_{target} dans la zone C→M (voir Fig. 3.11). Dans le cas où aucun contrôle n'est appliqué, le nombre de particules dans le domaine

Gradient de pression $\Delta p/L_x =$	$7,77 \times 10^{-7}$		$31,1 \times 10^{-7}$	
Contrôle :	sans	avec	sans	avec
$\langle \rho \rangle$	ρ_{init}	0,0506	ρ_{init}	0,0554
$(\langle \rho \rangle - \rho_{init})/\rho_{init}$	0%	1,2%	0%	11%
$\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$	0,0497	0,0502	0,0457	0,0502
$(\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M} - \rho_{target})/\rho_{target}$	-0,5%	0,4%	-8,5%	0,4%

Tableau 3.1 : La valeur moyenne de la masse volumique pour tout le domaine moléculaire $\langle \rho \rangle$ et dans le sous domaine C→M, $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$ avec ou sans contrôle de la masse volumique. Les écarts par rapport aux masses volumiques initiales et désirées sont également écrites ($\rho_{init} = \rho_{target} = 0,05$). Se référer à la figure 3.11 pour visualiser le profil de masse volumique dans le domaine moléculaire.

moléculaire n'évolue pas au cours de la simulation.

En effet pour $\Delta p/L_x = g_0$, et qu'un contrôle soit appliqué ou non, les valeurs de la masse volumique dans la couche de contrôle dévient de 0,5% par rapport à la valeur ciblée $\rho_{target} = \rho_{init}$ (voir Tab. 3.1). Ces écarts sont négligeables puisqu'ils sont du même ordre que l'incertitude provenant de la dynamique moléculaire et l'évaluation numérique des quantités moyennes. Notons que le fait de piloter $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$ conduit à une légère augmentation de 1,2% du nombre total de particules dans le domaine moléculaire. Comme prévu, l'application d'un algorithme de contrôle de la masse volumique dans le domaine moléculaire est clairement inutile lorsque la masse volumique du domaine moléculaire reste constante et uniforme, ce qui est le cas lorsque les gradients de température sont faibles.

Pour le gradient de pression plus grand $\Delta p/L_x = 4g_0$ qui génère un débit plus élevé, la variation de température due à la production de chaleur par frottements mène à un profil de masse volumique non constant. Dans ce cas, maintenir constant le nombre de molécules dans l'ensemble du domaine moléculaire ne se justifie plus. Comme on peut voir en figure 3.11, le profil de masse volumique varie d'environ 30% entre ses valeurs dans le cœur de l'écoulement et proche de la paroi. Une méthode de contrôle de la masse volumique dans la sous-couche C→M est alors essentielle pour assurer la continuité avec le domaine continu. Sans contrôle, une diminution d'environ 8% de la masse volumique par rapport à la valeur ciblée est observée dans la couche de C→M (voir Tab. 3.1). Pour garder $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$ à la valeur ρ_{target} ($= \langle \rho \rangle_{init}$), l'insertion ou le retrait de particules du domaine moléculaire est nécessaire. Dans notre exemple, le nombre de molécules a sensiblement augmenté de plus de 10% par rapport à la valeur initiale.

Dans cette section, nous avons mis en évidence l'importance du contrôle de la masse volumique dans des problèmes où les profils de masse volumique évoluent à cause du gradient de température. D'autres situations peuvent mener à gérer la continuité de la masse volumique, par exemple lorsque la stratification du fluide à proximité de la paroi

est importante ou si un changement de phase se produit au voisinage de la paroi. Les phénomènes de condensation et d'évaporation sont illustrés dans la suite.

3.6.2 Algorithme et étude numérique

Dans l'algorithme développé ci-dessous, nous supposons que le couplage de la masse volumique dans le domaine moléculaire n'est effectué que dans une seule direction : du domaine continu vers le moléculaire. Cette hypothèse est justifiée par exemple dans des micro ou nano-conduites pour lesquelles le champ de la masse volumique résulte principalement des conditions aux limites d'entrée et de sortie qui sont appliquées pour créer le mouvement à grande échelle.

Rappelons que le transfert d'informations du domaine continu au moléculaire se fait dans la couche C→M. Afin de contrôler la masse volumique, on modifie localement le nombre de molécules. Il est donc essentiel que l'insertion et le retrait de particules préservent les valeurs moyennes de la vitesse et de la température imposées du domaine continu. Cette condition est difficile à respecter en utilisant à la fois la dynamique sous contrainte (cf. Eq. (2.15)) et le thermostat (cf. Eq. (2.16)), puisque toutes les particules insérées ou retirées perturbent sensiblement les équilibres locaux. L'approche adoptée dans ce travail est alors de piloter le nombre des particules, non pas dans la sous-couche C→M, mais dans la couche de contrôle (voir Fig. 2.4, page 46). L'algorithme général est divisé en deux étapes : une évaluation locale de la masse volumique moyenne sur Δ pas de temps microscopique(s) qui est suivie d'une insertion ou d'un retrait instantané de particules dans la couche de contrôle. Cela peut être exprimé de la façon suivante :

1. la masse volumique moyenne $\langle \rho \rangle_{\nu, \Delta}$ dans la sous-couche ν du domaine moléculaire est calculée sur l'intervalle de temps $[t - \Delta \times \delta t; t]$;
2. à l'instant t , la différence entre $\langle \rho \rangle_{\nu, \Delta}$ et la masse volumique désirée ρ_{target} est convertie en un nombre d'atomes $|\Delta N|$ tel que $\Delta N = \text{int}[(\rho_{target} - \langle \rho \rangle_{\nu, \Delta})\nu]$, où $\text{int}(x)$ retourne la valeur entière la plus proche du réel x . En fonction de la valeur algébrique ΔN , $|\Delta N|$ atomes sont insérés ($\Delta N < 0$) ou retirés ($\Delta N > 0$) dans la couche de contrôle.

Le calcul de $\langle \rho \rangle_{\nu, \Delta}$ est assez simple : la moyenne est effectuée sur l'espace ν , le nombre d'itérations Δ et le nombre d'échantillons comme cela a été présenté dans la section 1.3.3 (page 18). Deux sous-couches ν ont été testées pour évaluer la masse volumique : la sous-couche C→M, où les valeurs de la vitesse horizontale et de température sont contrôlées, et la couche de contrôle (voir Fig. 2.4, page 46).

L'insertion de particules ($\Delta N < 0$) repose sur l'algorithme USHER (cf. [20] ou Sec. 2.4.4.2, page 53). Si $\Delta N > 0$, les ΔN particules les plus proches de la limite supérieure du domaine moléculaire sont simplement retirées.

Le comportement de l'algorithme de couplage est étudié pour des situations de changement de phase. Le fluide traité est toujours de l'argon. Il est en phase gazeuse et condense à la paroi dans le cas de condensation. Pour le cas d'évaporation, il est en phase liquide et s'évapore à proximité de la paroi. La température de la paroi T_w est choisie telle que le changement de phase reste au voisinage de la paroi, c'est-à-dire que l'interface entre la phase liquide et gazeuse reste toujours dans le domaine moléculaire. Les caractéristiques de l'interface gaz/liquide sont déterminées en appliquant une méthode des moindres carrés non linéaire (algorithme de Marquardt-Levenberg) sur le profil de la masse volumique via la fonction suivante :

$$\rho(z) = \frac{a}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{z-b}{c} \right) \right) + d \quad (3.3)$$

où $2a$ représentent le saut de la masse volumique, b est l'ordonnée du milieu de l'interface, $2c$ est une mesure de l'épaisseur et $d = \rho(b)$ est la masse volumique moyenne entre les phases (voir Fig. 3.12 pour une interprétation graphique des différents coefficients de l'approximation de l'équation (3.3)).

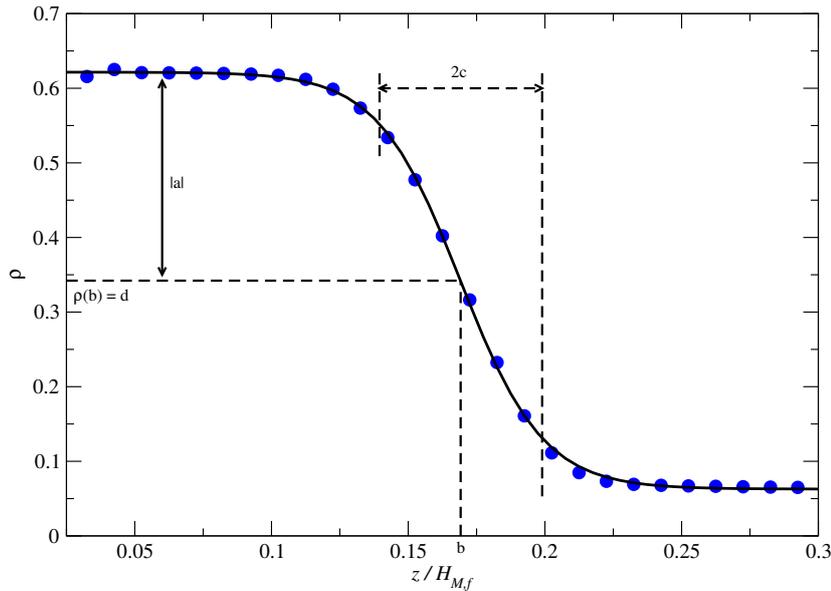


Figure 3.12 : Profil de la masse volumique à l'interface liquide/gaz. Les symboles bleus représentent la masse volumique moléculaire locale et la ligne continue indique l'approximation via l'équation (3.3). L'interprétation graphique des coefficients a , b , c et d de la fonction d'approximation (3.3) sont également données.

Les paramètres de simulation pour le problème de condensation sont les suivants : la hauteur du domaine moléculaire est $H_{M,f} = 139,21$, la masse volumique est $\rho_{init} = \rho_{target} = 0,05$, ce qui correspond à un fluide en phase gazeuse, et la température est $T_{init} = T_w = 1,1$. Le gradient de pression choisi est $\partial_x p = -3,11 \times 10^{-6}$, la vitesse horizontale et la température dans la sous-couche C→M sont respectivement maintenues à $u_{C \rightarrow M} = 0,8$

et $T_{C \rightarrow M} = 1, 12$. Après le processus d'initialisation du système, la température du mur est portée à $T_{C \rightarrow M} = 0, 925$ et l'état stationnaire est recherché.

La figure 3.13 présente les profils de la masse volumique dans le domaine moléculaire pour l'algorithme de contrôle appliqué chaque 1, 10, 100, 1000 et 10000 itérations. Quand l'évaluation et le contrôle de la masse volumique sont effectués dans la zone de contrôle (voir Fig. 3.13a), la position de l'interface s'évolue significativement avec le paramètre Δ contrôlant la fréquence de mise à jour de masse volumique. Bien que la masse volumique du

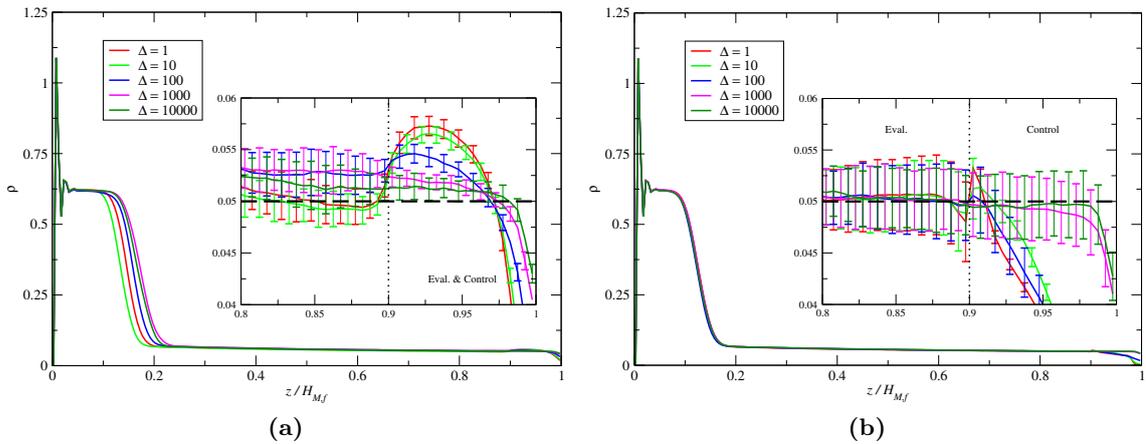


Figure 3.13 : Problème de condensation. Les profils de masse volumique dans le domaine moléculaire, pour l'algorithme d'insertion/retrait appliqué toutes les Δ itération(s). La masse volumique ciblée ρ_{target} est indiquée par la ligne discontinue. (a) : L'évaluation et le contrôle de la masse volumique sont faits dans la zone de contrôle ($z/H_{M,f} \in [0, 9; 1]$). (b) : L'évaluation de la masse volumique a lieu dans la sous-couche C→M ($z/H_{M,f} \in [0, 8; 0, 9]$) tandis que la gestion de masse volumique est toujours réalisée dans la zone de contrôle. Les barres d'erreur représentent les écarts types calculés sur l'ensemble des 64 échantillons. Certaines quantités extraites à partir de ces courbes sont précisées dans le tableau 3.2.

gaz loin de la paroi semble être insensible à Δ , un examen approfondi de son comportement dans la sous-couche C→M ($z/H_{M,f} \in [0, 8; 0, 9]$) montre que le profil est en fait ni uniforme, ni réellement contrôlé à la valeur désirée ρ_{target} (ligne horizontale discontinue). Ainsi, la difficulté du contrôle local de la masse volumique dans une région de l'écoulement peut avoir des conséquences plus globales, comme ici sur la position de l'interface gaz/liquide. Ces aspects peuvent être expliqués par la stratification parasite de la masse volumique qui se développe près de la frontière fictive supérieure de la couche de contrôle (voir l'élargissement de la figure 3.13a). Il en résulte un gradient de densité significatif ainsi qu'une mauvaise estimation de la masse volumique à $z/H_{M,f} = 0, 9$, ce qui correspond à l'interface entre la couche de contrôle et la couche C→M où sont imposées les contraintes dynamique et thermique. Les variations des caractéristiques de l'interface (coefficients de l'équation (3.3)) et de la masse volumique $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$ en fonction de Δ sont illustrées dans le tableau 3.2 (colonne nommée "une couche" (couche de contrôle)). Même si la dispersion de

Δ	Interface		masse volumique		
	b	c	$\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$	$\text{diff}_{\rho_{\text{ref}}}$	$\frac{\sigma_{\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}}}{\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}}$
1	0,147	0,0242	0,05031	0,6%	1,4%
10	0,135	0,0246	0,04978	-0,4%	1,2%
100	0,159	0,0250	0,05270	5,4%	0,4%
1000	0,172	0,0290	0,05293	5,9%	0,4%
10000	0,168	0,0288	0,05165	3,3%	0,9%
$\langle \cdot \rangle$	0,156	0,0263	0,05147	-	-
$\sigma \cdot / \langle \cdot \rangle$	10%	9%	2,7%	-	-

(a) une couche (couche de contrôle)

Δ	Interface		masse volumique		
	b	c	$\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$	$\text{diff}_{\rho_{\text{ref}}}$	$\frac{\sigma_{\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}}}{\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}}$
1	0,126	0,0266	0,05024	0,5%	1,3%
10	0,124	0,0272	0,05024	0,5%	0,9%
100	0,123	0,0262	0,05023	0,5%	0,6%
1000	0,126	0,0264	0,05025	0,5%	0,4%
10000	0,124	0,0270	0,05034	0,7%	0,7%
$\langle \cdot \rangle$	0,125	0,0267	0,05026	-	-
$\sigma \cdot / \langle \cdot \rangle$	1%	2%	0,1%	-	-

(b) deux couches (couche de contrôle et C→M)

Tableau 3.2 : Problème de condensation avec l'évaluation et le contrôle de la masse volumique appliquée dans une ou deux différentes couches. Sont donnés en fonction de Δ : l'ordonnée (b) et la demi-épaisseur (c) de l'interface (Eq. (3.3) avec un intervalle d'approximation $0,05 \leq z \leq 0,3$), la valeur moyenne de la masse volumique $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$ dans la couche C→M, l'écart relatif entre la valeur de la masse volumique mesurée et ciblée $\text{diff}_{\rho_{\text{target}}} = \langle \rho \rangle_{C \rightarrow M} / \rho_{\text{target}} - 1$) et l'écart type relatif de $\langle \rho \rangle(z)$ dans la couche C→M ($\sigma_{\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}} / \langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$). Les deux dernière lignes donnent la moyenne et l'écart type relatif sur toutes les valeurs de Δ , pour b , c et $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$.

la masse volumique dans la couche C→M est petite ($\leq 1,4\%$), l'écart relatif entre $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$ et ρ_{target} varie de façon non monotone de $-0,4\%$ à environ 6% en fonction de Δ .

Lorsque l'évaluation de la masse volumique n'est plus effectuée dans la couche de contrôle, mais dans la couche C→M ($\nu = C \rightarrow M$), les résultats semblent être beaucoup plus satisfaisants (voir Fig. 3.13b). Dans ce cas, le profil de masse volumique $\rho(z)$ est à peu près uniforme dans la couche ν et il est bien contrôlé à la valeur désirée ρ_{target} , quelle que soit la valeur de Δ . Ces observations sont confirmées en regardant la dernière colonne intitulée "deux couches" (couche de contrôle et C→M) dans le tableau 3.2. La position et l'épaisseur de l'interface gaz/liquide ne dépendent presque pas de la période Δ et la masse volumique s'écarte de moins de $0,7\%$ par rapport à la valeur ciblée ρ_{target} .

Il convient de noter que, quand l'évaluation et le contrôle de la masse volumique ont

lieu dans des couches séparées, l'insertion ou le retrait des particules n'influence pas immédiatement la valeur de la masse volumique $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$. En effet, il existe un temps de retard t_D qui correspond au temps nécessaire pour diffuser les informations de la couche de contrôle vers la couche d'évaluation.

Ce temps est lié au coefficient d'auto-diffusion D du fluide et à l'échelle de longueur de la couche de contrôle Δz . En supposant que les particules sont insérées à une distance moyenne $\Delta z/2$ à partir de la couche C→M, une approximation du temps de retard est $t_D = (\Delta z)^2/(4D)$. Sachant que $\Delta z = 13,9$ et $D = 2,5425$ (pour un fluide Lennard-Jones à $\rho = 0,055$ et $T = 1$) [46], on obtient $t_D \simeq 19$ ou $n_D = t_D/\delta t \simeq 3800$ itérations temporelles dans le domaine microscopique. Si $\Delta \ll n_D$ ou $(\Delta \times \delta t \ll t_D)$, l'inhomogénéité et les changements abrupts dans le profil de masse volumique (voir Fig. 3.13b) sont dus au fait qu'une modification soudaine du nombre de particules n'a pas le temps de diffuser de la zone de contrôle vers la couche C→M. Malgré ces profils de masse volumique perturbés dans la couche de contrôle, la valeur moyenne $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$ reste très proche de ρ_{target} et les fluctuations relatives sont négligeables : $\sigma_{\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}} / \langle \rho \rangle_{C \rightarrow M} \leq 1,3\%$.

Des études similaires ont été réalisées pour un problème d'évaporation. Le domaine moléculaire, de hauteur $H_{M,f} = 49,72$, est initialisé à la masse volumique $\rho_{init} = 0,6$ et à une température $T_{init} = T_w = 1$. Le gradient de pression est choisi uniforme, $\partial_x p = -9,86 \times 10^{-5}$, et la vitesse horizontale et la température dans la couche C→M sont contrôlées à $u_{C \rightarrow M} = 0,5288$ et $T_{C \rightarrow M} = T_{init} = 1$. Après l'obtention de l'état stationnaire, la température du mur est augmentée à $T_w = 1,5$ de sorte à ce que le liquide s'évapore au voisinage de la paroi. Cependant, la simulation numérique montre que cette température ne produit pas l'évaporation du liquide. Cela s'explique par le fait que le coefficient d'accommodation thermique entre les atomes de platine et d'argon est très faible. Pour palier ce problème, la température du mur pourrait être augmentée mais nous avons préféré réduire la résistance thermique à l'interface liquide/solide en augmentant le puits du potentiel entre les atomes d'argon et de platine : $\varepsilon_{fw} = 6$.

Les profils de masse volumique dans le domaine moléculaire sont présentés en figure 3.14 pour plusieurs valeurs de Δ correspondant à différentes périodes d'insertion/retrait des particules dans la couche de contrôle. Les résultats présentés sur la figure 3.14a (resp. Fig. 3.14b) sont obtenus pour une évaluation de la masse volumique dans la couche de contrôle (resp. couche C→M). Le tableau 3.3 indique, pour chaque profil, l'ordonnée et la demi-épaisseur de l'interface liquide/gaz, la valeur moyenne de la masse volumique dans la couche C→M, son écart relatif par rapport à la valeur désirée et la dispersion spatiale de la masse volumique dans la couche C→M.

Dans l'ensemble, comme pour le problème de condensation, l'évaluation de la masse volumique moyenne dans la couche C→M donne des résultats plus robustes et très peu dépendants de la valeur Δ . Cependant, quelques remarques additionnelles peuvent être

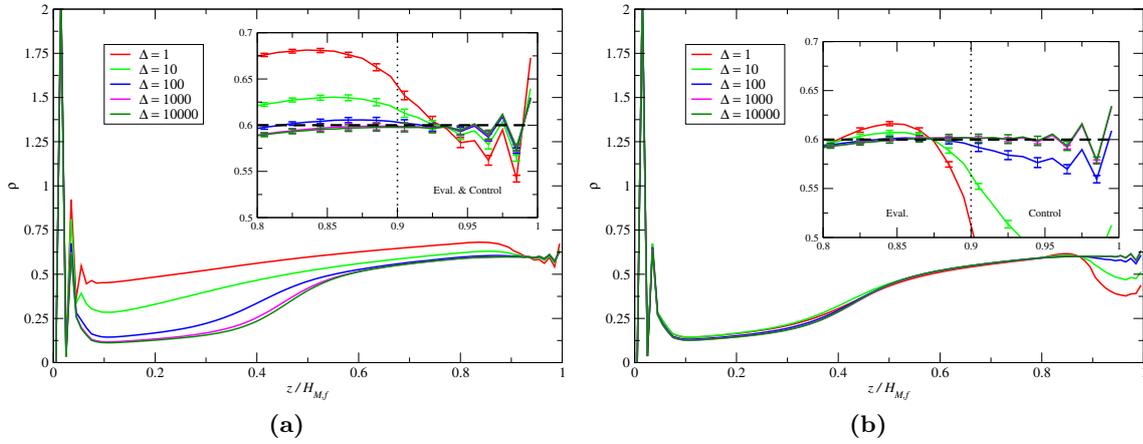


Figure 3.14 : Problème d'évaporation. Même légende que la figure 3.13. Ici, les barres d'erreur représentent des écarts types calculés sur 32 échantillons. Certaines quantités extraites à partir de ces courbes sont données dans le tableau 3.3.

Δ	Interface		masse volumique		
	b	c	$\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$	$\text{diff}_{\rho_{\text{ref}}}$	$\frac{\sigma_{\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}}}{\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}}$
1	0,343	0,378	0,674	12%	1,4%
10	0,330	0,288	0,628	4,4%	0,5%
100	0,414	0,161	0,603	0,7%	0,5%
1000	0,454	0,137	0,596	-0,5%	0,5%
10000	0,463	0,129	0,595	-0,8%	0,5%
$\langle \cdot \rangle$	0,400	0,218	0,619	-	-
$\sigma. / \langle \cdot \rangle$	15%	50%	5%	-	-

(a) une couche (couche de contrôle)

Δ	Interface		masse volumique		
	b	c	$\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$	$\text{diff}_{\rho_{\text{ref}}}$	$\frac{\sigma_{\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}}}{\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}}$
1	0,437	0,167	0,598	-0,3%	3,9%
10	0,428	0,163	0,599	-0,2%	1,7%
100	0,436	0,150	0,599	-0,2%	0,4%
1000	0,439	0,145	0,599	-0,2%	0,5%
10000	0,437	0,142	0,599	-0,2%	0,5%
$\langle \cdot \rangle$	0,435	0,153	0,599	-	-
$\sigma. / \langle \cdot \rangle$	1%	7%	0,1%	-	-

(b) deux couches (couche de contrôle et C \rightarrow M)

Tableau 3.3 : Problème d'évaporation. Même légende que le tableau. 3.2 mais avec l'intervalle d'approximation pour la fonction (cf. Eq. (3.3)) tel que $0,05 \leq z \leq 0,3$.

faites. Quand l'algorithme est appliqué sur une seule couche, il n'y a pas d'interface (voir Fig. 3.14a pour $\Delta = 1$). En regardant avec attention la figure encapsulée 3.14b, nous trouvons que le profil de masse volumique reste constant entre les couches d'évaluation

C→M ($0,8 < z/H_{M,f} < 0,9$) et de contrôle ($0,9 < z/H_{M,f} < 1$) pour des valeurs de $\Delta \geq 1000$. Cette limite inférieure de Δ est légèrement plus petite que $n_D = 7200$, le nombre d'itérations de temps estimé à partir du coefficient d'auto-diffusion. Cet ordre de grandeur est confirmé par l'examen du tableau 3.3 dans lequel l'épaisseur de l'interface c obtenue pour $\Delta = 10000$ dévie de 4,8% par rapport à la solution obtenue avec $\Delta = 100$, puis seulement de 1,8% par rapport à $\Delta = 1000$.

Pour conclure cette section, seul l'algorithme utilisant des couches séparées pour l'évaluation et le contrôle de la masse volumique est réellement efficace pour piloter la masse volumique dans la couche C→M. Les solutions obtenues sont alors peu sensibles à la période Δ entre deux mises à jour successives de la masse volumique. De plus, une bonne valeur indicative de la limite inférieure de Δ peut être donnée par un raisonnement simple basé sur le temps de diffusion construit avec le coefficient d'auto-diffusion du fluide.

3.7 Conclusion

Ce chapitre a permis de détailler l'influence de quelques variables numériques et de les paramétrer pour la suite de l'étude. Nous retiendrons l'utilisation de contraintes linéaires et appliquées dans toutes les directions. La structuration du fluide a été réduite par l'application d'un modèle de force limite. Le point le plus sensible est le poids à donner à la contrainte dynamique par rapport au thermostat. Pour deux configurations, une étude paramétrique a permis de choisir la valeur du paramètre de relaxation de la contrainte dynamique pour des configurations dense et diluée. Enfin, la méthode de contrôle de la masse volumique a été introduite. Comme pour le couplage, elle est basée sur une relaxation de la valeur entre deux zones, une d'évaluation et l'autre de contrôle.

En parallèle, un modèle hybride analytique a été introduit. Les résultats issus de ce modèle permettent notamment de tester la convergence de la méthode de couplage. Comme on pourra le voir dans le chapitre suivant, le modèle analytique peut également être utilisé afin d'initialiser intelligemment la solution hybride.

Chapitre 4

Simulations hybrides sur un unique "plot" moléculaire

Sommaire

4.1	Écoulements de Couette transitoires	82
4.2	Transfert thermique transitoire	87
4.3	Écoulements de Poiseuille	90
4.4	Écoulements avec changement de phase	94
4.5	Conclusion	98

Rappelons que l'objectif principal de cette thèse est d'étudier des micro-conduites de grand rapport de forme $L/H \gg 1$. La méthode multi-échelle adoptée repose sur une discrétisation des parois en "plots" de dynamique moléculaire (surfaces grisées sur la Fig. 4.1). La connexion entre les plots et le cœur de l'écoulement (surface hachurée bleue) est effectuée grâce à la méthode hybride, dont la théorie a été présentée dans les chapitres précédents. Dans ce chapitre, à des fins de validation de la méthode, une seule tranche en rouge est considérée. L'écoulement est alors considéré établi dans la direction x .

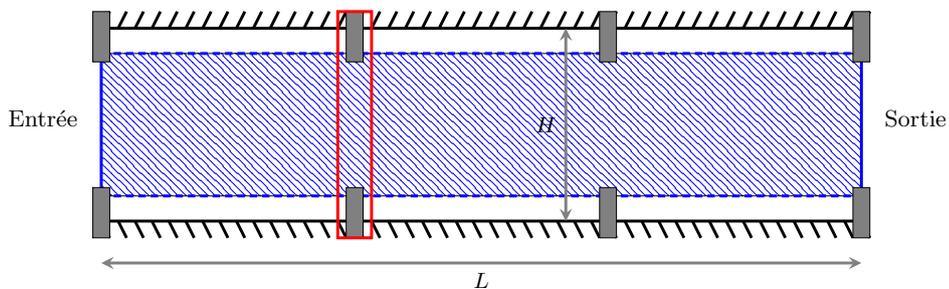


Figure 4.1 : Schéma de la conduite étudiée. Le cœur de l'écoulement (partie bleue) est gouverné par les équations de Navier-Stokes et de l'énergie. Des descriptions atomistiques sont utilisées pour modéliser le mur et le fluide adjacent (plots rectangulaires en gris).

La méthode de couplage et son implémentation sont d'abord validées sur des problèmes classiques 1D possédant des solutions analytiques : les problèmes transitoires de Couette (partie dynamique), de diffusion thermique ainsi que l'écoulement de Poiseuille entre deux plaques planes. Ce chapitre est terminé par l'illustration et la validation de la méthode pour des problèmes avec changement de phase.

4.1 Écoulements de Couette transitoires

L'implémentation de la méthode hybride est testée sur le problème transitoire de Couette. Ce cas permet de valider à la fois le couplage spatial et l'algorithme temporel. Ce cas classique, possédant une solution analytique mono-dimensionnelle transitoire, est souvent utilisé [11, 50, 63, 75, 78]. La figure 4.2 présente la configuration de Couette plan instationnaire : initialement, la vitesse moyenne du fluide est nulle partout. Pour des temps $t > 0$, la paroi supérieure est animée d'une vitesse horizontale constante $u = u_0$, tandis que la paroi inférieure est maintenue immobile.

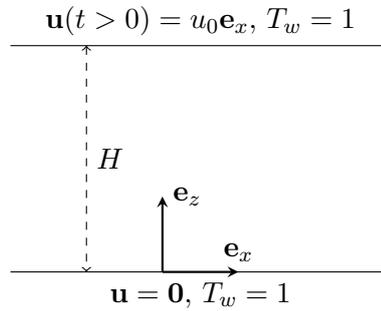


Figure 4.2 : Configuration utilisée pour le problème de Couette transitoire

La solution à l'instant t est obtenue en résolvant les équations de Navier-Stokes isothermes incompressibles avec des conditions d'adhérence aux parois pour un canal de hauteur H . Une démonstration de la solution peut être consultée dans [11]. Afin de pouvoir être comparée à des solutions hybrides qui mettent en jeu des moyennes temporelles lors de l'évaluation des quantités macroscopiques, la solution analytique est également moyennée sur l'intervalle de temps $[\tau_1; \tau_2]$. Il vient :

$$\frac{u(z, \tau_2 - \tau_1)}{u_0} = \frac{1}{\tau_2 - \tau_1} \int_{\tau_1}^{\tau_2} \left(\frac{z}{H} + \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} \sin\left(\frac{k\pi z}{H}\right) \exp\left(-\frac{\mu k^2 \pi^2 t}{\rho H^2}\right) \right) dt \quad (4.1)$$

où le terme dans l'intégrale est la solution instantanée. Cette solution moyenne est dans la suite comparée à des simulations hybrides en phase liquide ou gazeuse.

4.1.1 Écoulement liquide

Les sous domaines moléculaire et continu ont la même hauteur fluide, $H_C = H_{M,f} = 119,695$, ce qui conduit à une hauteur entre les deux plaques planes $H = H_C + H_{M,f} - H_O = 191,512$, avec une zone de recouvrement $H_O = 40\% H_{M,f}$. Les dimensions transverses du domaine moléculaire sont $L_x \times L_y = 9,8763 \times 9,775$. Au total, la simulation de dynamique moléculaire possède $N = 9360$ molécules d'argon, la masse volumique est alors $\rho = 0,81$, ce qui décrit une phase liquide (voir le diagramme de phase, Fig. 2.2, page 44). Les coefficients macroscopiques évalués à $T = 1$ sont $\mu = 2,136$, $\lambda = 6,721$ et $c_p = 2,402$. Le rayon de coupure est celui classiquement utilisé dans la littérature, soit $r_c = 2,5$. On rappelle que le schéma Leapfrog est utilisé pour l'intégration temporelle avec un pas de temps microscopique $\delta t = 5 \times 10^{-3}$. Les conditions aux limites sont périodiques dans les directions x et y ce qui implique que le flux de masse à travers une section horizontale est nul. Le couplage est alors seulement monodimensionnel dans la direction z . Ce dernier aspect est justifié pour l'étude des différents problèmes de Couette, de diffusion thermique et de Poiseuille puisque la solution est monodimensionnelle. En revanche, dans des situations plus complexes, cette hypothèse sera discutée. Les paramètres de simulation pour ce problème sont résumés dans le tableau 4.1.

Domaine moléculaire		Domaine continu	
Paramètre	Valeur	Paramètre	Valeur
ρ	0,81	μ	2,136
N	9360	λ	6,721
$L_x \times L_y$	$9,8763 \times 9,775$	c_p	2,402
$H_{M,f}$	119,695	H_C	119,695
δt	5×10^{-3}	Δt	$150 \delta t$
r_c	2,5	-	-

Tableau 4.1 : Paramètres de simulation pour le problème de Couette transitoire en phase liquide.

Le domaine continu est résolu par la méthode des volumes finis. Pour ce cas de validation, il est recouvert par un maillage structuré ou non-structuré. Pour le maillage structuré, le domaine continu est discrétisé en 10 mailles dans la direction verticale, où les 4 mailles inférieures constituent la zone de recouvrement. C'est un cas particulier où les sous domaines constituant la zone de recouvrement correspondent au maillage de la zone continue. Dans ce travail, les maillages non-structurés sont également utilisés et générés à partir de triangulations de Delaunay basées sur les discrétisations horizontales et verticales de la peau du domaine continu en respectivement 8 et 40 segments uniformes.

Les conditions aux limites sur la frontière inférieure du domaine continu sont uniformes et reconstruites à partir des grandeurs moyennées dans le domaine microscopique (cf. Eqs. (2.13) et (2.14), page 47). Le rapport des pas de temps entre le continu et le

moléculaire est $q = 150$. Les variables macroscopiques issues du domaine de dynamique moléculaire sont calculées selon la définition de la moyenne présentée en équation (1.23) (page 18), pour 10 sous-domaines horizontaux de hauteur $H_{M,f}/10$, au cours d'un pas de temps macroscopique $\Delta t = q\delta t$ ($N_T = q$) et pour l'ensemble des échantillons ($N_E = 40$).

Pour limiter le glissement de la vitesse et le saut de la température à l'interface fluide/solide, la modélisation atomique du mur est substituée par une modélisation stochastique.

Après la mise à l'équilibre du système à la température des parois, la paroi supérieure (limite supérieure du domaine macroscopique) est animée d'une vitesse constante horizontale $u_0 = 1$, tandis que la paroi inférieure (limite inférieure du domaine moléculaire) est maintenue immobile. Les données entre les deux approches sont échangées tous les pas de temps macroscopiques selon l'algorithme schématisé sur la figure 2.8 (page 55).

Notons que pour limiter les coûts des calculs, les paramètres choisis correspondent à des situations physiques difficilement réalisables d'un point de vue expérimental. Travailler avec des conditions physiquement admissibles nécessiterait de calculer des moyennes en dynamique moléculaire sur un plus grand nombre de réalisations, ce qui augmenterait simplement le temps des simulations microscopiques, mais pas le principe du couplage hybride.

Afin de maintenir constants les coefficients macroscopiques dans les deux domaines continu et moléculaire, et de limiter dans le domaine moléculaire la production d'énergie thermique due à la dissipation visqueuse, la température dans l'ensemble du système est contrôlée à la température de la paroi T_w à laquelle les coefficients μ , λ et c_p sont évalués. Pour ce faire, la température d'échange est imposée telle que $T_{C \rightarrow M} = T_w$.

Pour un maillage structuré de la zone continue, la figure 4.3 présente la vitesse horizontale normalisée par u_0 en fonction de la hauteur normalisée z/H pour différents intervalles de temps ($\tau_1 - \tau_2$), ainsi que l'évolution temporelle de la condition à la limite $u_{M \rightarrow C}$ issue du domaine moléculaire au cours du temps.

La solution moléculaire est représentée avec des symboles creux et les barres d'erreur donnent l'écart type de la moyenne spatio-temporelle sur l'ensemble des échantillons (voir Fig. 4.3a). Les symboles pleins se réfèrent à la solution continue tandis que les courbes représentent la solution analytique donnée par l'équation (4.1).

Pour les différents intervalles de temps observés, les solutions hybrides se superposent aux solutions analytiques. L'écart relatif entre les deux solutions est inférieur à 1% en norme L_2 . En détail, cet écart est déterminé entre les solutions hybride (moléculaire et continue)

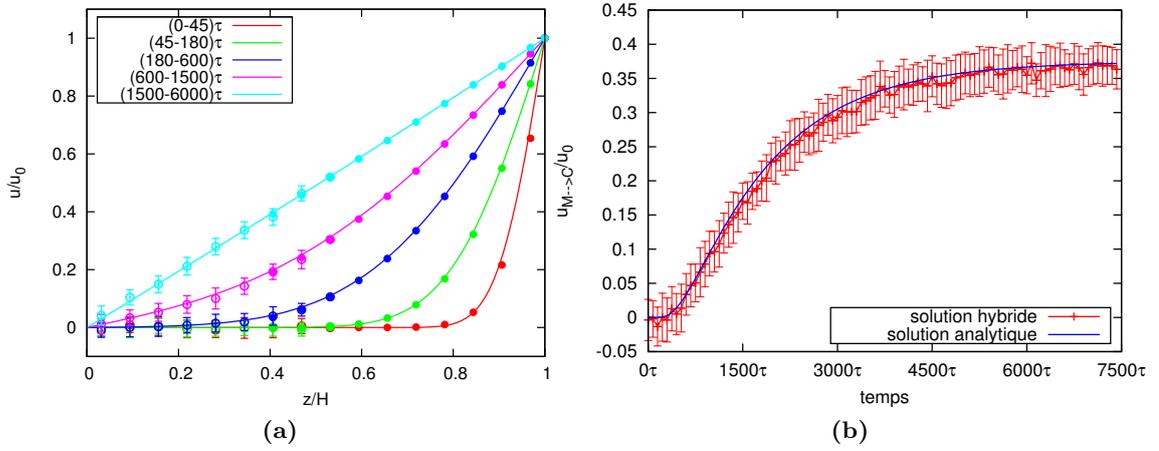


Figure 4.3 : (a) Profil de vitesse $u(z/H)/u_0$ pour différents instants pour un maillage structuré. Les lignes correspondent aux solutions analytiques, les symboles pleins aux solutions continues et les symboles creux aux solutions moléculaires avec des barres d'erreur représentatives des écarts types par rapport à la moyenne des $N_E = 40$ échantillons. (b) Évolution temporelle de $u_{M \rightarrow C}/u_0$ pour la solution hybride (courbe avec les barres d'erreurs) et pour la solution analytique.

et analytique dans tout le domaine. Il est défini par :

$$err_{L2} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N_z} (u_n(z_i) - u(z_i))^2}{\sum_{i=1}^{N_z} u(z_i)^2}} \quad (4.2)$$

où $u(z_i) = u(z_i, \tau_2 - \tau_1)$ et $u_n(z_i)$ sont respectivement les vitesses analytique et issue de la solution hybride, calculées au point z_i et moyennées sur l'intervalle $[\tau_1; \tau_2]$. Dans le domaine continu, u_n correspond à la valeur au nœud d'ordonnée z_i . Dans le domaine moléculaire, $u_n(z_i) = \langle \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{e}_x \rangle(z_i)$ est une moyenne dans chacun des sous-domaines d'épaisseurs $H_{M,f}/10$, centré sur z_i .

L'écart est essentiellement dû au calcul des grandeurs macroscopiques issues du domaine moléculaire. Il pourrait être réduit en améliorant la qualité des moyennes dans le domaine moléculaire. Ceci peut être réalisé, soit en augmentant le nombre d'échantillons N_E , soit en augmentant la taille du domaine de simulation dans une (ou les deux) direction(s) tangentielle(s) aux parois, ce qui a pour conséquence d'augmenter le nombre d'atomes dans le domaine de simulation. On peut noter que ces deux méthodes augmenteront le coût de la simulation hybride. Lors de problèmes transitoires, il est plus difficile d'améliorer le calcul des moyennes en augmentant le nombre d'itérations temporelles sur lesquelles elles sont effectuées puisque cela change également l'intervalle d'observation $[\tau_1; \tau_2]$ de la solution.

L'efficacité de l'algorithme de couplage est également visible dans la zone de recouvrement ($z/H \in [0, 375; 0, 5625]$) où les solutions obtenues par les deux approches sont très proches.

Est également tracée (voir Fig. 4.3b) l'évolution de la vitesse moyenne temporelle des atomes dans la zone d'échange $M \rightarrow C$ au cours du temps. L'évolution de la vitesse analytique obtenue par la solution de l'équation (4.1) au centre de la couche $M \rightarrow C$ est superposée aux résultats hybrides. Les deux solutions sont elles aussi en bon accord.

Ce travail est également mené pour un maillage non-structuré de la zone continue. Les résultats (voir Fig. 4.4) et conclusions sont similaires à ceux obtenus pour des maillages structurés et réguliers.

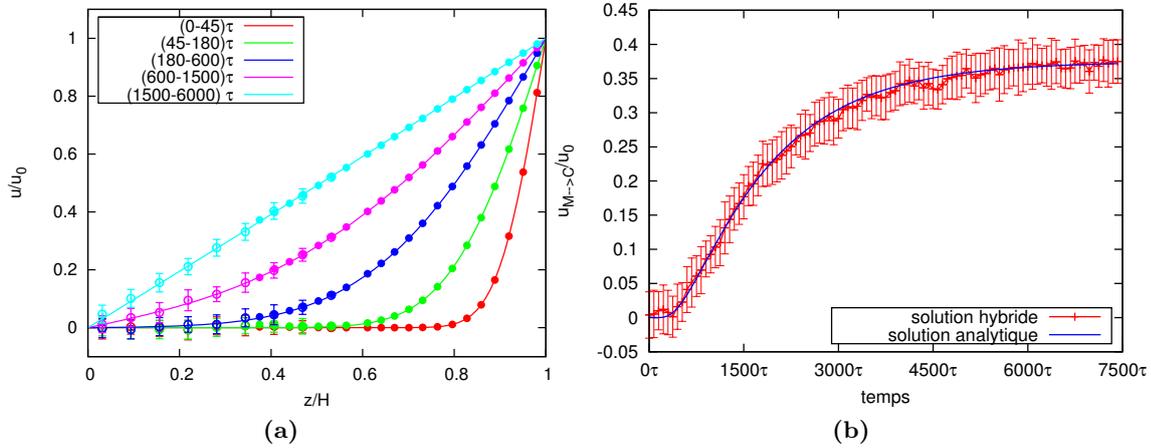


Figure 4.4 : Similaire à la figure 4.3 pour un maillage non structuré.

Bien que leur utilisation ne soit pas des plus pertinentes dans cette configuration, la généralisation de la méthode hybride à des maillages non-structurés ouvre la voie à l'étude de géométries complexes.

4.1.2 Écoulement gazeux

Dans cette section, l'écoulement de Couette est toujours considéré, mais pour une phase gazeuse. Dans ce cas, les deux parois sont maintenues à une température constante $T_w = 1, 25$. Les hauteurs du domaine moléculaire ($z \in [0; H_{M,f}/H]$) et continu sont identiques, $H_{M,f} = H_C = 139, 21$, ce qui conduit à une hauteur $H = H_C + H_{M,f} - H_O = 222, 74$. Le domaine moléculaire possède $N = 672$ molécules d'argon en phase gazeuse, tel que la masse volumique $\rho = 0, 05$ est constante. Les coefficients macroscopiques évalués à $T = 1, 25$ sont $\mu = 0, 15$, $\lambda = 0, 62$ et $c_p = 1, 63$. Le rapport de pas de temps est $q = \Delta t/\delta t = 400$. Tous ces paramètres sont résumés dans le tableau 4.2.

Les profils de vitesse et l'évolution temporelle de la vitesse moyenne des particules dans la zone d'échange $M \rightarrow C$ au cours du temps sont présentés respectivement en figure 4.5a

Domaine moléculaire		Domaine continu	
Paramètre	Valeur	Paramètre	Valeur
ρ	0,05	μ	0,15
N	672	λ	0,62
$L_x \times L_y$	$9,8763 \times 9,775$	c_p	1,63
$H_{M,f}$	139,21	H_C	139,21
δt	5×10^{-3}	Δt	$400 \delta t$
r_c	2,5	$N_x \times N_z$	10×10

Tableau 4.2 : Paramètres de simulation pour le gaz qui sont utilisées pour étudier le cas de Couette.

et 4.5b. Pour ce cas, les variables macroscopiques issues du domaine moléculaire sont

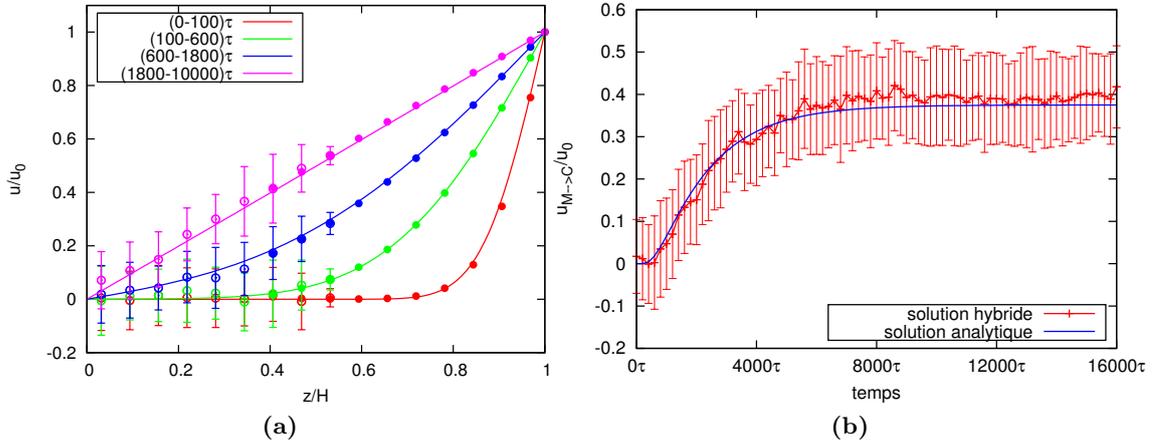


Figure 4.5 : Similaire à la figure 4.3 pour la configuration gazeuse

moyennées sur 64 échantillons. Les conclusions sont les mêmes que pour la partie liquide.

Ce cas de validation nous a donc permis de vérifier la pertinence de notre méthode de couplage dans un cas de diffusion transitoire de quantité de mouvement, pour des états liquide et gazeux. Nous allons maintenant utiliser cette méthode hybride pour traiter un problème de transfert de chaleur.

4.2 Transfert thermique transitoire

La méthode de couplage est maintenant appliquée à un cas de diffusion thermique transitoire. À notre connaissance, ce problème n'a été traité que dans les travaux de [41, 63]. La configuration géométrique du problème est similaire à celle utilisée dans le problème de Couette. Les parois sont ici maintenues immobiles. La figure 4.6 illustre la configuration du

problème. Après la mise à l'équilibre du système à la température $T = 1$, la température

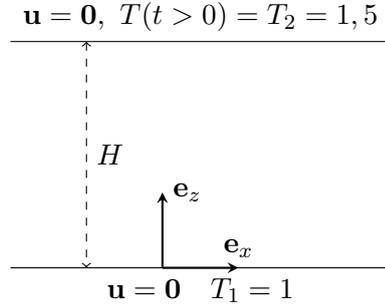


Figure 4.6 : Configuration utilisée pour le problème de diffusion thermique.

de la paroi supérieure est portée à $T_2 = 1,5$ tandis que la paroi inférieure reste à $T_1 = 1$.

De façon analogue au problème dynamique, la vitesse moyenne dans la zone C→M est contrainte à zéro tout au long de la simulation en imposant $u_{C \rightarrow M} = 0$. Les coefficients macroscopiques sont évalués à la température intermédiaire $(T_1 + T_2)/2$.

L'expression de la solution analytique est similaire à celle de l'équation (4.1), à condition que la vitesse moyenne réduite soit substituée par $[T(z, \tau_2 - \tau_1) - T_1]/(T_2 - T_1)$ et μ/ρ par $\lambda/\rho c_p$. La solution analytique moyennée sur l'intervalle $[\tau_1; \tau_2]$ pour le problème de diffusion thermique est donc donnée par :

$$\frac{T(z, \tau_2 - \tau_1) - T_1}{T_2 - T_1} = \frac{1}{\tau_2 - \tau_1} \int_{\tau_1}^{\tau_2} \left(\frac{z}{H} + \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k} \sin\left(\frac{k\pi z}{H}\right) \exp\left(-\frac{\lambda k^2 \pi^2 t}{\rho c_p H^2}\right) \right) dt \quad (4.3)$$

4.2.1 Situation liquide

Pour traiter le cas de transfert thermique, nous avons utilisé les mêmes conditions thermodynamiques que pour l'écoulement de Couette dans le cas liquide. Les paramètres de simulation pour ce cas sont résumés dans le tableau 4.1, le maillage est non-structuré.

De la même façon que le problème de Couette, les températures hybride et analytique réduites $T(z)/T_1$ sont montrées dans la figure 4.7a en fonction de la hauteur z/H , et pour différents intervalles de temps $[\tau_1 - \tau_2]$. Le profil de température et l'évolution temporelle de la température moyenne des particules dans la zone d'échange M→C, au cours du temps, est présentée en figures 4.7b. Pour ce cas, les variables macroscopiques issues du domaines moléculaire sont moyennées sur 40 échantillons. Les conclusions sont similaires à celles dressées pour le problème de Couette en phase liquide. Ce travail a également été effectué (non présenté) pour un maillage structuré de la zone continue. Les résultats et conclusions sont similaires à ceux obtenus pour des maillages non-structurés.

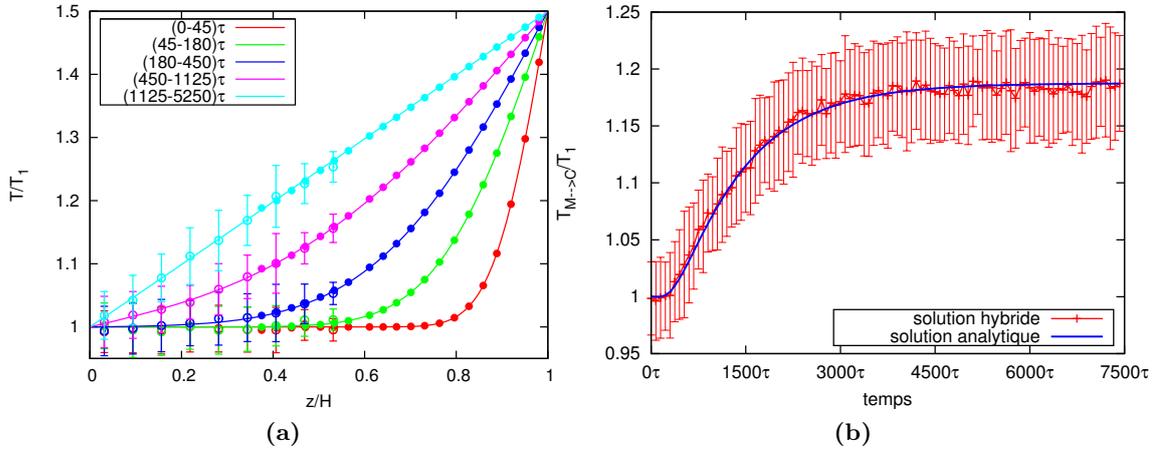


Figure 4.7 : (a) Profil de température $T(z)/T_1$ à différents instants pour un maillage non-structuré. Les lignes correspondent aux solutions analytiques, les symboles pleins aux solutions continues et les symboles creux aux solutions moléculaires avec des barres d'erreur représentatives des écarts types par rapport à la moyenne des $N_E = 40$ échantillons. (b) Évolution temporelle de $T_{M \rightarrow C}$ pour la solution hybride (courbe avec les barres d'erreur) et pour la solution analytique.

4.2.2 Situation gazeuse

Les paramètres de simulation pour le gaz sont résumés dans le tableau 4.2. Pour ce cas, les solutions sont illustrées avec un maillage structuré. Les variables macroscopiques issues du domaine moléculaire sont calculées sur 64 échantillons. Les conclusions et les remarques sont similaires à celles dressées pour le problème de Conduction en phase liquide. Les profils et l'évaluation de la condition d'échange sont montrés en figure 4.8. Comme pour les

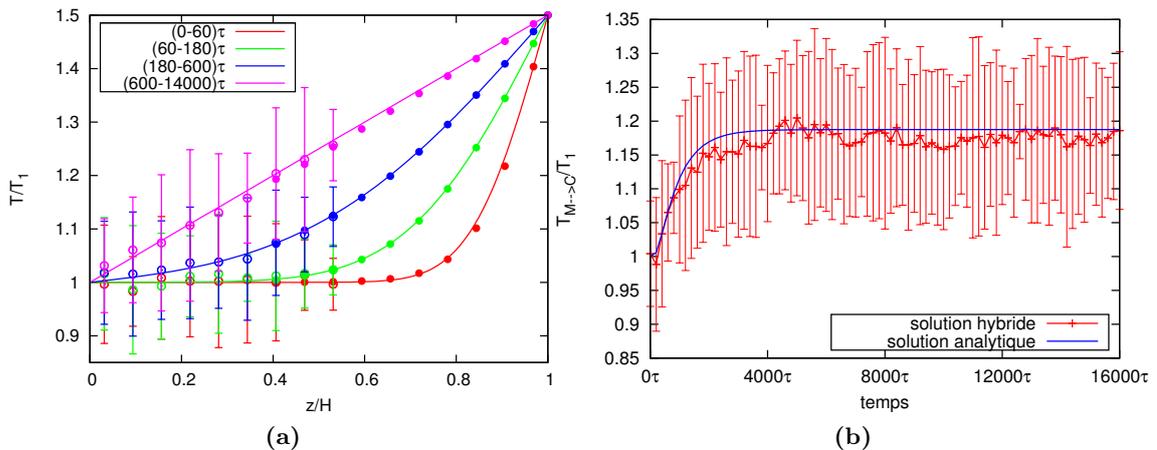


Figure 4.8 : (a) Similaire à la figure 4.7 pour le gaz et pour un maillage structuré

cas précédents, un bon accord général entre les solutions hybride et analytique est obtenu.

Soulignons que le couplage présenté dans ces paragraphes a permis de valider individuellement l'imposition de contraintes dynamique ou thermique. En effet, pour le problème dynamique, la température $T_{C \rightarrow M}$ dans la zone d'échange est fixée et réciproquement, la vitesse échangée $u_{C \rightarrow M}$ est maintenue nulle pour le problème thermique. Dans les paragraphes suivants, elles seront appliquées simultanément.

4.3 Écoulements de Poiseuille

Dans cette section, on étudie l'écoulement de Poiseuille entre deux plaques planes. La configuration est illustrée en figure 4.9 : les deux parois sont immobiles et leurs températures sont fixées à $T = 1, 1$. Contrairement à l'écoulement de Couette, le fluide est entraîné par

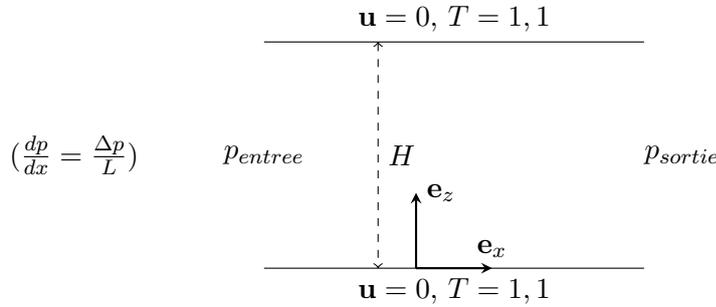


Figure 4.9 : Configuration utilisée pour l'écoulement de Poiseuille plan.

une différence de pression Δp entre l'entrée et la sortie. On suppose que l'écoulement est stationnaire, dynamiquement et thermiquement établi dans la direction x . Les solutions analytiques sont données par les équations suivantes pour la vitesse et température :

$$\begin{aligned} u(z) &= \frac{4zu_{max}}{H} \left(1 - \frac{z}{H}\right) \\ T(z) &= T_w + \frac{\mu u_{max}^2}{3\lambda} \left[1 - \left(1 - \frac{2z}{H}\right)^4\right] \end{aligned} \quad (4.4)$$

avec $u_{max} = -(H^2/8\mu)(dp/dx)$ la vitesse maximale et H l'espacement entre les deux plaques.

En parallèle de la validation de la méthode, cette section a pour but de tester la convergence de la méthode hybride. Pour ce faire, nous avons étudié l'établissement des profils de vitesse et de température en régime stationnaire. Rappelons que, pour l'écoulement stationnaire, le couplage entre les approches microscopique et macroscopique est toujours itératif, mais sans synchronisation temporelle. Le pas de temps de la simulation macroscopique est très grand devant le pas de temps microscopique (voir Fig. 2.8, page 55). En pratique un solveur stationnaire est utilisé pour résoudre les équations de Navier-Stokes in-

compressibles et de l'énergie avec le terme de dissipation visqueuse. L'état stationnaire est atteint lorsque les informations échangées entre les deux approches dans les zones $M \rightarrow C$ et $C \rightarrow M$ ne varient plus au cours des itérations. Le critère est défini dans la section 3.1 (cf. Eq. (3.1), page 61).

Comme nous l'avons déjà mentionné (cf. Sec. 3.1, page 59), la simulation hybride exige une initialisation cohérente de la solution, à la fois dans le domaine moléculaire et dans le domaine continu. L'initialisation est facilement réalisée dans le domaine continu ; une plus grande attention doit être portée au domaine moléculaire. En considérant deux façons d'initialiser le système moléculaire, le processus itératif de la méthode de couplage est examiné. Dans la région moléculaire, la solution initiale est :

1. soit isotherme et au repos, c'est-à-dire à vitesse nulle avec la température contrôlée à la valeur désirée après une thermalisation.
2. soit issue de profils de vitesse et de température plus complexes provenant de la solution du *modèle hybride analytique* présenté dans la section 3.1.

En considérant que l'écoulement est symétrique, la configuration simulée est très similaire à celle de la figure 2.3a (page 45) : la paroi supérieure est substituée par un axe de symétrie. L'écoulement est établi et généré par une différence de pression Δp appliquée via les conditions aux limites d'entrée et de sortie du domaine continu (voir Fig. 4.9).

Pour échanger le gradient de pression $(\partial_x p)_K \approx (\partial_x p)(\mathbf{x}_K)$ (voir Fig. 2.5, page 48, pour la notation) du domaine continu vers moléculaire, une force externe $\mathbf{F}_{\text{ext}} = (-m_i/\rho (\partial_x p)_K; 0; 0)^T$ est ajoutée à l'équation du mouvement (1.1) et appliquée sur toutes les molécules, sauf celles comprises dans la couche $C \rightarrow M$ où la vitesse et la température sont contrôlées.

Les caractéristiques de cette simulation sont les suivantes : les deux domaines moléculaire et continu ont la même hauteur $H_C = H_{M,f} = 99,439$. Les dimensions transverses du domaine moléculaire sont $L_x \times L_y = 9,8763 \times 9,775$. La zone de recouvrement est de hauteur $H_O = 39,7756$ dans la direction z . La demi-hauteur totale du canal de fluide est alors $H = H_C + H_{M,f} - H_O = 159,1$. La simulation de dynamique moléculaire possède $N = 7776$ molécules d'argon. La masse volumique est $\rho = 0,81$. Pour avoir une vitesse maximale $u_0 = u_{\text{max}} = 1$ dans le plan de symétrie du canal, le gradient de pression est imposé à $\partial_x p = -3,11 \times 10^{-6}$. Le domaine continu est recouvert localement par un maillage structuré et divisé en $N_x \times N_z = 10 \times 10$ cellules carrées. Les coefficients de transport macroscopiques évalués à $T = T_w = 1,1$ sont $\mu = 2,073$, $\lambda = 6,832$ et $c_p = 2,375$.

4.3.1 Initialisation : repos isotherme

Nous avons illustré le processus itératif de la méthode hybride lorsque la solution initiale moléculaire est isotherme au repos. En prenant une vitesse nulle ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$) et une température $T = 1, 1$ comme conditions initiales au niveau macroscopique, les champs de vitesse et de température discrets à la première itération \mathbf{u}^1 et T^1 sont les solutions des équations de Navier-Stokes incompressibles et de l'énergie écrites sous leur forme stationnaire. L'équation du mouvement (1.1) est alors intégrée dans le domaine moléculaire pour la période de $q\delta t$ avec les valeurs imposées $\mathbf{u}_{C \rightarrow M}^1$ et $T_{C \rightarrow M}^1$ dans la couche $C \rightarrow M$. Enfin, les nouvelles conditions aux limites de l'approche macroscopique à la deuxième itération sont mises-à-jour. La convergence de ce processus étant itérative, l'état stationnaire est recherché.

La figure 4.10 montre la procédure itérative de la convergence de la méthode hybride. Les évolutions au cours des itérations de couplage des profils de vitesse et de température

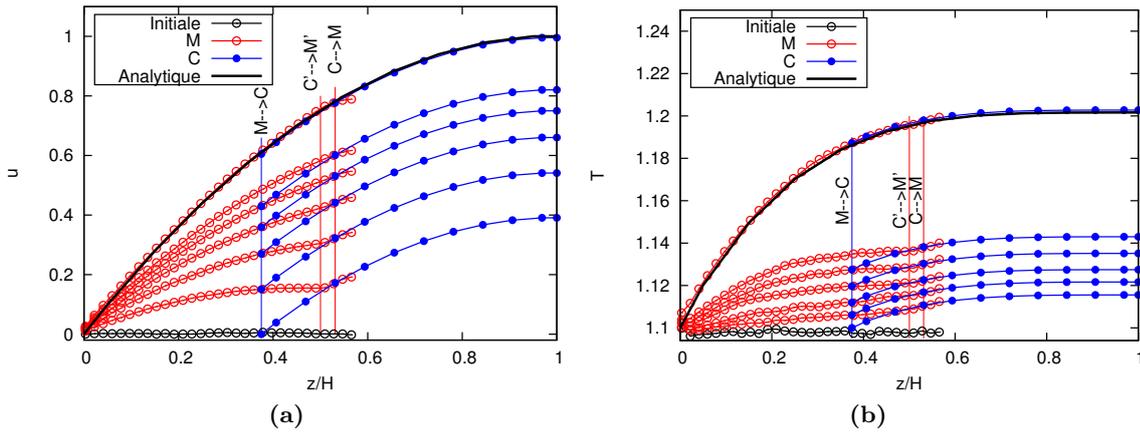


Figure 4.10 : Convergence itérative de l'algorithme de couplage pour la méthode hybride développée lorsque la solution initiale est isotherme au repos (a) Profil de vitesse. (b) Profil de température. Les 5 premières et la dernière itération sont seulement présentées. Les symboles représentent la solution hybride (rouge pour le moléculaire et bleu pour le continu). Les symboles noirs présentent la solution initiale du domaine moléculaire. La ligne continue en noir correspond à la solution analytique.

sont montrées en figure 4.10a et 4.10b. Les axes sont en unité réduite. Avec les mêmes conventions que précédemment, les symboles correspondent à la solution hybride tandis que les lignes continues représentent les solutions analytiques. Les solutions analytiques sont ici obtenues en utilisant l'équation (4.4) adaptée à la demie-hauteur du canal. On peut vérifier que les solutions hybrides issues des deux modélisations coïncident dans la zone de recouvrement. Les champs de la vitesse et de la température entre la solution hybride et la solution analytique sont en bon accord une fois la solution stationnaire atteinte.

Les évolutions de la vitesse et de la température échangées dans la zone $M \rightarrow C$ sont

également présentées en figure 4.11. Ces résultats montrent qu'il faut approximativement

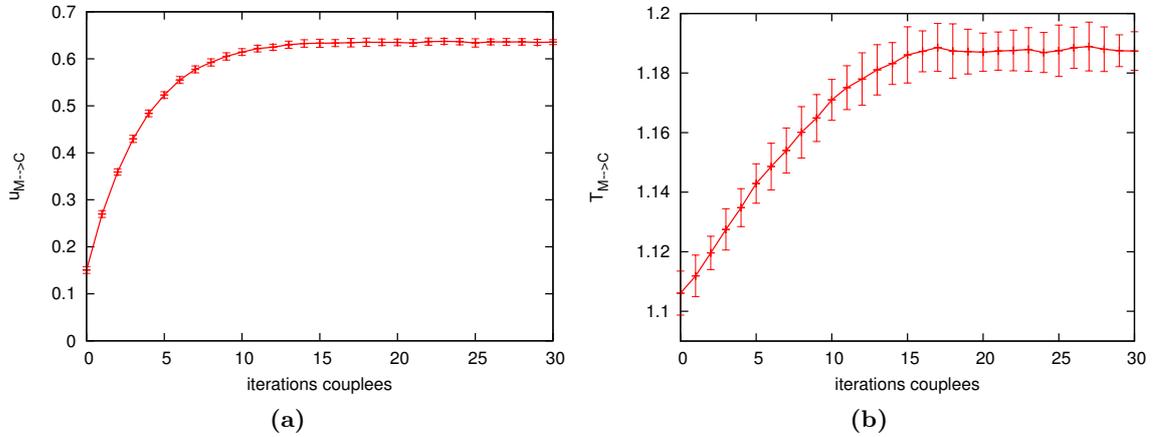


Figure 4.11 : Évolutions de la vitesse (a) et de la température (b) obtenues par la solution hybride dans la sous couche d'échange $M \rightarrow C$, au cours des itérations pour le problème de Poiseuille lorsque la solution initiale est isotherme au repos.

20 itérations pour faire converger la méthode hybride en partant d'une solution initiale isotherme au repos.

4.3.2 Initialisation avec la solution hybride analytique

Pour améliorer la vitesse de convergence vers la solution stationnaire, nous nous intéressons maintenant à des solutions initiales de vitesse et de température au niveau moléculaire plus complexes. Elles sont issues du modèle hybride analytique dans lequel l'écoulement de Poiseuille est utilisé pour la partie dynamique (voir Fig. 3.2, Sec. 3.1, page 59). Ce profil de vitesse permet également de tenir compte de la contribution du terme de production par frottement de l'équation de conservation de l'énergie. Dans ce cas, le profil de température obtenu est polynomial d'ordre 4. Les paramètres de simulation et le schéma de couplage utilisés restent identiques.

Afin d'initialiser, le domaine moléculaire est divisé en 10 sous-domaines dans la direction z dans lesquels le mouvement des particules est intégré avec une contrainte dynamique (cf. Eq. (2.15)) et un thermostat de Langevin (cf. Eq. (2.16)) dont les valeurs par sous domaines sont issues du modèle hybride analytique. Dès que la vitesse et la température initiales sont imposées aux niveaux moléculaire et continu, le processus itératif de la méthode hybride est démarré.

La figure 4.12 montre la procédure itérative de la convergence de la méthode hybride complète. La figure 4.12a montre le profil de vitesse tandis que la figure 4.12c présente le profil des températures en fonction de l'itération de couplage. Les évolutions temporelles de la vitesse et de la température dans la zone d'échange $M \rightarrow C$ sont présentées en figures 4.12b

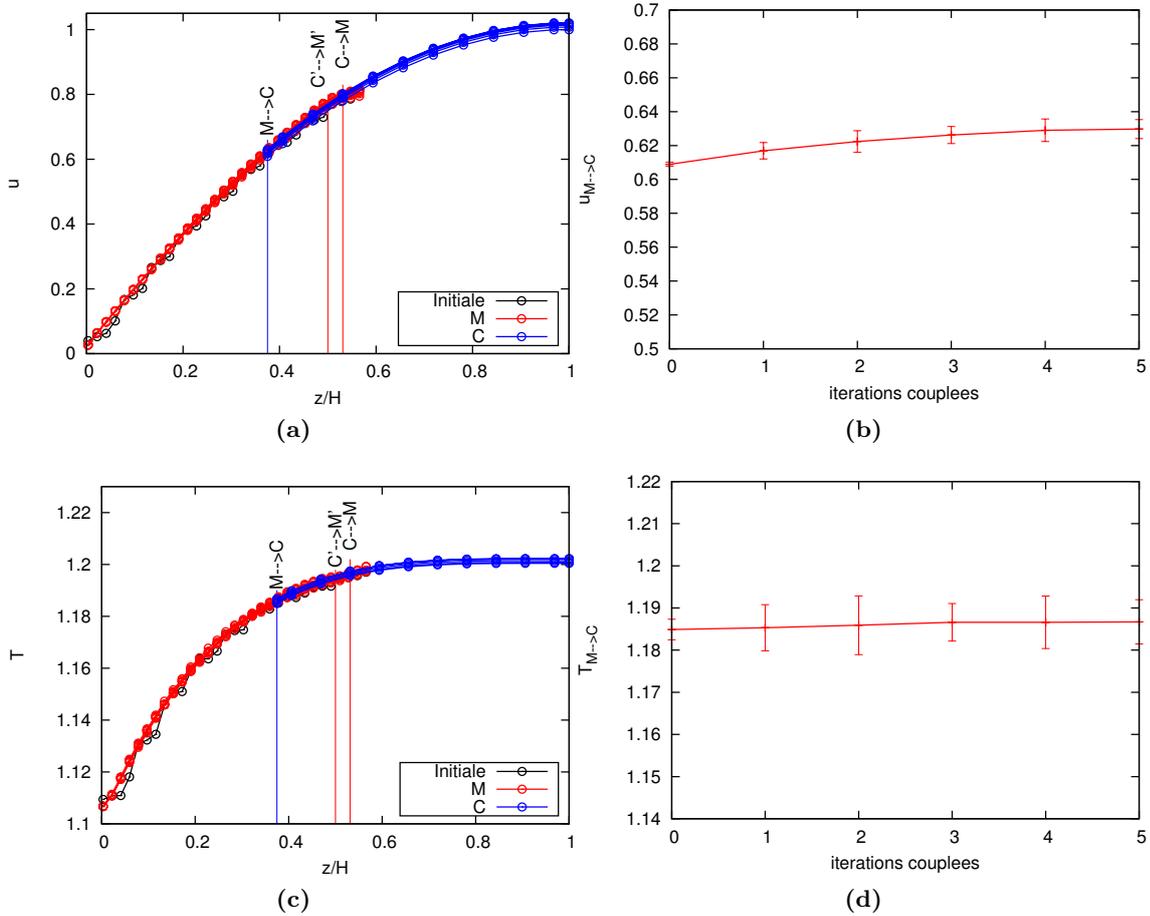


Figure 4.12 : Convergence itérative de l'algorithme de couplage pour la méthode hybride pour $H_{M,f}/H_C = 1$ lorsque la solution est utilisée avec la solution hybride analytique. Les profils de vitesse et de température sont respectivement donnés en Figs. (a) et (c), tandis que les évolutions des valeurs échangées sont montrées en Figs. (b) et (d)

et 4.12d. On constate qu'on a besoin d'environ 5 itérations pour que la solution couplée soit convergée, ce qui réduit le temps de calcul d'un facteur 4 par rapport à une initialisation du fluide au repos à température constante. Notons que le nombre d'itérations couplées est lié à la hauteur du domaine moléculaire.

4.4 Écoulements avec changement de phase

L'objectif principal de cette section est d'étendre la méthode hybride développée précédemment à une situation où le fluide circulant dans la conduite en phase gazeuse (liquide) se condense (s'évapore) au voisinage des parois. La méthode de contrôle de la masse volumique est alors nécessaire.

4.4.1 Condensation

Dans un premier temps, le cas de condensation est examiné. Pour ce faire, nous avons utilisé la configuration illustrée en figure 2.3a (page 45) en remplaçant le mur à la limite supérieure du domaine continu par un axe de symétrie. La conduite est alors modélisée sur une demi-hauteur H . De plus, l'écoulement est supposé invariant dans la direction x (solution établie).

Les caractéristiques de cette simulation sont les suivantes : le rapport des hauteurs est $H_C/H_{M,f} = 2,45$. La hauteur du domaine moléculaire est $H_{M,f} = 139,21$ et la hauteur du domaine continu est $H_C = 341,08$, ce qui conduit à une hauteur $H = H_C + H_{M,f} - H_O = 424,6$ avec une zone de recouvrement $H_O = 55,684$. Les dimensions transverses du plot moléculaire sont $L_x \times L_y = 9,8763 \times 9,775$. La masse volumique initiale du système est $\rho = 0,05$. Le domaine moléculaire est donc composé initialement de $N = 1512$ atomes, dont $N = 672$ d'argon et 840 de platine utilisés pour décrire la paroi. Le domaine continu est recouvert localement par un maillage structuré qui est divisé en $N_x \times N_z = 20 \times 20$ cellules carrées. Les coefficients macroscopiques évalués à $T = 1,25$ sont $\mu = 0,15$, $\lambda = 0,62$ et $c_p = 1,63$.

Après une période de 200000 pas de temps microscopiques, l'état d'équilibre du système pour une température de paroi $T_w = 1,1$ (132 K) est atteint. Une *période d'établissement* pour obtenir l'écoulement de Poiseuille monophasique est alors commencée. Pendant cette dernière, la vitesse maximale de l'écoulement est fixée à $u_0 = 2$ en imposant le gradient de pression $\partial_x p = -3,11 \times 10^{-6}$. En utilisant la méthode hybride, l'état stationnaire monophasique de l'écoulement est finalement obtenu.

Les symboles bleus dans les figures 4.13a et 4.13b présentent respectivement les profils de vitesse horizontale et de température pour l'état stationnaire obtenu après la *période d'établissement*. On constate que le champ de la vitesse entre la solution hybride et la solution analytique (cf. Eq. (4.4)) est en très bon accord tandis qu'il existe un écart entre les deux solutions (hybride et analytique) pour le champ de la température. On observe que le glissement de vitesse à la paroi peut être négligé, mais le saut de température est notable.

Les valeurs présentées dans les figures sont moyennées sur 2 millions d'itérations temporelles microscopiques et sur $N_E = 64$ échantillons. Les symboles vides (resp. pleins) correspondent à la solution hybride dans le domaine microscopique (M) (resp. macroscopique (C)). Grâce à ces tracés, on peut vérifier une nouvelle fois que les solutions issues des deux modélisations coïncident correctement dans la zone de recouvrement.

Une fois la période d'établissement terminée, la température du mur est diminuée de 1,1 à 0,925. La condensation du gaz sur la surface de la paroi se fait sous la condition

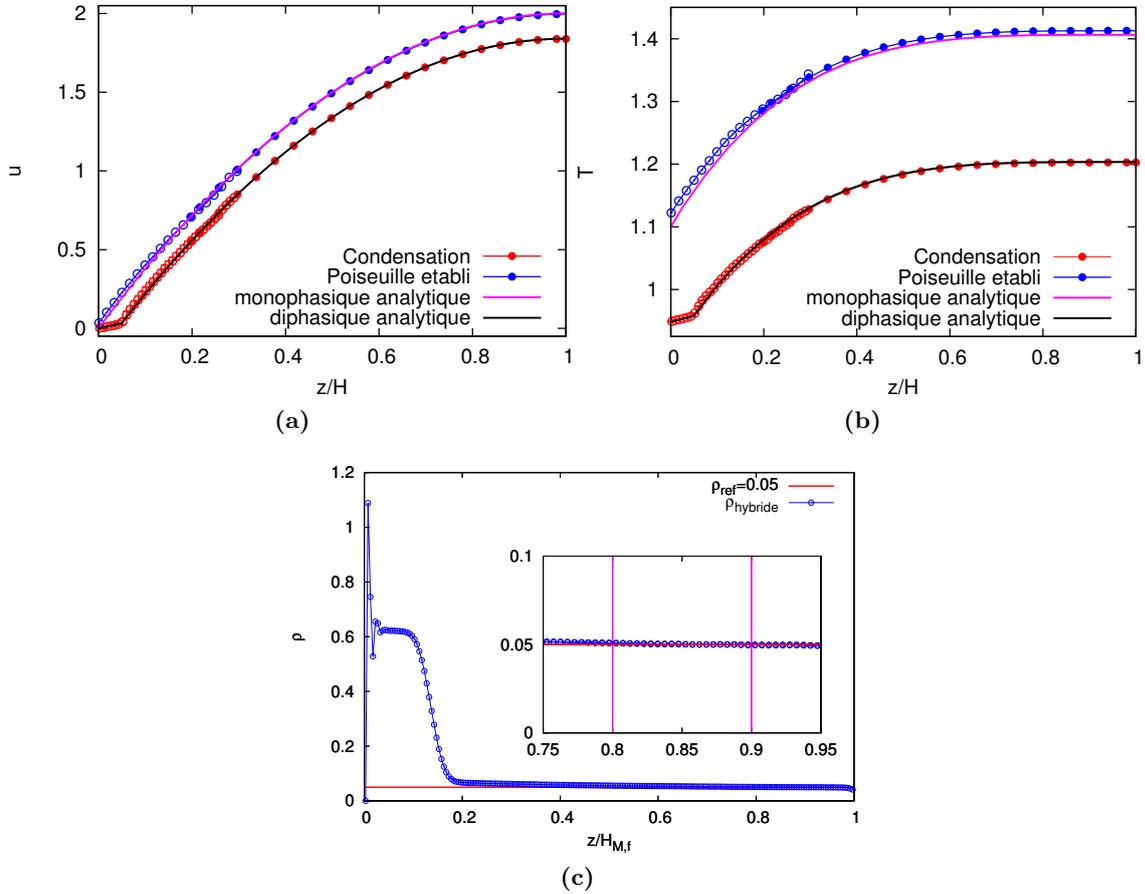


Figure 4.13 : Cas de condensation : $\rho_{ref} = 0,05$, $T_w = 0,925$, $H_{M,f} = 139,21$, $\partial_x p = -3,11 \times 10^{-6}$. Profil de vitesse (a) et de température (b). Les symboles pleins correspondent aux solutions continues et les symboles creux aux solutions moléculaires avec des barres d'erreur représentatives des écarts types par rapport à la moyenne des $N_E = 64$ échantillons tandis que les lignes continues représentent les solutions analytiques en monophasique et diphasique. (c) Profils de masse volumique dans le domaine moléculaire.

de non-équilibre thermique. Un film de liquide ultra-mince est rapidement formé (voir Fig. 4.13c). Les paramètres de la simulation sont tels que le film liquide reste toujours dans la moitié de la zone moléculaire la plus proche de la paroi. Les symboles en rouge dans les figures 4.13a et 4.13b présentent respectivement les profils de vitesse horizontale et de température en présence de condensation.

On constate que les champs de vitesse et de température dans l'ensemble du domaine sont influencés par la condensation du gaz. La continuité dans la zone de recouvrement entre les approches continue et moléculaire est donc correcte également dans le cas de condensation à la paroi.

4.4.2 Évaporation

De la même manière, nous nous sommes intéressés au problème d'évaporation. Pour examiner ce cas, nous avons également utilisé la configuration illustrée dans la figure 2.3a. Contrairement au problème de condensation, le mur à la frontière supérieure du domaine continu est conservé. Donc, la conduite est modélisée sur toute sa hauteur H .

Les caractéristiques de cette simulation sont les suivantes : le rapport des hauteurs est $H_C/H_{M,f} = 3$. La hauteur du domaine moléculaire est $H_{M,f} = 49,72$ et celle du domaine continu est $H_C = 149,2$, ce qui conduit à une hauteur $H = H_C + H_{M,f} - H_O = 179$ avec une zone de recouvrement $H_O = 19,888$. Les dimensions transverses du plot moléculaire sont $L_x \times L_y = 9,8763 \times 9,775$. La masse volumique initiale du système est $\rho = 0,6$. Le domaine moléculaire est donc composé initialement de $N = 2880$ atomes d'argon. Les parois solides sont toujours modélisées avec 840 atomes de platine.

Après une période de 200000 pas de temps microscopiques, l'état d'équilibre du système à température du mur $T_w = 0,98$ est atteint. L'écoulement stationnaire de Poiseuille en phase liquide est alors recherché. Pendant cette période, la vitesse maximale de l'écoulement est fixée à $u_0 = 0,5$ en imposant le gradient de pression $\partial_x p = -9,86 \times 10^{-5}$. Les profils présentés sur la figure 4.14 sont moyennés sur 2 millions d'itérations et sur 32 échantillons.

Dans la figure 4.14, les symboles bleus présentent les profils de vitesse (voir Fig. 4.14a) et de température (voir Fig. 4.14b) pour l'écoulement de Poiseuille stationnaire. On observe que la méthode de couplage, comme cela à déjà été montré, fonctionne correctement. Les solutions des domaines moléculaire et continu coïncident dans la zone recouvrement.

Contrairement au problème de condensation, la température de paroi a été augmentée de 0,98 à 1,5 après l'obtention du profil de Poiseuille monophasique. Comme le coefficient d'accommodation thermique est petit pour le mur atomique CFC(111) considéré [74], le paramètre d'interaction ε_{fw} est augmenté à la valeur $\varepsilon_{fw} = 6$, ce qui permet l'évaporation du liquide à proximité de la paroi sous la condition de non-équilibre thermique. Un film ultra-mince en phase gazeuse est formé et atteint une épaisseur fixe une fois le régime stationnaire obtenu (voir Fig. 4.14c). Pour permettre l'évaporation du fluide, le cœur de l'écoulement doit être à une température plus faible que celle de la paroi. Le couplage de la température est dans ce cas modifié : la valeur de la température $T_{C \rightarrow M}$ est maintenue à 0,98 tout le long de la simulation. Cette configuration pourrait être celle du plot d'entrée du canal (voir Fig. 4.1) où l'écoulement est dynamiquement établi, mais entre avec une température plus faible qu'en proche paroi.

Dans la figure 4.14, les symboles rouges présentent les profils de vitesse et de température en régime stationnaire. Les symboles vides correspondent à la solution dans le domaine microscopique et les pleins représentent celle dans le domaine macroscopique. En observant

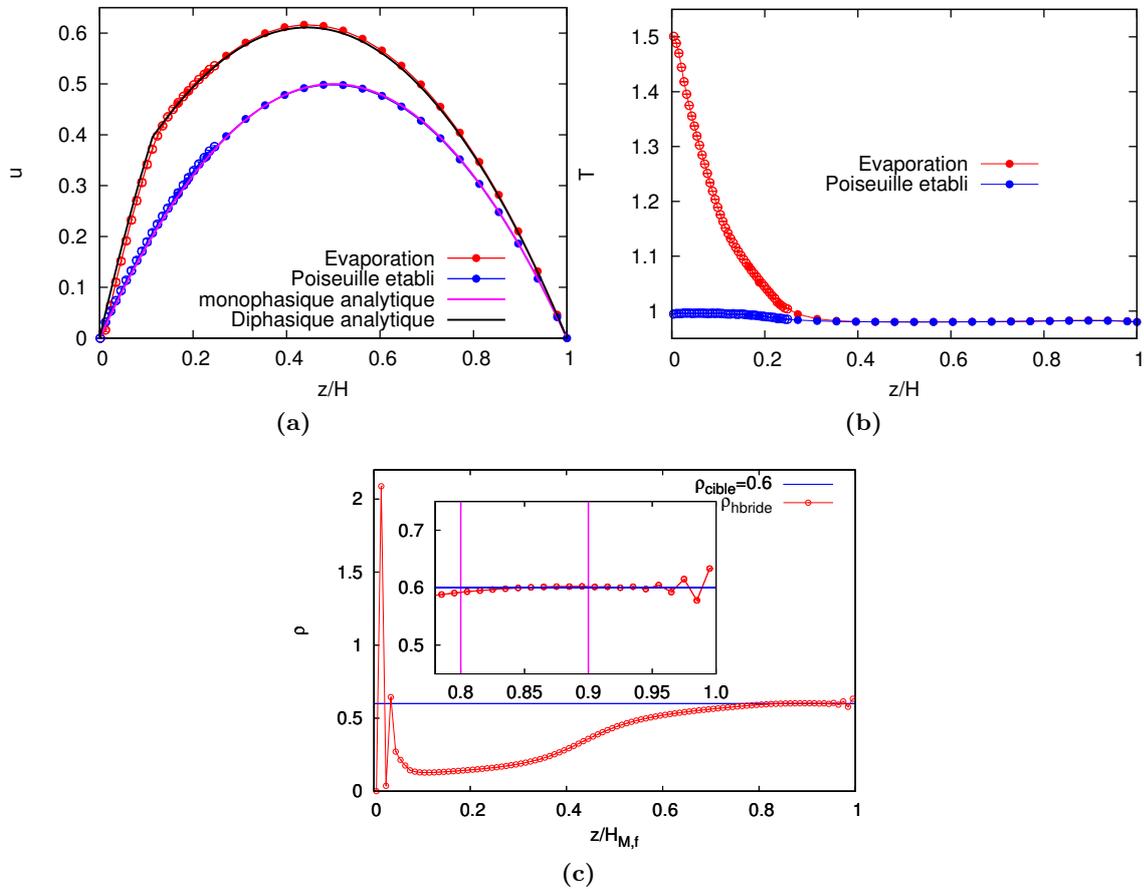


Figure 4.14 : Cas d'évaporation : $\rho_{\text{ref}} = 0,6$, $T_w = 1,5$, $H_{M,f} = 49,72$, $\partial_x p = -9,86 \times 10^{-5}$. Profil de vitesse (a) et de température (b). Les symboles pleins correspondent aux solutions continues et les symboles creux aux solutions moléculaires avec des barres d'erreur représentatives des écarts types par rapport à la moyenne des $N_E = 32$ échantillons. Les lignes continues représentent les solutions analytiques en monophasique et diphasique. (c) Profils de la masse volumique dans le domaine moléculaire.

la figure 4.14, on peut vérifier que la solution hybride est continue au niveau de la zone de recouvrement. La figure 4.14a présente également les profils analytiques de l'écoulement de Poiseuille en monophasique et diphasique. On constate que les champs de la vitesse entre les solutions hybrides et les solutions analytiques sont en bon accord.

4.5 Conclusion

Ce chapitre porte sur une étude du schéma de couplage basé sur un unique plot de dynamique moléculaire. Une telle modélisation est adapté pour simuler des écoulements invariants selon la direction de la conduite, par exemple les problèmes de type Couette, de transfert thermique, l'écoulement de Poiseuille et l'évaporation/condensation entre deux

parois en régime établi. Pour les deux premiers problèmes classiques (Couette et transfert thermique), les résultats issus de notre code sont en bon accord avec les solutions analytiques en régime transitoire.

Pour les écoulements établis, nous proposons d'utiliser la méthode d'initialisation "hybride analytique" afin d'économiser du coût de calcul. Contrairement à la méthode usuelle "isotherme repos" où la vitesse du fluide est nulle, nous commençons la simulation avec le champ de vitesse du fluide correspondant à la solution continue. Les tests numériques ont montré que l'initialisation à la méthode "hybride analytique" a permis d'obtenir la solution finale avec un temps de simulation réduit par un facteur 4.

Enfin, des écoulements avec condensation/évaporation en proche paroi ont été étudiés. La méthode de contrôle de la masse volumique a été utilisée avec succès pour piloter la densité entre les milieux continu et moléculaire. Les résultats calculés par notre code hybride nous permettent d'avoir des informations intéressantes sur la formation de la couche liquide (gazeux) et met en évidence l'influence du phénomène de changement de phase sur les écoulements.

Chapitre 5

Simulations hybrides multi-échelles dans des micro conduites

Sommaire

5.1	Application de la décomposition de domaine	101
5.2	Écoulements monophasiques non isothermes	104
5.3	Écoulements avec condensation en proche paroi	112
5.4	Écoulements gazeux compressibles	120
5.5	Conclusion	129

Dans ce chapitre, nous allons utiliser la méthode hybride pour construire une résolution multi-échelle des écoulements dans des micro-canaux. On commencera par la présentation de la méthode de décomposition de domaines utilisée pour représenter le caractère multi-échelle des transferts lorsque la longueur des conduites est très supérieure à son diamètre hydraulique dont la taille est nanométrique ou micrométrique. Des simulations avec la méthode hybride multi-échelle seront ensuite réalisées pour des écoulements de fluides monophasiques anisothermes, compressibles ou incompressibles, et des écoulements de gaz avec condensation en proche paroi. Les paramètres multi-échelles de ces simulations seront étudiés et les résultats seront comparés à des solutions de référence.

5.1 Application de la décomposition de domaine à la simulation multi-échelle

Dans ce chapitre, nous considérons une conduite de section rectangulaire de hauteur $2H$, de largeur $l \gg 2H$ et de longueur $L \gg l$. Les parois internes sont recouvertes d'une fine

couche de platine et de l'argon en phase gazeuse ou liquide est injecté dans la section d'entrée. Les parois situées en $y = \pm l/2$ sont adiabatiques et celles en $z = 0$ et $2H$ sont isothermes à la température T_w . En tenant compte du rapport d'aspect $l/2H \gg 1$ et des conditions aux limites en $y = \pm l/2$, il est possible de se ramener à une étude bi-dimensionnelle. De plus, le problème étant symétrique vis-à-vis du plan $z = H$, le domaine de calcul se réduit encore de moitié avec les nouvelles dimensions $L \times H$.

Comme présenté sur la figure 5.1, la géométrie rectangulaire du canal est ensuite divisée en sous-domaines :

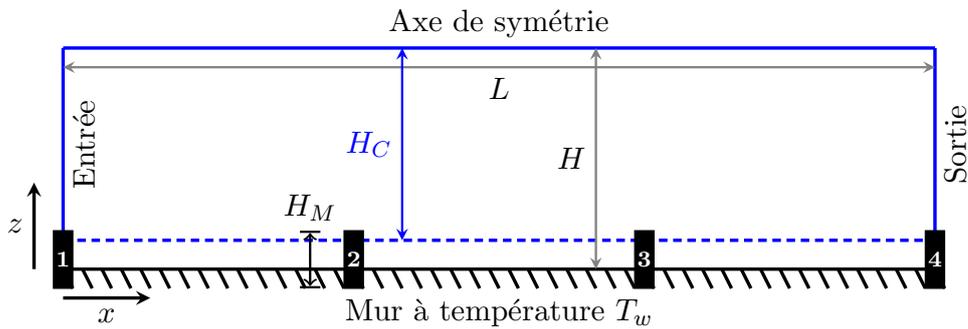


Figure 5.1 : Schéma de la conduite de demi-hauteur H et de longueur L . La région fluide de hauteur H_C est gouvernée par les équations de Navier-Stokes et de l'énergie. Des descriptions atomistiques sont utilisées pour modéliser le mur et le fluide adjacent (plots rectangulaires numérotés de 1 à 4 et de hauteur H_M).

- un domaine quasiment identique au canal mais dans lequel le voisinage de la paroi a été supprimé. Cette région, notée (C), est modélisée par une approche continue et permet de simuler efficacement les grandes échelles (domaine borné par les lignes continues et pointillées bleues, de hauteur H_C et de longueur L).
- des domaines rectangulaires connectant localement la partie inférieure de la région (C) à la paroi et dans lesquels une modélisation moléculaire est utilisée pour rendre compte des interactions à petite échelle entre le fluide et le mur. Ces zones, notées (M), sont représentées sur la figure 5.1 par 4 plots rectangulaires noirs de hauteur H_M . Une illustration d'un plot moléculaire a été donnée en Fig. 2.3b (page 45) où on distingue l'épaisseur du mur atomique $H_{M,w}$ et la hauteur de la zone fluide moléculaire $H_{M,f}$. La hauteur totale du plot est alors $H_M = H_{M,w} + H_{M,f}$.

Comme cela a été décrit précédemment, la région continue communique avec chaque domaine moléculaire par l'intermédiaire d'une zone de recouvrement dont la taille est typiquement 40% de $H_{M,f}$, la hauteur du fluide dans la zone moléculaire (voir Fig. 2.4, page 46). Cette zone de recouvrement est subdivisée en 4 sous-couches : deux d'entre-elles garantissent les échanges entre les domaines continu et moléculaire ($C \rightarrow M$ et $M \rightarrow C$), une couche de relaxation assure le découplage des dynamiques entre les zones, et une couche de contrôle permet de limiter les effets de bord et de piloter la valeur de la masse volumique.

L'idée principale est de traiter l'interaction du fluide avec les parois par une simulation de dynamique moléculaire. Même si cette approche est restreinte aux voisinages des parois, la grande longueur de la conduite rend actuellement une telle simulation prohibitive en terme de coût de calcul. Pour pallier cette difficulté, la résolution fine à petite échelle est limitée à des sous-domaines discrets de faible extension, dénommés ici "plots", et numérotés de 1 à 4 sur la figure 5.1.

L'interaction du fluide, ici de l'argon (liquide ou gazeux), avec la paroi (voir Fig. 2.3b, page 45) est traitée en modélisant au niveau atomique le mur. Ce dernier est composé d'atomes de platine organisés selon une structure cristalline cubique à face centrée. Cette paroi est discrétisée en n_b plots moléculaires dont l'abscisse x_i , $i = 1$ à n_b , est définie selon une loi géométrique de raison r_b :

$$x_i = \begin{cases} \frac{\Delta x_1}{2} + \left(L - \frac{\Delta x_1 + \Delta x_{N_x}}{2} \right) \left(\frac{1 - r_b^{i-1}}{1 - r_b^{n_b-1}} \right) & \text{si } r_b \neq 1 \\ \frac{\Delta x_1}{2} + \left(L - \frac{\Delta x_1 + \Delta x_{N_x}}{2} \right) \left(\frac{i-1}{n_b-1} \right) & \text{si } r_b = 1 \end{cases} \quad (5.1)$$

avec Δx_1 et Δx_{N_x} sont les tailles des mailles selon x des premier et dernier volumes de contrôle. Comme dans les chapitres précédents, les domaines moléculaires sont périodiques dans les directions tangentielle aux parois (x et y), ce qui conduit à un couplage et à des transferts purement 1D selon la direction z .

Au niveau continu, les conditions aux limites sont les suivantes :

$$\begin{cases} x = 0, & \mathbf{u}(z) = u_{\text{in}}(z)\mathbf{e}_x, \quad T(z) = T_{\text{in}}(z) \\ x = L, & \frac{\partial u}{\partial x}(z) = v(z) = \frac{\partial T}{\partial x}(z) = 0 \\ z = z_{M \rightarrow C}, & \mathbf{u}(x) = u_{M \rightarrow C}^{\text{macro}}(x)\mathbf{e}_x, \quad T(x) = T_{M \rightarrow C}^{\text{macro}}(x) \\ z = H, & \frac{\partial u}{\partial z}(x) = v(x) = \frac{\partial T}{\partial z}(x) = 0 \end{cases}$$

où $z_{M \rightarrow C}$ désigne l'ordonnée de la surface inférieure du domaine continu et coïncide avec l'ordonnée du centre de la sous-couche $M \rightarrow C$ du domaine moléculaire. En entrée ($x = 0$) les profils de vitesse $u_{\text{in}}(z)$ et de température $T_{\text{in}}(z)$ dépendent de la configuration traitée et seront explicités pour chaque problème physique.

Les fonctions $u_{M \rightarrow C}^{\text{macro}}(x)$ et $T_{M \rightarrow C}^{\text{macro}}(x)$ sont linéaires par morceaux. En définissant $u_{M_i \rightarrow C}^{\text{macro}}$ la valeur moyenne des vitesses des particules dans la sous-couche $M_i \rightarrow C$ du $i^{\text{ème}}$ plot moléculaire M_i , la vitesse macroscopique s'écrit

$$u_{M \rightarrow C}^{\text{macro}}(x) = \sum_{i=1}^{n_b-1} \left(u_{M_i \rightarrow C}^{\text{macro}} + \frac{u_{M_{i+1} \rightarrow C}^{\text{macro}} - u_{M_i \rightarrow C}^{\text{macro}}}{x_{M_{i+1} \rightarrow C} - x_{M_i \rightarrow C}} (x - x_{M_i \rightarrow C}) \right) \times \mathcal{H}(x, x_{M_{i+1} \rightarrow C}, x_{M_i \rightarrow C})$$

avec $x_{M_i \rightarrow C}$ l'abscisse du centre de la sous-couche $M_i \rightarrow C$ du $i^{\text{ème}}$ plot moléculaire M_i , $\mathcal{H}(x, a, b) = H(a-x) \times H(x-b)$ où $H(x)$ est la fonction de Heaviside, et n_b le nombre total de plots. La même démarche est suivie pour exprimer le profil de température $T_{M \rightarrow C}^{\text{macro}}(x)$, ce qui permet de construire des conditions continues à la limite en $z = z_{M \rightarrow C}$.

5.2 Écoulements monophasiques non isothermes

Le but principal de cette section est de valider notre méthode hybride multi-échelles pour des simulations mettant en jeu des transferts de chaleur.

Comme premier cas test, nous nous sommes intéressés au développement hydrodynamique d'un écoulement de fluide dans la région d'entrée d'une conduite de section rectangulaire de hauteur $2H$ et longueur $L \gg 2H$. Une condition de symétrie est appliquée en $z = H$. Dans la zone continue, l'écoulement est considéré incompressible. La température du mur est maintenue à $T = T_w$. Le fluide pénètre dans le canal à la température T_w , avec un profil de vitesse $u_{\text{in}}(z)$, et l'écoulement de sortie est supposé établi dynamiquement et thermiquement. La contribution thermique est uniquement due à la puissance engendrée par les flottements visqueux dans l'équation de l'énergie. Le rapport entre les hauteurs des domaines moléculaire et continu est $H_C/H_{M,f} = 25$.

Les calculs ont été effectués pour $H_{M,f} = 99,44$, ce qui conduit à $H = 2545,6$. La longueur et la température du mur sont respectivement $L = 4000 H$ et $T_w = 1,1$. Le domaine continu, de hauteur H_C , est discrétisé en $N_x \times N_z = 48000 \times 30$ volumes de contrôle rectangulaires dont les tailles sont plus petites à proximité de l'entrée et de la frontière inférieure. Les coefficients macroscopiques de l'argon liquide, de masse volumique $\rho = 0,81$, évalués à la température T_w sont $\mu = 2,073$, $\lambda = 6,832$ et $c_p = 2,375$. Afin de comparer efficacement les solutions provenant de la méthode hybride et de l'approche purement Volume Finis sur la demi-hauteur de la conduite, la vitesse d'entrée $u_{\text{in}}(z)$ est raccordée à zéro à la paroi par l'expression $u_{\text{in}}(z)/u_0 = z(2\delta - z)/\delta^2$ pour $0 \leq z \leq \delta$, et elle est prise uniforme dans le cœur de l'écoulement pour $\delta \leq z \leq H$. Dans notre simulation, $u_0 = 1$ et $\delta = 0,2H$. La valeur du nombre de Reynolds, basée sur une demie-conduite H , est $\text{Re} \approx 1000$, valeur qui est inférieure à la valeur critique $\text{Re}_c = 5780$ pour l'écoulement de Poiseuille entre deux plaques planes [68].

5.2.1 Distribution des plots moléculaires

Bien que le nombre et le positionnement des plots jouent un rôle déterminant sur la qualité de la solution numérique hybride, il est déraisonnable d'envisager une étude systématique de ces paramètres avec notre modèle de couplage dynamique moléculaire/volumes finis.

Afin de déterminer leur nombre et leur localisation tout en conservant un coût de calcul acceptable, nous avons utilisé un modèle simplifié de notre schéma hybride (cf. Sec. 3.1, page 59). Ce modèle suppose que la réponse dans la zone moléculaire est simplement linéaire. Sous cette hypothèse, les simulations microscopiques sont substituées par des profils analytiques pour la température et la vitesse, lesquels doivent vérifier les conditions suivantes : ils doivent se raccorder à la fois aux valeurs à la paroi (adhérence et température imposée) et à la solution issue de la mécanique des milieux continus dans le cœur de l'écoulement. La solution hybride utilisant les raccords linéaires (méthode hybride analytique linéaire) est alors comparée à la solution de référence Volume Finis calculée sur le même maillage structuré auquel une ligne de 48000 cellules a été ajoutée pour couvrir le domaine moléculaire de hauteur $H_{M,f}$. La comparaison permet d'identifier le nombre minimal de plots et leur répartition "optimale" dans l'optique des simulations hybrides avec la dynamique moléculaire.

Pour mesurer les écarts entre deux solutions, les erreurs relatives en norme L_2 sont calculées dans la zone d'entrée (pour $x \leq 50H$) et dans le domaine entier.

5.2.1.1 Distribution uniforme des plots, $r_b = 1$

Dans le cas d'une répartition uniforme (voir Fig. 5.2), environ 20 plots sont nécessaires pour que l'erreur relative sur l'ensemble du domaine soit inférieure à 1% sur les champs de vitesse et de température. Pratiquement, cette valeur n'est pas vraiment appropriée

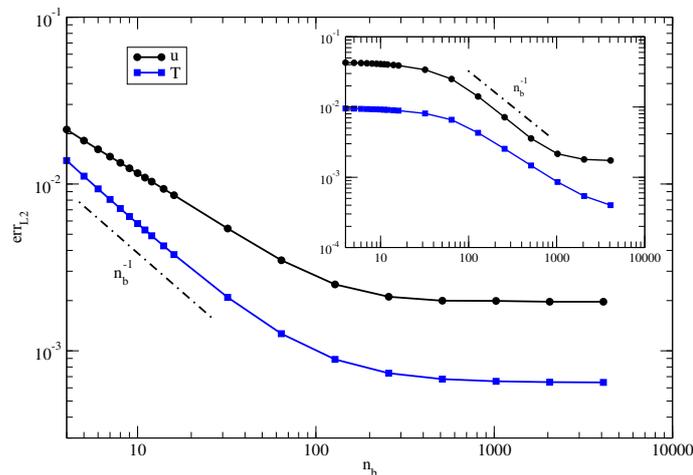


Figure 5.2 : Écart relatif sur tout le domaine fluide de la vitesse et de la température entre la méthode hybride analytique linéaire et une résolution complète en Volume Finis. Le nombre n_b de plots répartis uniformément le long de la micro conduite est présenté sur l'axe des abscisses. La figure encapsulée montre l'écart relatif calculé dans la région d'entrée, ici pour $x/H \leq 50$.

puisque le champ de vitesse évolue fortement dans la zone d'entrée avant de devenir

presque indépendant de la coordonnée axiale dans la zone établie. Si on considère maintenant la zone d'entrée, l'écart entre les solutions augmente de manière significative. Pour maintenir l'erreur relative inférieure à 1%, $n_b = 200$ plots sont maintenant nécessaires. A partir de $n_b = 2000$, l'erreur relative sur le champ de vitesse sature au-dessus de la valeur de 0,1%, ce qui correspond à l'écart systématique introduit par la modélisation couplée microscopique/macrosopique pour un écoulement de Poiseuille sur un unique plot, un rapport d'échelles $H_C/H_{M,f} = 25$ et une approximation linéaire des variables dans le domaine moléculaire (cf. Sec. 3.1, page 59). Il est intéressant de remarquer que le nombre d'itérations de couplage reste proche de 10 pour un critère d'arrêt basé sur l'écart relatif entre les valeurs échangées dans toutes la zone de recouvrement inférieur à 0,1 %, et ce quel que soit le nombre de plots utilisés dans la simulation. Une fois que le nombre de plots est choisi, l'initialisation, suivie de la simulation avec le modèle hybride dynamique moléculaire est effectuée. Cependant, il est clair que des simulations avec des centaines de plots moléculaires sont loin d'être réalisables, le temps de restitution de la simulation étant évidemment proportionnel au nombre de plots. Alors que l'obtention de l'état stationnaire par le modèle hybride linéaire et multi-échelle nécessite une quinzaine d'itérations couplées (environ une dizaine de minutes), plusieurs jours (en temps CPU équivalent à un calcul mono-processeur) sont nécessaires pour atteindre la convergence de la simulation moléculaire sur un plot unique. La minimisation du nombre de plots pour le modèle hybride multi échelle est donc un enjeu fondamental pour espérer obtenir les solutions stationnaires dans des temps raisonnables, y compris avec l'utilisation de machines à architectures parallèles.

5.2.1.2 Distribution non uniforme des plots, $r_b \neq 1$

Pour maintenir le coût de calcul acceptable, le nombre de plots ne doit pas excéder la vingtaine. Afin de tenir compte cette contrainte, il est nécessaire de modifier la distribution spatiale des plots le long du mur pour minimiser l'écart avec la solution de référence. La figure 5.3 montre l'erreur relative sur les champs de vitesse et de température, entre le modèle hybride analytique linéaire et la solution de référence purement volumes finis, en fonction de la raison géométrique r_b (cf. Eq. (5.1)) de la distribution des plots. Comme pour la répartition uniforme ($r_b = 1$), l'écart sur la vitesse est nettement plus grand que pour la température, environ un ordre de grandeur. De plus, les différences maximales sont principalement situées dans la zone d'entrée (graphes encapsulés dans les Figs. 5.3a et 5.3b). Les pentes des courbes indiquent également que pour un nombre n_b de plots, il existe une valeur de la raison qui minimise la différence à la solution de référence. Par exemple pour $n_b = 8$, la raison optimale est $r_b = 4$. Compte tenu des pentes indiquées sur les graphes, il est préférable de surestimer la valeur de r_b plutôt de la sous-estimer.

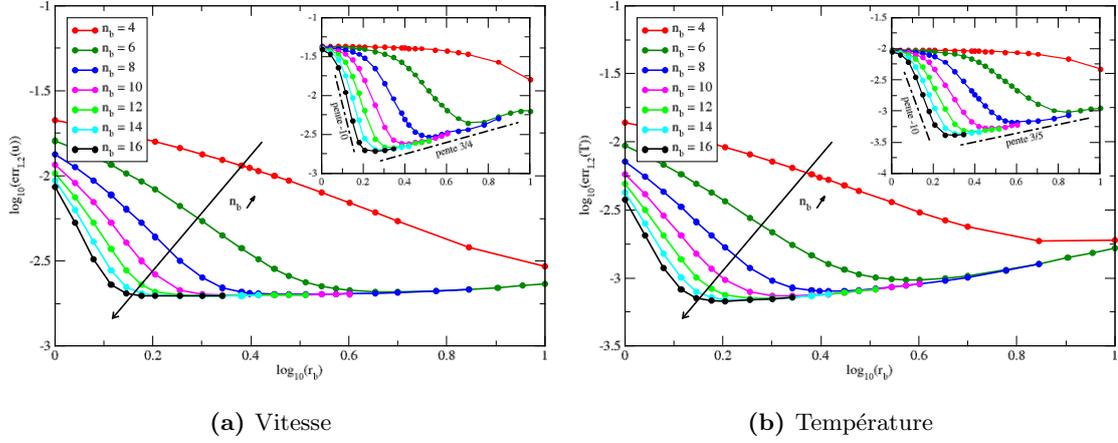


Figure 5.3 : Écarts relatifs sur l'ensemble de l'écoulement entre les méthodes hybride analytique linéaire et Volumes Finis, en fonction de la raison géométrique r_b (cf. Eq. (5.1)) et du nombre de plots n_b . Les graphes encapsulés montrent les écarts relatifs calculés dans la région d'entrée uniquement ($x/H \leq 50$).

Ces études systématiques, basées sur le modèle hybride linéaire, ont permis d'identifier le nombre et la répartition des plots qu'il faut choisir pour garantir un écart acceptable à la solution de référence. Dans la suite nous utiliserons 8 plots distribués géométriquement avec une raison $r_b = 4$. Le modèle hybride analytique linéaire est également utilisé pour initialiser les simulations moléculaires et ainsi réduire significativement le nombre d'itérations couplées pour converger vers l'état stationnaire (cf. Sec. 3.1, page 59).

5.2.2 Simulation hybride multi-échelle des écoulements fluides et des transferts de chaleur

Les modèles analytiques sont maintenant substitués par des simulations de dynamique moléculaire au sein de chaque plot. L'initialisation est issue des profils des modèles linéaires. Chaque plot a pour dimensions $(L_x; L_y; H_{M,f}) = (9, 87; 9, 77; 99, 44)$, et est composé de 7776 molécules d'argon pour capturer les interactions fluide/solide le long de la conduite (direction x). L'état stationnaire est obtenu en résolvant dans la région continue les équations de Navier-Stokes et de l'énergie à l'état stationnaires (2.9). Comme indiqué dans les troisièmes colonnes intitulées (ML) des tableaux 5.1, le champ initial s'écarte de moins 0,5% de la solution purement Volumes Finis (deuxième colonne) sur toutes les sections transversales correspondant aux abscisses x_i des 8 plots moléculaires.

Plot	Volumes Finis (VF)	Modèle Linéaire (ML)	Mur Stochastique (MS)	Mur Atomique (MA)
#	u/u_0	u/u_0 (e_{VF})	u/u_0 (e_{VF})	u/u_0 (e_{MS})
1	1,000	1,000 (0, 0%)	1,000 (0, 0%)	1,000 (0, 0%)
2	1,006	1,005 (-0, 1%)	1,005 (-0, 1%)	1,005 (0, 0%)
3	1,042	1,041 (-0, 1%)	1,039 (-0, 3%)	1,038 (0, 0%)
4	1,129	1,130 (-0, 1%)	1,124 (-0, 4%)	1,123 (-0, 1%)
5	1,295	1,299 (-0, 3%)	1,290 (-0, 4%)	1,289 (-0, 1%)
6	1,397	1,395 (-0, 2%)	1,392 (-0, 4%)	1,390 (-0, 1%)
7	1,399	1,397 (-0, 1%)	1,396 (-0, 2%)	1,394 (-0, 1%)
8	1,399	1,397 (-0, 1%)	1,395 (-0, 3%)	1,393 (-0, 1%)

(a) Vitesse réduite $u(z = H)/u_0$

Plot	Volumes Finis (VF)	Modèle Linéaire (ML)	Mur Stochastique (MS)	Mur Atomique (MA)
#	T/T_w	T/T_w (e_{VF})	T/T_w (e_{VF})	T/T_w (e_{MS})
1	1,002	1,000 (-0, 2%)	1,001 (-0, 1%)	1,009 (0, 9%)
2	1,019	1,018 (-0, 1%)	1,016 (-0, 3%)	1,028 (1, 2%)
3	1,034	1,033 (-0, 1%)	1,029 (-0, 5%)	1,046 (1, 7%)
4	1,043	1,043 (0, 0%)	1,038 (-0, 5%)	1,054 (1, 5%)
5	1,058	1,059 (0, 1%)	1,052 (-0, 6%)	1,066 (1, 3%)
6	1,096	1,099 (0, 3%)	1,089 (-0, 6%)	1,104 (1, 4%)
7	1,167	1,172 (0, 4%)	1,157 (-0, 9%)	1,182 (2, 2%)
8	1,180	1,186 (0, 5%)	1,170 (-0, 9%)	1,199 (2, 5%)

(b) Température réduite maximale $\max_z(T(z)/T_w)$

Tableau 5.1 : Grandeurs locales dans les sections x_i des plots pour le modèle Volumes Finis pur (VF), le modèle hybride analytique linéaire (ML) et les modèles hybrides moléculaires avec un mur stochastique (MS) ou un mur atomique (MA). La notation e_{ref} représente l'écart relatif par rapport à la référence "ref".

5.2.2.1 Comparaison des modèles hybrides moléculaires pour des murs stochastique et atomique

Comme dans la section 4.1 (page 82), un mur stochastique est d'abord utilisé pour atténuer le saut de température et le glissement de vitesse à l'interface fluide/solide : Cela permet une comparaison plus aisée avec la solution obtenue par l'approximation Volumes Finis (VF) dans tout le domaine (sur toute la hauteur H). Les figures 5.4a et 5.4b présentent les profils de vitesse et de température pour les 8 abscisses x_i des plots moléculaires. Les symboles creux (resp. pleins) correspondent à la solution couplée dans le domaine microscopique (resp. continu) tandis que les courbes en traits continus représentent la solution macroscopique purement Volumes Finis. Comme on peut le voir dans les différents agrandissements, les solutions issues des deux modélisations se raccordent correctement

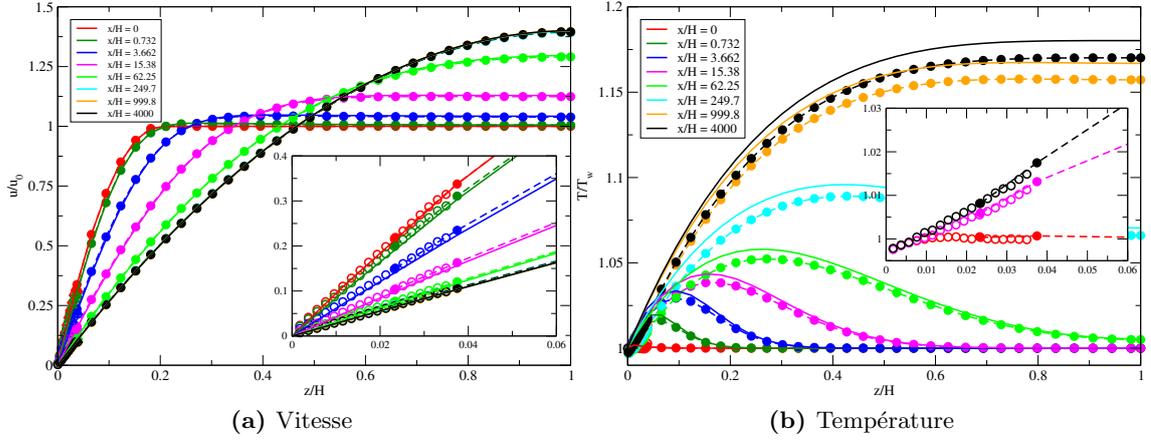


Figure 5.4 : Profils de vitesse et de température dans les 8 sections x_i des plots moléculaires d'un écoulement monophasique anisotherme. Les parois sont modélisées par des murs stochastiques. Les valeurs moyennes sont obtenues sur 1 million de pas de temps microscopiques et $N_E = 128$ échantillons. Les symboles creux et pleins représentent respectivement la solution hybride dans les domaines moléculaire et continu. Les lignes continues indique la solution purement Volumes Finis.

dans la zone de recouvrement. Les champs de vitesse et température de la solution hybride et de la solution purement macroscopique sont en très bon accord, avec des écarts relatifs respectivement inférieurs à 0,5% et 1% (Tab. 5.1, quatrièmes colonnes étiquetées MS). Pour la variable ϕ vitesse ou température, l'écart relatif à la référence ϕ_{ref} est défini par

$$e_{/\text{ref}} = \frac{\max_i \phi(z_i) - \max_i \phi_{\text{ref}}(z_i)}{\max_i \phi_{\text{ref}}(z_i)} \quad (5.2)$$

Étudions maintenant l'écoulement lorsque un mur atomique est utilisé. Donc, en plus des 7776 molécules d'argon, 840 molécules de platine constituent les murs des plots moléculaires. Ces molécules sont réparties selon une structure de type cubique face centrée et empilées parallèlement au plan diagonal 111 (CFC(111)). Les profils de vitesse et de température sont illustrés en figure 5.5 pour les abscisses x_i des 8 plots moléculaires. Les écarts relatifs sur la vitesse issue de la simulation effectuée avec le mur stochastique (voir Fig. 5.4a) et celle avec le mur atomique (voir Fig. 5.5a) semblent être très faibles. Cette observation est confirmée par le calcul des écarts relatifs dans les différents plots qui n'excède pas 0,1% (Tab. 5.1, cinquième colonne étiquetée MA). En revanche, la comparaison des profils des températures (voir Figs. 5.4b et 5.5b) montre une différence plus importante atteignant jusqu'à 2,5% (Tab. 5.1), en raison du saut de température plus important à l'interface fluide/solide.

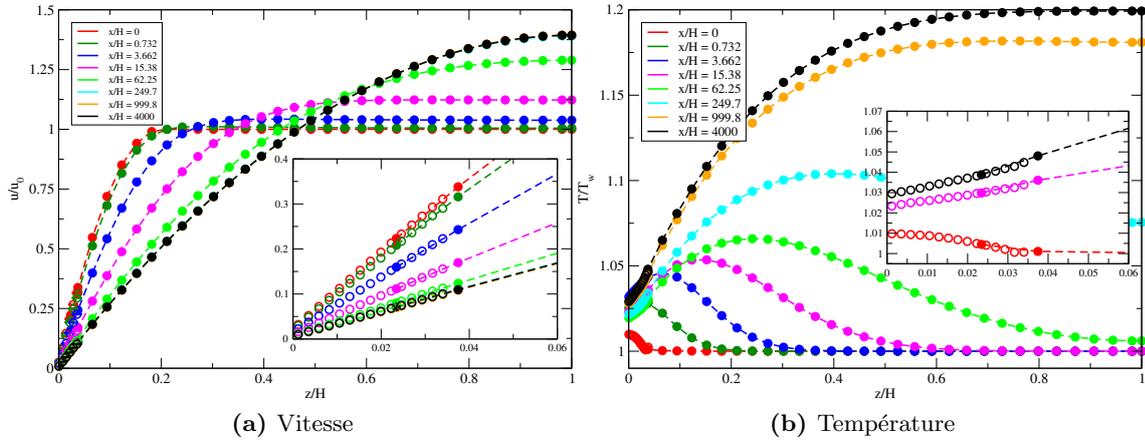


Figure 5.5 : Même légende que la figure 5.4 mais pour un modèle de mur atomique. La solution Volumes Finis n'est pas indiquée.

Une remarque doit maintenant être ajoutée concernant la conservation du débit massique dans la conduite. Alors que la conservation de ce débit est parfaitement satisfaite par l'approximation Volumes Finis des équations de Navier-Stokes, et que, par périodicité, chaque plot moléculaire la vérifie aussi, cela n'est à priori nullement le cas entre les plots. Ainsi, la conservation globale du débit dans le canal n'est pas parfaitement assurée car les profils des vitesses sont différents dans chaque plot, ce qui conduit à des débits différents (voir Fig. 5.5a encapsulée). Cependant, les débits volumiques mesurés dans chaque section et présentés dans le tableau 5.2 montrent que l'écart au débit analytique Q_0 , issu de l'intégration analytique du profil de vitesse $u_{in}(z)$ en entrée du canal, reste inférieur à 0,3% quel que soit le modèle ou le type de mur adopté. Ces écarts relatifs sont très faibles

Plots	Modèle Linéaire (ML)	Mur Stochastique (MS)	Mur Atomique (MA)
#	$Q/Q_0 - 1$	$Q/Q_0 - 1$	$Q/Q_0 - 1$
1	-0,12%	-0,12%	-0,10%
2	-0,14%	-0,13%	-0,13%
3	-0,18%	-0,17%	-0,15%
4	-0,21%	-0,20%	-0,19%
5	-0,23%	-0,22%	-0,22%
6	-0,24%	-0,23%	-0,23%
7	-0,24%	-0,23%	-0,23%
8	-0,24%	-0,23%	-0,23%

Tableau 5.2 : Erreur relative par rapport au débit analytique $Q_0 = 2,630 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}/\text{m}$ dans les sections transversales aux 8 plots pour le modèle hybride linéaire (ML) et la méthode hybride moléculaire avec les murs stochastique (MS) et atomique (MA).

ce qui permet de démontrer la fiabilité de la méthode hybride pour des rapports de hauteur

$$H_C/H_{M,f} \gg 1.$$

5.2.2.2 Étude de l'écoulement

Concentrons nous maintenant sur les résultats obtenus avec le mur atomique afin d'examiner de manière plus approfondie le comportement du fluide à l'interface fluide/solide. La figure 5.6a présente le glissement de vitesse normalisé $\Delta u/u_0$ et le saut de température réduit $\Delta T/T_w$, en fonction de la coordonnée adimensionnelle x/H . On rappelle que le saut

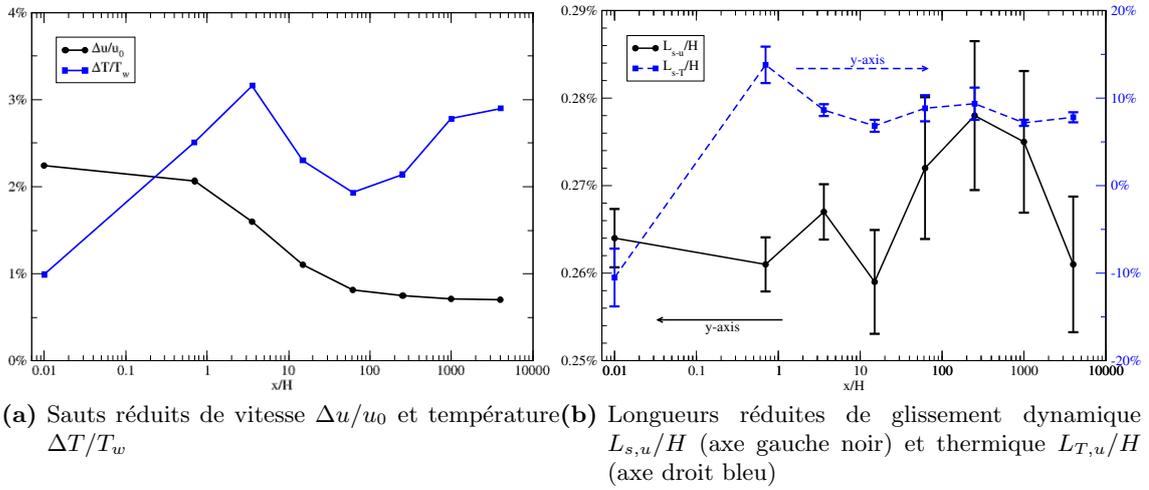


Figure 5.6 : Propriétés à l'interface liquide/solide aux 8 abscisses réduites x_i/H des plots moléculaire pour un écoulement dans un micro-canal avec la méthode hybride moléculaire et des murs atomiques. Les valeurs de glissement sont déduites de la régression linéaire des profils dans le domaine moléculaire sur l'intervalle $0 < z < H_{M,f}/5$. La demie-longueur des barres d'erreur représente l'écart type de la pente de régression (indication approximative de l'intervalle de confiance).

$\Delta\phi$ d'une grandeur physique ϕ à l'interface fluide/solide définie en $z = 0$ est l'écart entre sa valeur dans le fluide au voisinage immédiat de la paroi $\phi_f \equiv \phi(z = 0^+)$ et cette valeur à la paroi $\phi_w \equiv \phi(z = 0^-)$: $\Delta\phi = \phi_f - \phi_w$.

D'après la figure 5.6a, le glissement de la vitesse diminue de 2,25% de u_0 à l'entrée à environ 0,75% pour $x/H \gtrsim 60$. A partir de $x/H \approx 250$, la vitesse de l'écoulement est établie comme cela est montré dans la figure 5.5a où les différents profils de vitesse sont parfaitement superposés.

Le saut de température augmente dans la zone d'entrée de 1% de T_w à 3,25% en $x/H \approx 3,5$, puis il diminue progressivement pour atteindre environ 2% de T_w autour de $x/H = 60$, avant de croître à nouveau à environ 2,8%; il reste quasi-constant entre $x/H = 1000$ et 4000. Pour mieux apprécier l'influence du saut de température sur l'écoulement, l'échelle de référence devrait plutôt être liée à l'écart maximal de température dans la conduite. Dans ce cas, les pourcentages présentés ci-dessus sont à multiplier par 5 : le saut de température

varie alors entre 5% et 15% de la variation maximale de température dans l'écoulement, ce qui est loin d'être négligeable (voir Fig. 5.5b).

La longueur de glissement dynamique (resp. thermique) L_{s-u} (resp. L_{s-T}) est définie comme la distance à l'intérieur du mur à laquelle la vitesse (resp. température) extrapolée sera égale la vitesse (resp. température) à la paroi :

$$L_{s-u} \equiv \frac{\Delta u}{\partial u / \partial z|_{z=0^+}}, \quad L_{s-T} \equiv \frac{\Delta T}{\partial T / \partial z|_{z=0^+}}$$

La figure 5.6b illustre la variation des longueurs réduites de glissement dynamique L_{s-u}/H et thermique L_{s-T}/H en fonction de x/H . En accord avec les résultats précédents, L_{s-u}/H est très petit, environ $2,7 \times 10^{-3} \pm 5\%$, et est presque constante le long de la conduite.

Sur le premier plot moléculaire, la longueur réduite de glissement thermique est négative, ce qui est dû à la faible diminution de la température tracée en rouge dans la figure 5.5b. Ces résultats surprenants et inattendus ne sont actuellement pas parfaitement clairs. L'explication pourrait être liée à la condition à la limite d'entrée. En effet, les choix combinés d'un profil de vitesse non uniforme et d'une température constante égale à T_w sont probablement incompatibles en raison de la source de chaleur produite par la contrainte de cisaillement. Le modèle analytique de température à l'entrée aurait dû être choisi de sorte à prendre en compte la contribution de chauffage volumique engendré par le cisaillement visqueux. A partir de deuxième plot située à $x/H = 0,732$, la longueur de glissement thermique L_{s-T}/H devient positive, puis varie ensuite entre 7,5% à 12,5% sur le reste du canal, ce qui confirme que le saut relatif sur la température est beaucoup plus important que pour la vitesse.

5.3 Écoulements avec condensation en proche paroi

Un écoulement gazeux d'argon circulant dans une conduite de hauteur $H = 424,6$ et de longueur $L = 500H$ est maintenant considéré. La température à la paroi est choisie de sorte que le gaz se condense au voisinage immédiat du mur, $T_w = 0,925$. L'argon pénètre dans la conduite avec la masse volumique $\rho = 0,05$ et avec des profils imposés de vitesse $u_{in}(z)$ et de température $T_{in}(z)$. Ces fonctions correspondent à la solution entièrement développée d'un écoulement de fluide incompressible avec une vitesse maximale $u_0 = 2$ et une température de paroi $T_{w,0} = 1,1 > T_w$. En considérant un chauffage visqueux, les profils de vitesse et de température dans la section d'entrée s'écrivent :

$$\begin{aligned} u_{in}(z)/u_0 &= (z/H)(2 - (z/H)) \\ T_{in}(z) &= T_{w,0} + \mu u_0^2 (1 - (1 - z/H)^4) / 3\lambda \end{aligned} \quad (5.3)$$

Les propriétés de l'argon sont évaluées à la température 1, 25, une valeur proche de $T_{\text{in}}(z = H/2)$: $\mu = 0,15$, $\lambda = 0,62$ et $c_p = 1,63$. Les caractéristiques de la simulation hybride sont les suivantes : $H_{M,f} = 139,21$ et $H_C/H_{M,f} = 2,45$. Le domaine continu de hauteur H_C est discrétisé en $N_x \times N_z = 48000 \times 30$ volumes de contrôle rectangulaires, avec des tailles de mailles plus petites proche de la frontière inférieure. Les équations de Navier-Stokes et de l'énergie (2.9) sont résolues sous leur forme incompressible et stationnaire, c'est-à-dire en ignorant toutes les dérivées temporelles et le travail des forces de pression dans l'équation de l'énergie, et en maintenant la masse volumique constante.

5.3.1 Construction du modèle hybride analytique

Dans le but de positionner au mieux les plots de dynamique moléculaire le long de la frontière inférieure du domaine continu, nous allons rechercher des profils de vitesse et de température analytiques dans le gaz et son condensat permettant de représenter l'écoulement et les transferts par des fonctions dans chaque plot de dynamique moléculaire. Le modèle analytique repose sur plusieurs hypothèses :

- l'écoulement est en régime stationnaire ;
- les propriétés sont constantes dans chaque phase ;
- les profils de vitesse dans le gaz et le liquide sont monodimensionnels et s'écrivent $\mathbf{u}_{a,g} = u_{a,g}(z)\mathbf{e}_x$ et $\mathbf{u}_{a,l} = u_{a,l}(z)\mathbf{e}_x$;
- le gradient de pression est identique dans les deux phases et correspond à $dp/dx|_{z=z_{C \rightarrow M}}$;
- il n'y a pas de glissement dynamique à la paroi ou entre les phases, mais le saut de température à la paroi est intégré dans notre modèle ;
- la température est continue entre le gaz et le liquide et elle est égale à la température de changement de phase $T_{l/g}$ à l'interface.

En notant δ_a l'épaisseur analytique de condensat et en utilisant les hypothèses mentionnées ci-dessus, les équations de Navier-Stokes et de l'énergie s'écrivent pour chaque plot moléculaire M_i :

$$\begin{aligned} \text{pour } 0 \leq z \leq \delta_a : & \begin{cases} -\frac{dp}{dx}\Big|_{C \rightarrow M_i} + \mu_l \frac{d^2 u_{a,l}}{dz^2} = 0 \\ \lambda_l \frac{d^2 T_{a,l}}{dz^2} + \frac{\mu_l}{2} u_{a,l} \frac{du_{a,l}}{dz} = 0 \end{cases} \\ \text{pour } \delta_a \leq z \leq z_{C \rightarrow M_i} : & \begin{cases} -\frac{dp}{dx}\Big|_{C \rightarrow M_i} + \mu_g \frac{d^2 u_{a,g}}{dz^2} = 0 \\ \lambda_g \frac{d^2 T_{a,g}}{dz^2} + \frac{\mu_g}{2} u_{a,g} \frac{du_{a,g}}{dz} = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (5.4)$$

avec les conditions aux limites aux frontières ($z = 0$ et $z = z_{C \rightarrow M_i}$) et à l'interface ($z = \delta_a$) :

$$\begin{aligned} \text{à } z = 0 : & \begin{cases} u_{a,l} = 0 \\ T_{a,l} - T_w = L_{s-T} \frac{dT_{a,l}}{dz} \end{cases} \\ \text{à } z = z_{C \rightarrow M_i} : & \begin{cases} u_{a,g} = u_{C \rightarrow M_i} \\ T_{a,g} = T_{C \rightarrow M_i} \end{cases} \\ \text{à } z = \delta_a : & \begin{cases} u_{a,l} = u_{a,g} \\ T_{a,l} = T_{a,g} = T_{l/g} \\ \mu_l \frac{du_{a,l}}{dz} = \mu_g \frac{du_{a,g}}{dz} \\ \lambda_l \frac{dT_{a,l}}{dz} = \lambda_g \frac{dT_{a,g}}{dz} \end{cases} \end{aligned} \quad (5.5)$$

A l'aide des équations et des conditions aux limites, nous pouvons exprimer l'épaisseur de condensat δ_a comme une solution d'une équation non linéaire :

$$f_{\mathcal{X}}(\delta_a) = 0 \quad (5.6)$$

où \mathcal{X} est l'ensemble des paramètres du problème :

$$\mathcal{X} = \{\mu_l, \mu_g, \lambda_l, \lambda_g, z_{C \rightarrow M_i}, dp/dx|_{C \rightarrow M_i}, u_{C \rightarrow M_i}, T_{C \rightarrow M_i}, T_w, T_{l/g}, L_{s-T}\}.$$

Les conductivités thermiques (λ_l, λ_g) et les viscosités dynamiques (μ_l, μ_g) sont connues et constantes. L'ordonnée $z_{C \rightarrow M_i}$ est le centre de la couche $C \rightarrow M_i$, $dp/dx|_{C \rightarrow M_i}$, $u_{C \rightarrow M_i}$ et $T_{C \rightarrow M_i}$ sont le gradient de pression, la composante horizontale de la vitesse et la température transmis du domaine continu vers celui moléculaire M_i .

Une attention particulière est portée sur la valeur de la température de changement de phase $T_{l/g}$. La courbe de saturation $T_{l/g}(p)$ peut être déterminée lorsque l'équation d'état est connue. Mais sachant que l'équation de Lennard-Jones est le résultat d'une régression par une fonction analytique de nombreuses simulations numériques, la valeur de la température de changement de phase $T_{l/g}(p)$ est donc relativement imprécise. Par ailleurs, cette température satisfait une condition d'équilibre thermodynamique qui n'est pas vérifiée dans notre problème de changement de phase où les gradients thermiques engendrés par les frottements visqueux sont relativement importants (fluide incompressible). Enfin, la solution de l'équation non-linéaire (5.6) est très sensible à la valeur de la température $T_{l/g}$: une augmentation de 0,1% sur $T_{l/g}$ engendre un accroissement de 6,5% de δ_a . Afin de contourner ces difficultés, des simulations numériques hybrides moléculaires sont effectuées pour calibrer la température de changement de phase $T_{l/g}$ et la longueur de glissement thermique L_{s-T} .

En guise d'exemple de détermination de la température de changement de phase $T_{l/g}$ et de la longueur de glissement thermique L_{s-T} , nous avons effectué des simulations hybrides moléculaires pour le gradient de pression $\partial p/\partial x = 3,11 \times 10^{-6}$ (voir Fig. 5.7). Dans la

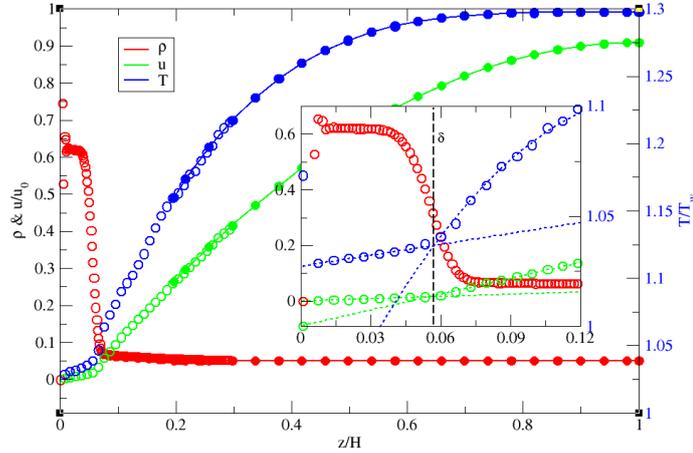


Figure 5.7 : Profils réduits de masse volumique et de vitesse (axe de gauche), et de température (axe de droite) pour une simulation hybride moléculaire sur un unique plot, avec $\partial p/\partial x = 3,11 \times 10^{-6}$. Les symboles creux correspondent au domaine moléculaire tandis que les symboles pleins et les lignes sont les solutions continus. La figure encapsulée présente un grossissement autour de l'interface. Des régressions linéaire et quadratique sont respectivement effectuées sur les profils de vitesse et température pour approcher la position de l'interface δ (lignes pointillées).

zone moléculaire (symboles creux), le profil de masse volumique indique qu'une phase plus dense, le condensat, s'est formée à proximité de la paroi. On distingue alors des changements des pentes dans les profils de vitesse et de température qui sont dus à une variation des coefficients de transport moléculaire μ et λ . Cette discontinuité dans les dérivées a lieu pour $z/H \approx 0,056$ (voir la figure encapsulée), dans la région caractérisée par une variation rapide de la masse volumique. Contrairement au modèle analytique l'interface est supposée d'épaisseur nulle, dans la simulation hybride est clairement diffuse : la variation de la masse volumique de $\rho \simeq 0,61$ à $\rho \simeq 0,05$ a lieu sur une longueur d'environ 3% de z/H . Si une approximation par une fonction tangente hyperbolique de la masse volumique au voisinage de l'interface est recherchée (cf. Eq. (3.3)), la position réduite de l'interface, δ/H , est légèrement plus petite, environ égale à 0,055. Une fois l'épaisseur moyenne de condensat connue, la température de changement de phase est déterminée par $T_{l/g} \equiv T(z = \delta) \approx 1,04T_w$. À l'aide de ces mêmes simulations hybrides moléculaires, la longueur de glissement thermique $L_{s-T} = [(T(0) - T_w)/(dT/dz)_{z=0+}]$, est approximée par $L_{s-T} = 60,55$. En définissant les propriétés du liquide et du gaz à $(\mu_l; \mu_g) = (0,82; 0,15)$, $(\lambda_l, \lambda_g) = (3,4; 0,62)$ et utilisant les variables échangées $u_{C \rightarrow M} = 0,8$ et $T_{C \rightarrow M} = 1,11$ pour $z_{C \rightarrow M} = 0,85H_{M,f}$, la solution de l'équation non-linéaire $f_{\mathcal{X}}(\delta_a) = 0$ donne $\delta_a = 0,05486H$, soit une valeur 2% inférieure à la quantité δ mesurée précédemment.

En se basant sur des simulations hybrides moléculaires pour 6 valeurs du gradient de pression, $\partial p/\partial x = -(0, 9; 1; 1, 05; 1, 1; 1, 15; 1, 2) \times 3, 11 \times 10^{-6}$, nous trouvons que le glissement thermique L_{s-T} s'avère quasiment indépendant du gradient de pression $\partial p/\partial x$. Ce n'est pas le cas pour la température de changement de phase $T_{l/g}$ qui elle est corrélée à la vitesse $u_{C \rightarrow M}$, et donc à la température $T_{C \rightarrow M}$ via la dissipation visqueuse. La figure 5.8 présente la température de changement de phase $T_{l/g}$ en fonction de $T_{C \rightarrow M}$ pour différentes valeurs du gradient de pression. Deux lois de variation portant sur la longueur de glissement thermique L_{s-T} et sur la température de changement de phase $T_{l/g}$ peuvent être développées : $L_{s-T} \approx 60, 5$ et $T_{l/g} = 0, 152 T_{C \rightarrow M} + 0, 786$. Une fois que tous les paramètres \mathcal{X} du modèle analytique sont déterminés, le positionnement optimal des plots peut être recherché avec des simulations multi-échelles hybrides analytiques.

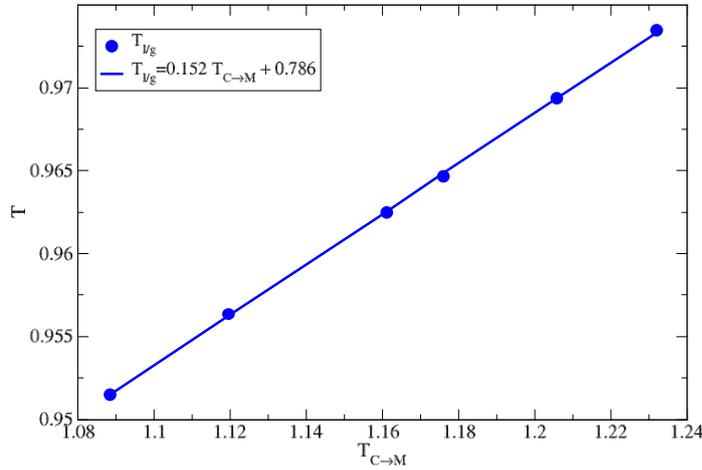
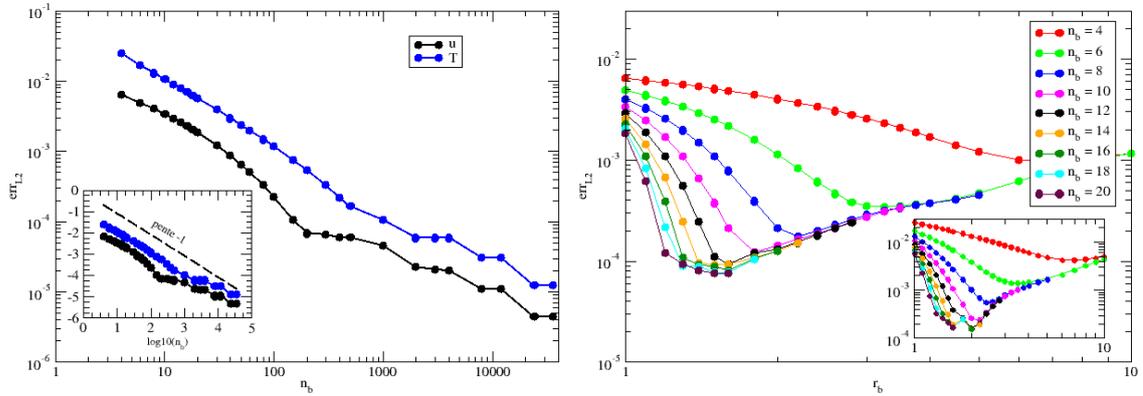


Figure 5.8 : Température de changement de phase $T_{l/g}$ en fonction de la température d'échange $T_{C \rightarrow M}$ calculée pour 6 valeurs du gradient de pression $\partial p/\partial x = -(0, 9; 1; 1, 05; 1, 1; 1, 15; 1, 2) \times 3, 11 \times 10^{-6}$.

5.3.2 Positionnement des plots avec le modèle multi-échelle hybride analytique

Nous suivons la même démarche que celle décrite pour l'écoulement monophasique dans la section 5.2.1, page 104. La figure 5.9 illustre les erreurs relatives commises dans la région d'entrée ($x/H < 300$) sur les champs de température et de vitesse entre la solution calculée avec un nombre n_b de plots répartis sur selon une distribution r_b donnée, et celle déterminée avec autant de plots que de mailles horizontales ($n_b = N_x = 48000$). Les résultats obtenus avec une distribution uniforme des plots analytiques sont présentés en figure 5.9a tandis que la distribution non-uniforme de raison r_b est illustrée en figure 5.9b. En choisissant $n_b = 10$ plots et une raison $r_b = 2$, l'erreur relative sur la vitesse (et sur la température) est largement inférieure à 0,1% sur l'ensemble du canal.



(a) Erreur sur la température et la vitesse; distribution uniforme des plots ($r_b = 1$). La figure encapsulée présente l'erreur relative en échelles logarithmiques

(b) Erreur sur la vitesse; distribution des plots selon la raison $r_b \neq 1$. La figure encapsulée présente les résultats pour les champs de température

Figure 5.9 : Erreurs relatives en norme L_2 dans la région d'entrée ($x/H < 300$) entre la solution obtenue avec une distribution de plots donnée et celle déterminée avec un nombre maximal de plots, $n_b = N_x$.

5.3.3 Simulation hybride multi-échelle des écoulements et des transferts thermiques avec condensation

Une fois le modèle hybride moléculaire et multi-échelle paramétré, la simulation peut être effectuée. Les profils moléculaires sont moyennés sur 1 million d'itérations. Encore une fois, l'initialisation à partir de la solution hybride analytique se révèle très efficace pour réduire le nombre d'itérations couplées : seule une vingtaine d'itérations sont nécessaires pour faire converger la méthode hybride multi-échelle. Les profils de vitesse et de température pour les 10 abscisses x_i des plots moléculaires sont présentés en figure 5.10. Le gaz chaud entre dans la conduite et est refroidi au contact du mur où la température T_w est inférieure à la température de changement de phase $T_{l/g}$: il résulte un changement de phase et l'apparition d'un film liquide dont l'épaisseur δ est quasiment indépendante de l'abscisse x/H (voir Fig. 5.11). L'apparition de ce condensat modifie légèrement le champ de vitesse au voisinage de la paroi. Comme supposé dans le modèle analytique, le glissement du liquide à la paroi est très faible. Par ailleurs, un saut de température de l'ordre de 20% à 30% de la différence de température $T(z = H) - T(z = 0^+)$ est mesuré à la paroi. Cette variation de température est due au refroidissement du fluide par la paroi froide.

Alors que les solutions hybrides moléculaire et continu sont généralement très proches dans la zone de recouvrement (voir les figures encapsulées dans la figure 5.10), un écart non négligeable est visible sur le profil de température sur le premier plot d'abscisse $x_1 \approx 0$ (les symboles rouges dans la figure 5.10b). L'explication de ce problème est liée à une incohérence entre la température d'entrée calculée à la paroi (cf. Eq. (5.3)) et la

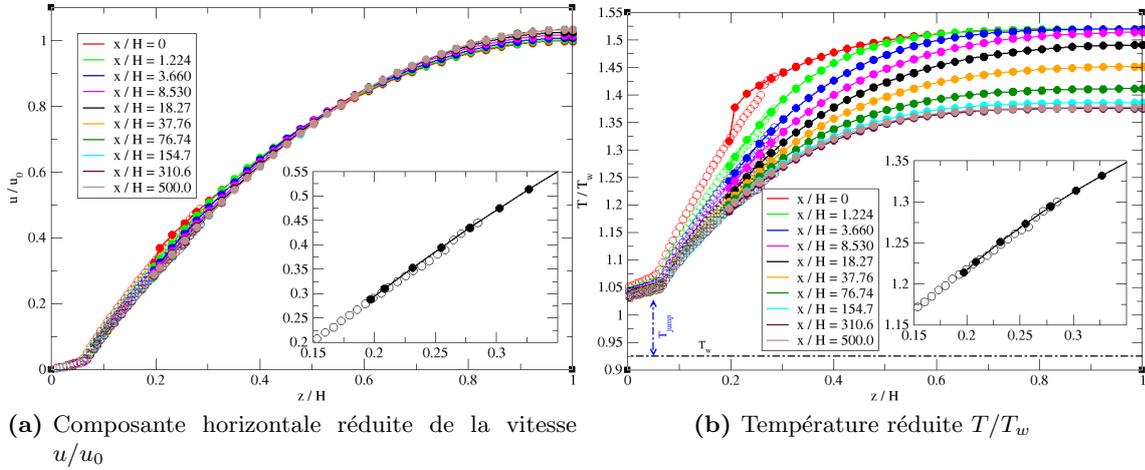


Figure 5.10 : Les profils de la vitesse et température pour les abscisses x_i des plots moléculaires. Deux illustrations du couplage sont présentées via les agrandissements de la zone de recouvrement pour les profils du 5ème plot. Les simulations sont effectuées sur 192 échantillons.

température du mur. Cela se traduit par une épaisseur visible de condensat dans le premier plot moléculaire, tandis que la température $T_{C \rightarrow M}$ reste très proche du champ de température imposé à l'entrée de la conduite. Ce point particulier n'est pas vraiment surprenant parce que le couplage entre la région moléculaire et celle continue est supposé 1D. Autrement dit, la solution calculée dans le premier plot moléculaire n'est jamais affectée par la condition à la limite d'entrée. Pour surmonter cette incohérence de modèle, la simulation dans le premier plot moléculaire devrait être également couplée à la condition à la limite d'entrée (couplage 2D).

Les épaisseurs de condensat issues des modèles hybrides moléculaire et analytique sont représentées en figure 5.11, en fonction de l'abscisse des plots. On constate que les résultats provenant du modèle multi-échelle hybride analytique (traits noirs) sont en bon accord avec ceux issus du modèle de couplage entre le milieu continu et la représentation particulière (traits bleus). On a également représenté les épaisseurs de condensat déterminées par le modèle analytique (5.6), dans lequel la longueur de glissement thermique L_{s-T} et la température de changement de phase $T_{l/g}$ ont été extraites de chacun des plots de la simulation multi-échelle hybride moléculaire. Cette épaisseur de condensat est en très bon accord avec celle provenant des simulations hybrides moléculaires sur chacun des plots. Cela montre que le modèle analytique (5.4) est un excellent modèle pour représenter l'écoulement et les transferts de chaleur qui ont lieu dans les plots moléculaires.

Il est à priori surprenant de constater que l'épaisseur de condensat, calculée par la simulation multi-échelle hybride moléculaire, donne une hauteur de film qui diminue avec x/H

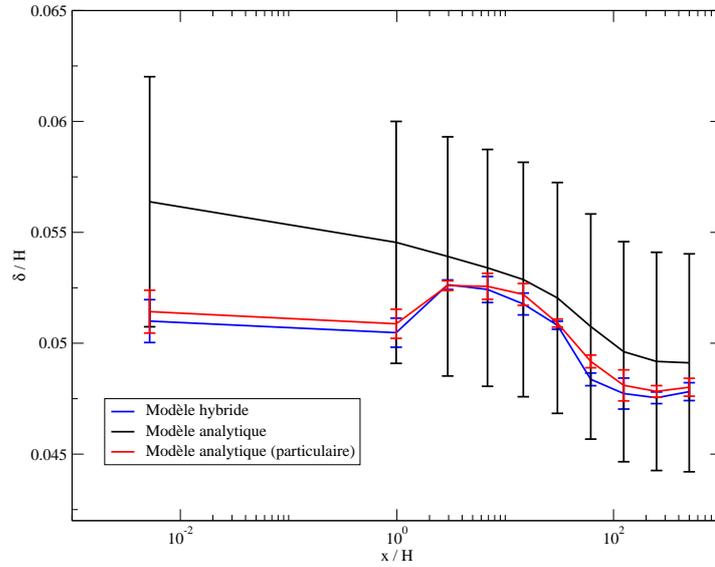


Figure 5.11 : Comparaison de l'épaisseur de condensat obtenue aux 10 abscisses x_i des plots, entre la simulation multi-échelle hybride moléculaire (traits bleus) et le modèle multi-échelle hybride analytique (traits noirs). Les traits rouges sont les épaisseurs de condensat obtenues avec le modèle analytique (5.6), dans lequel la longueur de glissement thermique L_{s-T} et la température de changement de phase $T_{l/g}$ ont été extraites de chacun des plots de la simulation multi-échelle hybride moléculaire. Les barres d'erreur du modèle moléculaire sont définies par $[\min_i \delta_i; \max_i \delta_i]$ pour chaque position des plots. L'épaisseur de condensat δ_i est identifiée par l'une des trois méthodes suivantes : les changements des pentes des profils de vitesse ou de température, ou l'approximation en tangente hyperbolique du profil de masse volumique.

(voir Fig. 5.11). En effet, sachant que la température du liquide à la paroi $T_f = T(z = 0^+)$ diminue en s'éloignant de la section d'entrée (voir Fig. 5.10b), un épaississement du condensat aurait plutôt été attendu. Pour expliquer cette variation contre-intuitive, il faut examiner, à la fois la température de glissement $T_f = T(z = 0^+)$ et celle de changement de phase $T_{l/g}$. La figure 5.12 présente la variation de $T_f = T(z = 0^+)$ et $T_{l/g}$ en fonction de la température de glissement $T(z = 0^+)$ sur chacun des plots. Plus le fluide s'enfonce dans la conduite, plus le liquide s'accommode à la température de la paroi. Bien que la température du fluide diminue, la température de changement de phase s'avère diminuer plus rapidement. Hormis sur le premier plot, le flux de chaleur transféré à la paroi $(\partial T / \partial z)|_{z=0^+}$ est quasiment constant tout au long de la conduite (voir Fig. 5.10b). Comme il est raisonnable de considérer que le coefficient de conduction thermique reste constant sur l'échelle de température parcourue par $T_f = T(z = 0^+)$, la diminution de l'écart de température de la couche liquide entraîne donc nécessairement une diminution de l'épaisseur du condensat.

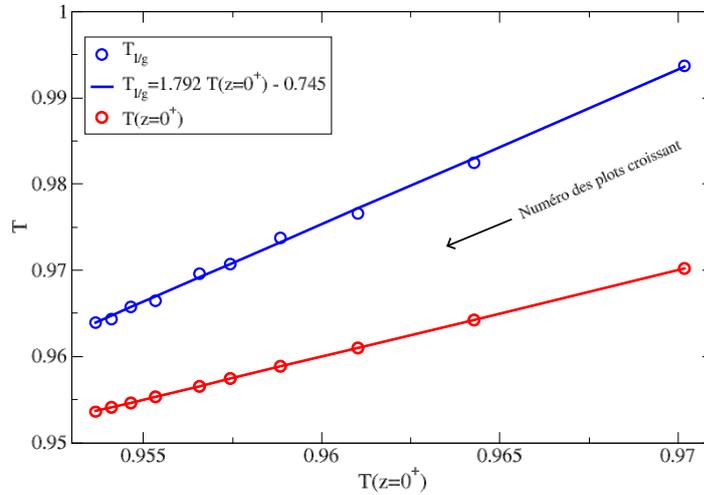


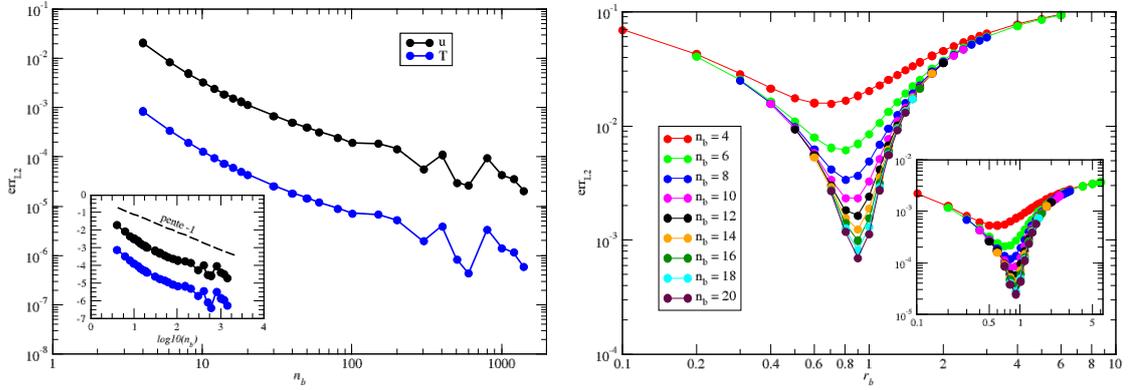
Figure 5.12 : Variation des températures de glissement $T_f = T(z = 0^+)$ et de changement de phase $T_{l/g}$ en fonction de la température de glissement $T(z = 0^+)$ sur chacun des plots. Les numéros croissants des plots apparaissent de droite vers la gauche.

5.4 Écoulements gazeux compressibles

Dans cette dernière section, l'objectif est d'examiner le couplage hybride multi-échelle pour un écoulement de gaz compressible dans le cœur de l'écoulement. A notre connaissance, il n'existe aucun travail dans la littérature traitant ce problème avec une méthode de couplage moléculaire/continu basée sur la décomposition de domaines. La décomposition adoptée pour traiter ce cas est toujours identique à celle représentée en figure 5.1.

5.4.1 Positionnement des plots dans la simulation hybride

Pour positionner au mieux les plots de dynamique moléculaire, nous avons utilisé le modèle multi-échelle hybride analytique qui est mentionné et discuté dans la section 5.2.1, page 104. Nous avons relevé l'erreur relative commise sur les champs de température et de vitesse pour entre deux simulations, l'une basée sur une distribution de n_b plots distribués selon une loi donnée, et l'autre utilisant un nombre de plots identique au nombre de mailles dans la direction horizontale, $n_b = N_x = 1500$ (voir Fig. 5.13). Contrairement à précédemment, on constate que l'utilisation d'une distribution quasi uniforme est la situation la plus pertinente. En effet pour un écoulement compressible, la détente du gaz en aval génère une baisse de température en sortie de canal qu'il est indispensable de bien représenter. Ainsi, nous choisissons d'utiliser $n_b = 8$ plots avec une raison géométrique légèrement inférieure à l'unité pour avoir des écarts relatifs à la référence inférieurs à 1%. Les plots analytiques sont ensuite substitués par des modélisations moléculaires. Les



(a) Erreur sur la température et la vitesse; distribution uniforme des plots ($r_b = 1$). La figure encapsulée présente l'erreur relative en échelles logarithmiques

(b) Erreur sur la vitesse; distribution des plots selon la raison $r_b \neq 1$. La figure encapsulée présente les résultats pour les champs de température

Figure 5.13 : Erreurs relatives en norme L_2 sur l'ensemble de l'écoulement entre la solution obtenue avec une distribution de plots donnée et celle déterminée avec un nombre maximal de plots, $n_b = N_x$.

simulations sont effectuées avec des murs stochastiques afin de diminuer au maximum les sauts de vitesse et de température à l'interface fluide/solide.

5.4.2 Couplage pour une densité faible de gaz

Dans un premier temps, nous avons étudié de l'argon gazeux entrant dans la conduite à la masse volumique $\rho = 0,05$ et à la température du mur $T = T_w$. Les autres paramètres de simulation sont les suivants : le canal est de hauteur $H = 512,96$, de longueur $L = 500H$ et la température de paroi est $T_w = 1,1$. Les plots utilisés au voisinage de la paroi ont pour dimensions $(L_x \times L_y \times L_z) = (14, 11 \times 13, 85 \times 142, 5)$. Dans le premier plot moléculaire, la simulation de dynamique moléculaire contient $N = 1392$ atomes d'argon. Le rapport des hauteurs $H_C/H_{M,f}$ est de 3. Dans ce cas particulier, le rayon de coupure est $r_c = 4$. Nous discuterons ce choix en fin de section. Le domaine continu est discrétisé en $N_x \times N_z = 1500 \times 30$ volumes de contrôle rectangulaires, avec des tailles de mailles plus petites proches la frontière inférieure. La pression d'entrée déterminée par l'équation d'état [37] est $p_{entree}(\rho = 0,05; T = 1,1) = 4,2 \times 10^{-2}$. La pression de sortie est fixée à 7×10^{-3} , ce qui correspond à un rapport des pressions $p_{entree}/p_{sortie} = 6$.

A l'état stationnaire, les masses volumiques dans chacun des plots sont données dans le tableau 5.3. Le libre parcours moyen $\bar{\lambda}$, qui donne une approximation de la distance moyenne parcourue par un atome entre deux collisions successives, est également présenté.

Plot #	Position x/H	Masse volumique ρ	Libre Parcours Moyen Réduit		Nombre de Knudsen $Kn = \frac{\bar{\lambda}}{L_c}$	
			$\bar{\lambda}_1/\sigma$	$\bar{\lambda}_2/\sigma$	$Kn(\bar{\lambda}_1)$	$Kn(\bar{\lambda}_2)$
#	—	—	$\bar{\lambda}_1/\sigma$	$\bar{\lambda}_2/\sigma$	$Kn(\bar{\lambda}_1)$	$Kn(\bar{\lambda}_2)$
1	0	0,05	3,25	4,50	0,002	0,002
2	205,76	0,0365	4,46	6,16	0,0025	0,003
3	329,22	0,0275	5,92	8,18	0,003	0,004
4	403,3	0,021	7,75	10,71	0,004	0,005
5	447,75	0,016	10,17	14,02	0,005	0,007
6	474,4	0,012	13,55	18,82	0,007	0,009
7	490,4	0,0092	17,68	24,51	0,009	0,012
8	500	0,007	23,23	32,15	0,011	0,016

Tableau 5.3 : Masse volumique moyenne, libre parcours moyen et nombre de Knudsen dans chacun des plots de la conduite.

Il est évalué, soit par la relation [14]

$$\bar{\lambda}_1 = \frac{\mu}{\rho} \sqrt{\frac{\pi m}{2k_B T}}$$

soit à l'aide de la formule [70]

$$\bar{\lambda}_2 = \frac{m}{\sqrt{2\pi\rho d^2}}, \quad d \simeq \sigma$$

dans lesquelles les valeurs sont dimensionnelles. Malgré les différences entre ces expressions, qui pour l'une intègre l'influence de la force de van der Waals, les valeurs reportées dans le tableau 5.3 nous donnent une première estimation de cette longueur caractéristique. Pour définir le régime d'écoulement, on a recours au nombre de Knudsen qui met en relation le libre parcours moyen et une longueur caractéristique de l'écoulement L_c :

$$Kn = \frac{\bar{\lambda}}{L_c}$$

Plus le nombre de Knudsen est faible, plus l'approche continue s'applique. Classiquement, les équations de la mécanique des fluides sont une bonne approximation du comportement moyen des atomes de fluide si $Kn < 0,001$. Dans l'intervalle $0,1 > Kn > 0,001$, des ajustements doivent généralement être menés, principalement au niveau des conditions aux limites. Dans la littérature, la valeur de L_c peut être choisie différemment selon les problèmes étudiés et les auteurs. Cette longueur peut faire référence à la hauteur de la conduite $L_c = 2H$ [22] ou plus généralement au diamètre hydraulique $L_c \equiv D_h = 4H$ [18]. Une autre façon de la définir peut être liée à une longueur non plus géométrique et caractéristique de l'écoulement local. En effet, si la variation relative locale d'une grandeur ϕ (température T , masse volumique ρ , pression p , ...) est du même ordre ou plus grande

par rapport à l'inverse de la longueur interne λ , $\|\nabla\phi\|/\|\phi\| \geq 1/\lambda$, les équations de Navier-Stokes ne sont plus valables et doivent être remplacées par des modèles plus sophistiqués. Dans ce travail, on se contente d'utiliser la définition classique et on choisit $L_c = D_h = 4H$, ce qui permettra de comparer à d'éventuels résultats expérimentaux.

Les profils de masse volumique, de vitesse et de température pour les différentes abscisses des plots sont présentés en figure 5.14. Comme cela est présenté dans l'élargissement de la

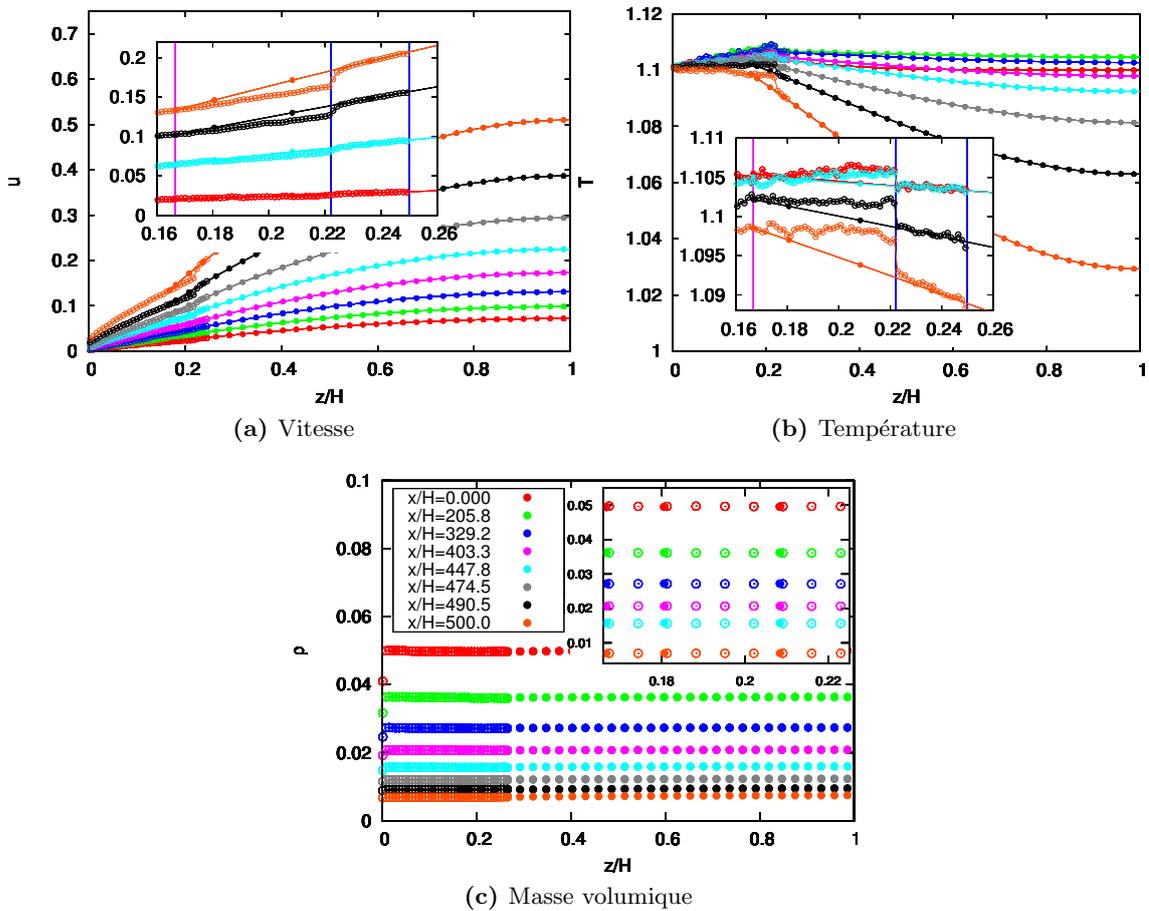


Figure 5.14 : Profils de vitesse, température et masse volumique pour les abscisses x_i des 8 plots. Les symboles vides correspondent à la solution dans le domaine microscopique et les symboles pleins avec les lignes continues indiquent la solution de la région continue.

figure 5.14c, nous constatons que l'imposition de la masse volumique dans chacun des plots fonctionne correctement : dans la zone de recouvrement, la valeur moyenne de la masse volumique dans les tranches horizontales du domaine microscopique est en bon accord avec la valeur issue du domaine continu. Les grandeurs moyennes calculées sur l'ensemble du domaine ont été présentés dans le tableau 5.3 et correspondent bien avec celles issues de la loi d'état pour des pression et température données.

En moyenne, les valeurs locales de vitesse et de température sont elles aussi correctement imposées dans la sous-couche C→M comprises entre $[\approx 0, 22; \approx 0, 25]$ (agrandissement des Figs. 5.14a et 5.14b). Néanmoins, le comportement de la solution moléculaire à la frontière inférieure de la zone C→M n'est pas parfaitement régulier. Pour les masses volumiques les plus faibles ($\rho < 0,01$), nous observons une variation soudaine de la vitesse au niveau de l'interface entre la couche C→M et la zone adjacente de relaxation. Un comportement similaire est également observé pour la température, cette fois pour tous les plots. Ces variations très soudaines semblent d'autant plus importantes que la masse volumique est faible. Le couplage devenant défaillant, les solutions hybrides obtenues sont donc non physiques.

Ce comportement non physique est robuste aux paramètres numériques comme le rayon de coupure, le pas de temps, le nombre d'itérations temporelles sur lesquelles les moyennes sont effectuées ou encore le nombre d'échantillons. L'origine de ces sauts de vitesse et de température peut s'expliquer en constatant que les zones de recouvrement (hauteur $56,8\sigma$) et de contrôle (hauteur 14σ) ont des dimensions comparables au libre parcours moyen $20 - 30\sigma$ du gaz (Tab. 5.3). Contrairement au cas de liquide où les collisions sont très fréquentes, la raréfaction locale du gaz dans la conduite peut être la source de ce problème.

5.4.3 Couplage pour une densité de gaz plus élevée

Nous avons testé une configuration dans laquelle le gaz est plus dense. La masse volumique à l'entrée du canal est augmentée à $\rho = 0,3$, de sorte que le gaz soit plus dense dans l'ensemble de la conduite. Afin de rester en phase gazeuse (voir Fig. 2.2, page 44), la température du mur est prise à $T_w = 1,5$. Le canal est de hauteur $H = 203,42$ et de longueur $L = 200H$. La pression à l'aval est $p_{sortie} = 0,11$ ce qui engendre un rapport de pression entre les sections d'entrée et sortie, $p_{entree}/p_{sortie} = 2$. Les plots moléculaires ont pour dimensions $(L_x \times L_y \times L_z) = (14,11 \times 13,85 \times 56,51)$. Le nombre d'atomes d'argon dans le premier plot moléculaire est $N = 3312$, ce qui correspond à la masse volumique dans la section d'entrée. Le rapport $H_C/H_{M,f}$ est toujours de 3.

Pour effectuer les simulations hybrides moléculaires et multi-échelles, nous avons conservé $n_b = 8$ plots moléculaires répartis selon une raison géométrique $r_b = 0,8$. D'après la répartition des pressions dans les plots à la solution stationnaire (Tab. 5.4), la masse volumique en sortie du canal est $\rho = 0,1$.

Pour cette configuration, les profils de vitesse sont correctement imposés dans la zone de recouvrement et nous n'observons pas de variation abrupte dans la zone moléculaire (voir Fig. 5.15b). Les profils sont en bon accord avec la solution purement continue. Pour la vitesse, les variations soudaines et chaotiques observées précédemment au niveau de l'interface entre les zones de relaxation et C→M (voir Fig. 5.14a) sont corrigées avec des

Plot #	Position x/H	Masse volumique ρ	Libre Parcours Moyen Réduit		Nombre de Knudsen $Kn = \frac{\bar{\lambda}}{L_C}$	
			$\bar{\lambda}_1/\sigma$	$\bar{\lambda}_2/\sigma$	$Kn(\bar{\lambda}_1)$	$Kn(\bar{\lambda}_2)$
1	0	0,3	1,08	0,75	0,0013	0,0009
2	50,62	0,264	1,31	0,91	0,0016	0,0011
3	91,11	0,203	1,59	1,11	0,002	0,0014
4	123,5	0,17	1,90	1,32	0,002	0,0016
5	149,4	0,144	2,24	1,56	0,003	0,0019
6	170,1	0,124	2,61	1,81	0,003	0,0022
7	186,7	0,108	2,99	2,08	0,004	0,0026
8	200	0,095	3,42	2,38	0,004	0,0029

Tableau 5.4 : Masse volumique moyenne, libre parcours moyen et nombre de Knudsen dans chacun des plots de la conduite.

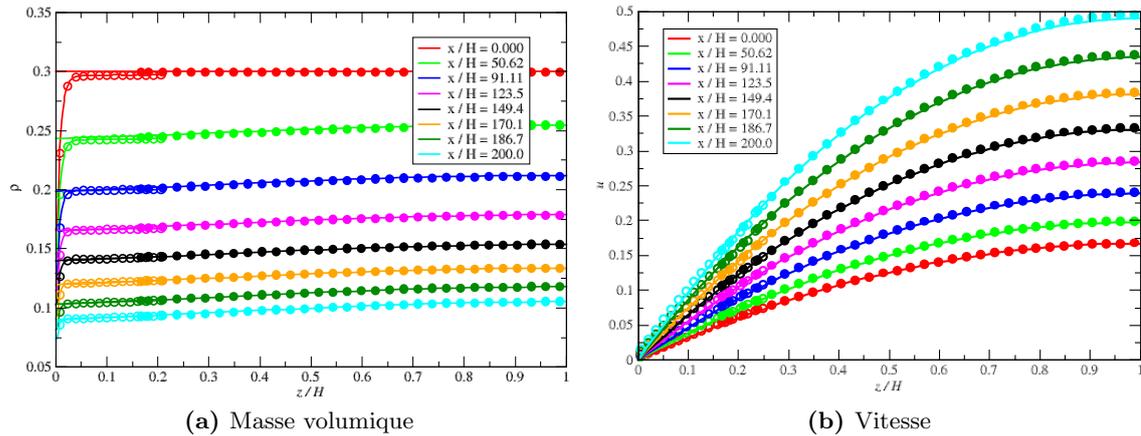


Figure 5.15 : Profils de masse volumique et de vitesse dans les sections positionnées aux abscisses x_i des 8 plots. Les lignes continues présentent les solutions purement macroscopiques provenant d'un modèle Volumes Finis, les symboles pleins indiquent les solutions continues du modèle hybride et les symboles creux celles de la région moléculaire. Les simulations sont effectuées sur 192 échantillons.

gaz plus denses : la masse volumique en sortie de conduite est maintenant plus de 10 fois supérieure à celle obtenue dans la précédente simulation (voir les tableaux 5.3 et 5.4).

En ce qui concerne la température, le problème est toujours présent. La figure 5.16 montre les profils de température pour les positions des 8 plots de dynamique moléculaire. Comme dans le cas plus dilué (voir Fig. 5.14b), le profil de température est correctement imposé dans la zone C→M comprise entre $[\approx 0,22; \approx 0,25]$, mais une discontinuité est toujours présente entre le bas de la zone C→M et le haut de la couche de relaxation. Ce saut reste robuste aux paramètres numériquement précédemment évoqués, mais aussi au coefficient de relaxation ξ présent dans l'équation de dynamique sous contrainte (2.15), page 48.

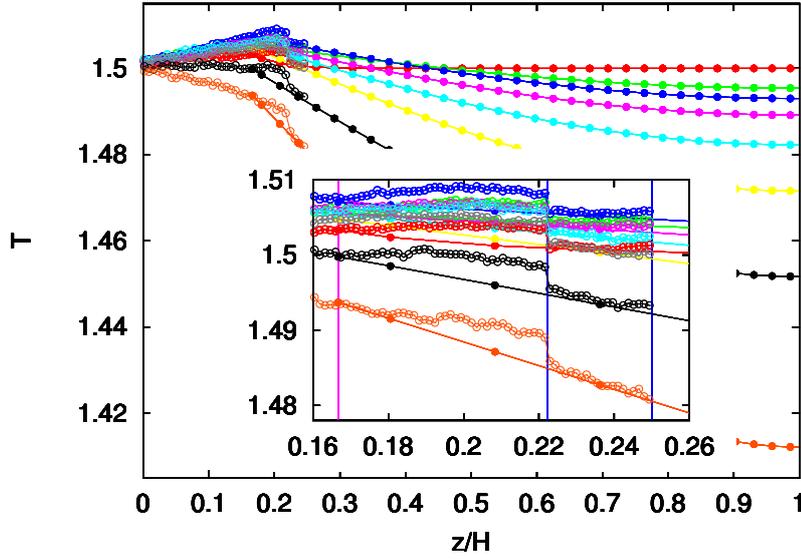


Figure 5.16 : Profils de température pour les différentes abscisses correspondant aux positions des 8 plots. Les symboles pleins indiquent les solutions du domaine continu du modèle hybride et les symboles creux celles de la région moléculaire. Les simulations sont effectuées sur 192 échantillons.

Finalement, l'action de contraindre la dynamique des particules pour des gaz peu denses semble engendrer une vraie difficulté pour le couplage hybride moléculaire.

5.4.4 Méthode de contrôle de la température pour les gaz

Pour pallier cette difficulté une approche similaire à celle utilisée pour contrôler la masse volumique a été adoptée : la température est toujours contrôlée dans la zone C→M, non plus à la valeur transmise par le domaine continu, mais à une valeur qui permet d'obtenir le bon profil de température en sortie de la sous-couche C→M. Pour cela, le saut de température T_{saut} entre les zones de relaxation et C→M est évalué puis soustrait au profil linéaire $T_{C \rightarrow M}$ imposé dans la couche C→M. En notant z_{int} la position de l'interface entre ces 2 zones, la valeur de T_{saut} est simplement donnée par

$$T_{saut} = \lim_{z \rightarrow z_r^-} T(z) - \lim_{z \rightarrow z_r^+} T(z)$$

Évidemment, l'une des difficultés consiste à reconstruire la fonction $T(z)$ à partir des valeurs discrètes. Nous avons donc choisi de construire deux fonctions distinctes par une méthode de régression linéaire des températures de part et d'autre de l'ordonnée z_{int} , c'est-à-dire l'une dans la région de relaxation et l'autre dans celle C→M. Nous utilisons ensuite l'équation de Langevin (cf. Eq. (2.16), page 49) dans laquelle le terme de friction stochastique \mathcal{R} est construit sur la température relevée $T_{C \rightarrow M} - T_{saut}$.

Comme évoqué précédemment, cette méthode permet de raccorder la solution continue à la solution moyenne moléculaire dans la zone de recouvrement, et non plus dans la couche $C \rightarrow M$. Avec cette correction, les profils de température obtenus à l'état stationnaire sont présentés en figure 5.17 et comparés à la solution purement Volumes Finis. Les solutions

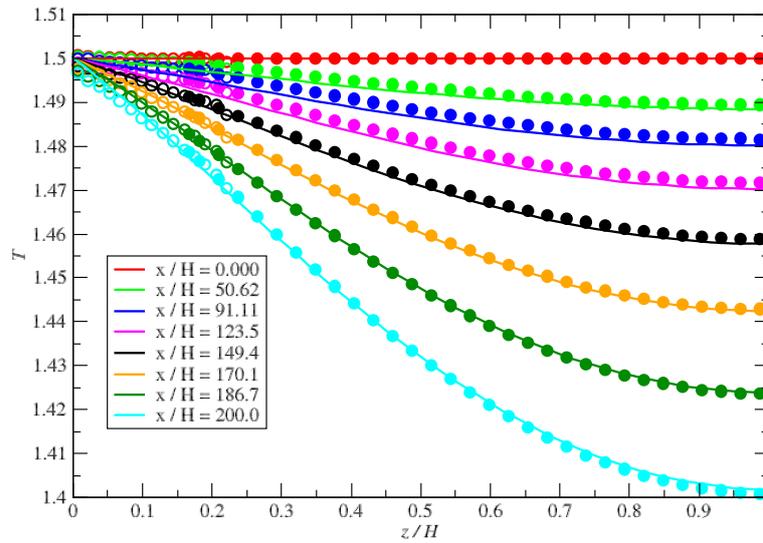


Figure 5.17 : Profils de température pour les différentes abscisses x_i des 8 plots. Les lignes continues indiquent les solutions purement Volumes Finis, les symboles pleins et creux sont les résultats des simulations hybrides multi-échelles pour respectivement les grandeurs des domaines continu et moléculaire. Les simulations sont effectuées sur 192 échantillons.

hybride et continue sont en bon accord et le réchauffement non physique lié au saut de température a été corrigé. Les champs de vitesse et de température entre la solution hybride et la solution purement macroscopique présentent des écarts maximum inférieurs à respectivement 1,2% et 0,1%. Ces écarts relatifs sur chacun des plots sont calculés avec la formule (5.2), page 109, et sont synthétisés dans le tableau 5.5 (quatrième colonne étiquetée MS). Les écarts à la solution stationnaire du modèle hybride analytique sont également présentés (troisième colonne).

5.4.5 Analyse de l'écoulement

L'analyse de la solution hybride moléculaire et multi-échelle indique que le glissement de vitesse (voir Fig. 5.15b) et le saut de température (voir Fig. 5.17) sont petits, inférieurs à 2,5%. Comme prévu pour des écoulements de fluides compressibles, l'écoulement est modérément refroidit de la section d'entrée à la sortie de la conduite, d'environ 6,6% de T_w (voir Fig. 5.17). Pour les écoulements compressibles dans les micro-/nano-conduites, deux contributions s'opposent dans le bilan thermique (cf. Eq. (2.9)) : d'une part le terme de production de chaleur lié à la dissipation des frottements visqueux $[\bar{\tau} : \nabla \mathbf{u}]$ et d'autre

Plot	Volume Finis (VF)		Modèle analytique		Mur Stochastique (MS)	
	u/\bar{u}	T/\bar{T}	u/\bar{u} (e_{VF})	T/\bar{T} (e_{VF})	u/\bar{u} (e_{VF})	T/\bar{T} (e_{VF})
1	0,1673	1,500	0,168 (-0, 55%)	1,500 (0, 00%)	0,168 (-0, 67%)	1,500 (0, 00%)
2	0,1980	1,488	0,199 (-0, 56%)	1,489 (-0, 01%)	0,200 (-1, 19%)	1,489 (-0, 06%)
3	0,2386	1,480	0,240 (-0, 55%)	1,480 (-0, 01%)	0,241 (-1, 12%)	1,487 (-0, 10%)
4	0,2833	1,470	0,285 (-0, 55%)	1,470 (-0, 01%)	0,287 (-1, 13%)	1,472 (-0, 11%)
5	0,3307	1,458	0,333 (-0, 54%)	1,458 (-0, 01%)	0,334 (-0, 93%)	1,459 (-0, 08%)
6	0,3811	1,442	0,383 (-0, 52%)	1,443 (-0, 02%)	0,385 (-0, 98%)	1,443 (-0, 03%)
7	0,4340	1,424	0,436 (-0, 48%)	1,424 (-0, 03%)	0,439 (-1, 04%)	1,424 (0, 02%)
8	0,4900	1,402	0,492 (-0, 28%)	1,403 (-0, 06%)	0,496 (-1, 14%)	1,401 (0, 06%)

Tableau 5.5 : Vitesse horizontale réduite et température réduite en $z = H$ aux positions des différents plots, pour les solutions provenant d'un modèle purement Volumes Finis (VF) et celles issues des modèles multi-échelles hybrides, soit analytique ou moléculaires pour des murs stochastiques (MS). La notation e_{VF} indique l'écart relatif par rapport à la solution référence (Volumes Finis).

part le travail des forces de pression $[-(\partial \ln \rho)/(\partial \ln T) \mathbf{u} \cdot \nabla p]$ qui prélève une partie de l'énergie. Dans le cas de micro-conduites :

1. La contribution de pression est généralement d'intensité plus importante que le terme de dissipation visqueuse : la température décroît en s'éloignant de la section d'entrée (voir Fig. 5.17).
2. La dissipation visqueuse participe principalement au chauffage au voisinage des parois (gradients importants) alors que l'effet endothermique du travail des forces de pression est plutôt localisé au centre de la conduite (vitesse est la plus grande). Il résulte un léger gradient de masse volumique des parois vers le milieu du canal (voir Fig. 5.15a).

La baisse importante de la masse volumique est provoquée par les valeurs imposées des pressions, p_{entree} et p_{sortie} , dans les sections d'entrée et de sortie (voir Fig. 5.15a). Il est intéressant de constater que le rapport de 3 (Tab. 5.4), entre les masses volumiques à l'entrée et la sortie de la conduite, est plus grand que la valeur attendue $p_{entree}/p_{sortie} = 2$ que nous aurions eu pour un modèle de gaz parfait isotherme ; la prise en compte de la décroissance de la température viendrait encore réduire ce rapport. Les effets correctif à la loi des gaz parfait sont donc non négligeable dans la loi d'état du gaz de Lennard-Jones. Enfin, l'augmentation de la vitesse le long de la conduite (voir Fig. 5.15b) est bien proportionnelle à la diminution de la masse volumique comme la conservation du débit massique l'impose.

5.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons implémenté un modèle hybride et multi-échelle pour simuler des écoulements non isothermes, compressibles ou non, avec éventuellement de la condensation au voisinage immédiat des parois.

Pour chacune de nos simulations, nous avons recherché la meilleure distribution des plots pour que le modèle multi-échelle soit le moins coûteux possible, tout conservant une précision suffisante. Pour cela, nous avons développé des modèles hybrides analytiques dans lesquels les simulations moléculaires ont été substituées par des fonctions analytiques couplées avec le modèle continu. L'utilisation de distributions non-uniforme des plots s'est avérée le plus pertinent pour nombre de nos simulations multi-échelles.

Les écoulements et transferts thermiques issus des simulations de notre modèle multi-échelle hybride moléculaire ont été également étudiés pour en extraire les caractéristiques principales.

Pour l'écoulement d'argon liquide, le chauffage du fluide est produit par les effets visqueux. Le glissement de la vitesse à la paroi est négligeable et le saut relatif de la température est modéré. Ce résultat est confirmé par l'étude des longueurs de glissement thermique et dynamique sur l'ensemble des plots moléculaires.

La seconde simulation porte sur l'écoulement d'argon gazeux dans une micro conduite dont les parois sont portées à une température inférieure à celle de changement de phase. Il résulte un film fin de condensat qui se développe le long des parois. La mesure de l'épaisseur du film liquide montre qu'il a tendance à s'affiner en s'éloignant de la section d'entrée de la conduite, malgré la diminution régulière de la température du fluide. Ce comportement trouve son explication dans le fait que la température de changement de phase n'est pas constante sur tous les plots et qu'elle décroît plus vite que ne décroît la température du liquide à la paroi.

Les dernières simulations concernent des écoulements d'argon gazeux compressibles. Le couplage hybride moléculaire sur les plots a montré qu'il était difficile de contrôler la vitesse et surtout la température lorsque la densité du fluide est faible. Pour remédier à cette difficulté, une variante de notre méthode de contrôle de la température a été utilisée pour garantir la continuité entre les grandeurs continues et celles moyennes issues des variables microscopiques. Des travaux complémentaires sont encore nécessaires pour améliorer notre modèle pour les faibles densités de fluide.

Conclusion et Perspectives

Dans les conduites de très faible diamètre hydraulique, les interactions du fluide avec la paroi jouent un rôle déterminant sur la dynamique du fluide et les transferts de chaleur entre l'entrée et la sortie. Bien que de nombreux modèles existent déjà dans la littérature pour représenter ces interactions par des approches continues, ils ne rendent pas nécessairement compte suffisamment finement de l'ensemble des phénomènes qui peuvent avoir lieu à l'échelle moléculaire (physisorption, changement des propriétés des parois par des films de très fines épaisseurs, ...)

Pour répondre à cette problématique, une méthode hybride multi-échelle pour la simulation d'écoulements fluides et des transferts thermiques dans des micro ou nano conduites de grandes longueurs a été développée dans cette thèse. Pour cela, l'interface entre le fluide et la paroi a été discrétisée en domaines élémentaires dans lesquels une modélisation dédiée à la représentation des très petites échelles a été adoptée. Ces sous-domaines sont tous connectés au cœur de la région fluide qui est modélisé par une approche apte à traiter les grandes échelles de variation des grandeurs physiques. La communication entre les grandes et petites échelles constitue l'aspect hybride de notre méthode. Dans ce travail, les équations continues de Navier-Stokes et de l'énergie, utilisées dans le cœur de l'écoulement, ont été couplées à différentes simulations locales par dynamique moléculaire pour représenter avec précision les interactions entre le fluide et les atomes du mur constituant les parois de la conduite.

Le travail contenu dans ce mémoire présente les différentes méthodes utilisées dans la construction de notre modèle hybride multi-échelle, l'influence des paramètres numériques et physiques dont ces méthodes dépendent, et enfin un volet de validation construit autour de situations académiques ou plus appliquées.

Après avoir présenté la méthode microscopique de dynamique moléculaire dans le premier chapitre, l'approche continue et le couplage spatio-temporel avec le modèle particulaire ont été développés au cours du deuxième chapitre. Les variables primaires de vitesse et de température, ainsi que la masse volumique, sont échangées et synchronisées de sorte

à assurer la continuité de leurs valeurs ainsi que celles des flux associés (masse, quantité de mouvement, énergie). Une large partie de ce chapitre est dédiée à la façon dont les grandeurs moyennes microscopiques sont contrôlées aux valeurs issues du domaine continu. Cette étape est le point clef de la méthode hybride moléculaire.

Le troisième chapitre débute avec la présentation du modèle hybride analytique qui consiste à substituer les résultats issus de la dynamique moléculaire par une fonction analytique approchant la solution physique. Ce modèle est très utile car il nous a permis d'étudier les propriétés de convergence de la méthode de couplage hybride, mais également de paramétrer et d'initialiser les simulations multi-échelles présentées à la fin du mémoire. Les difficultés inhérentes au couplage hybride ont également été illustrées. L'une des principales a été de contrôler simultanément les grandeurs moyennes microscopiques, que sont la vitesse et la température, aux valeurs désirées. Cela a finalement été réalisé après une étude paramétrique des valeurs des coefficients de relaxation des contraintes dynamique et thermique.

Le quatrième chapitre est dédié à la validation de la méthode hybride moléculaire, par la simulation de problèmes dont les difficultés sont croissantes. Le couplage ne s'effectuant que sur un unique plot, les écoulements et les transferts sont supposés être établis.

L'aspect multi-échelle a été développé au cinquième et dernier chapitre. Après la présentation de la méthodologie, des simulations ont été réalisées pour des écoulements et des transferts de chaleur dans des micro-conduites de grandes extensions. Ces simulations ont porté à la fois sur des écoulements de fluides monophasiques, compressibles ou incompressibles, mais également sur un écoulement de gaz avec condensation à la paroi de la conduite.

L'objectif, qui était de concevoir un modèle hybride multi-échelle pour la simulation des écoulements dans des micro-conduites, a nécessité les apports originaux suivants :

1. Un modèle hybride analytique a été introduit et substitué aux coûteuses simulations de dynamique moléculaire. Il a permis d'étudier la convergence du couplage de la méthode hybride, de déterminer le nombre et la répartition des domaines moléculaires situés le long de la paroi pour obtenir une solution multi-échelle précise, et d'initialiser intelligemment les simulations hybrides moléculaires.
2. Une discrétisation de la paroi des conduites de grande extension a été réalisée par des plots dans lesquels, soit des simulations moléculaires ont été menées, soit des fonctions analytiques ont été utilisées. Le couplage entre le cœur de l'écoulement et les plots a nécessité une méthode d'interpolation linéaire par morceaux des données issues des plots pour reconstruire les informations manquantes du domaine continu. Comme mentionné auparavant, le nombre et leur distribution le long du canal ont été déterminés grâce au modèle hybride analytique.
3. Un algorithme permettant de piloter la valeur de la masse volumique dans la zone

moléculaire a été proposé. Il est basé sur une évaluation de la masse volumique et son contrôle dans deux zones distinctes.

Néanmoins, même si l'objectif principal a été atteint, certains points nécessitent encore une réflexion afin d'améliorer la méthode hybride multi-échelle.

1. En premier lieu il s'agira de rendre autonome la méthode hybride multi-échelle.

Dans sa version actuelle, notre méthode dépend de solutions analytiques pour positionner les plots : leur nombre et leur distribution le long de la paroi nécessitent de disposer d'une représentation analytique de la physique contenue dans chacun d'eux. Pour s'en affranchir, un couplage hybride plus sophistiqué pourrait être développé. Il serait basé sur des plots "intelligents", capables de s'adapter "automatiquement" à la nature locale de l'écoulement, sur un principe similaire aux maillages adaptatifs utilisés pour résoudre les équations de la mécanique des milieux continus.

La méthode hybride moléculaire requière également que les propriétés du fluide soient identiques entre les modélisations particulaire et continue. Pour la simulation de dynamique moléculaire, l'utilisation du potentiel d'interaction de Lennard-Jones entre particules impose d'utiliser une loi d'état et des propriétés macroscopiques conformes à celles du fluide modélisé à l'échelle moléculaire. Bien qu'il existe dans la littérature des tables et des corrélations pour les "fluides de Lennard-Jones", certaines propriétés peuvent s'avérer extrêmement sensible aux paramètres des simulations : la ligne de coexistence liquide/gaz du diagramme de phase dépend par exemple fortement de la valeur du rayon de coupure. Pour ne pas utiliser de fluides modèles, des potentiels d'interaction réalistes, compatibles avec les lois macroscopiques et la physique étudiée, devront ultérieurement être identifiés et introduits dans notre méthode hybride multi-échelle, par exemple pour traiter des écoulements d'eau.

2. Actuellement, le contrôle de la masse volumique ne s'effectue que sur le domaine moléculaire, sans aucune rétroaction possible vers la région continue. Dans les travaux présentés dans ce mémoire, ce couplage ne pose pas vraiment de problèmes car les densités sont quasiment constantes dans la zone de recouvrement : une rétroaction de la masse volumique calculée à l'échelle moléculaire ne modifierait donc pas la valeur continue. La prise en compte du couplage du modèle particulaire vers celui continu est en réalité très délicate. A priori, cela nécessiterait d'imposer une condition aux limites de pression sur une partie de la frontière du domaine continu. Il faut remarquer que cette condition de pression pourrait provoquer un faible débit incompatible avec le modèle moléculaire qui n'autorise aucun flux de matière à travers sa face supérieure (conditions périodiques dans les directions pa-

rallèles à la paroi). Une réflexion approfondie devra donc être menée sur ce sujet.

3. Le contrôle des grandeurs moléculaires moyennes à des valeurs imposées soulève des difficultés lorsque la densité du gaz devient faible : des discontinuités de vitesse ou de température apparaissent en sortie de la zone de contrôle. Une solution a été proposée pour contourner ce problème mais elle manque probablement de robustesse. Une voie d'amélioration pourrait être de dissocier les zones de mesure et de contrôle comme cela a été proposé pour piloter la masse volumique.
4. Enfin, une attention particulière devra être portée sur la conservation globale de la masse lors de l'utilisation du modèle multi-échelle. En effet, alors que le débit est parfaitement conservé dans la région continue, ce n'est plus le cas entre les plots. Pour des hauteurs de plots de l'ordre de $1/10$ de la taille du domaine continu, nous avons montré qu'une erreur inférieure au pourcent est commise. Naturellement cette erreur augmentera très probablement avec la taille relative du plot. Plusieurs approches peuvent être envisagées pour répondre à ce problème. La première consisterait à s'inspirer de la méthode intitulée "Internal Multiscale Method" (IMM) décrite en introduction de ce travail pour instaurer un couplage entre plots et contraindre le débit à être le même dans chacun des plots et donc globalement dans l'ensemble de la conduite. La seconde approche consisterait à étendre, entre les plots, la zone continue jusqu'à la paroi et d'instaurer une communication des champs de vitesse entre les modèles sur la hauteur de chaque plot. Dans un premier temps, la transmission des informations ne pourraient ne se faire que du plot vers le domaine continu. Ensuite un vrai couplage dans les deux sens pourrait être imaginé, ce qui impliquerait de supprimer au niveau moléculaire les conditions aux limites de type périodique dans les directions de l'écoulement, ce qui n'est pas une tâche aisée.

Table des figures

0	Introduction	1
1	Schémas des différentes méthodes hybrides multi-échelles adaptées aux écoulements de fluides dans une micro-/nano-conduites (a) par : (b) décomposition du domaine, (c) la méthode HMM, (d) la méthode IMM et (e) la méthode proposée dans ce travail	6
1	Description microscopique	9
1.1	Potentiel de Lennard-Jones et force en unités réduites en fonction de la distance intermoléculaire réduite.	12
1.2	Représentation graphique des trois types de moyenne. Un domaine moléculaire 2D rectangulaire est dessiné à 4 instants (t_1, \dots, t_4) et pour 3 échantillons (E_1, E_2, E_3). Ce domaine est également sous-divisé en 4×6 sous-domaines rectangulaires. Trois types de moyennes peuvent être calculés en fonction de l'espace (sur une ou plusieurs sous-divisions du domaine), du temps ou des échantillons, ou bien toute combinaison de ces variables.	19
1.3	Conditions périodiques aux limites. La boîte de simulation est représentée au centre en gris. Les boîtes images sont sur fond blanc. Une molécule (rouge) qui quitte le domaine de simulation est ré-introduite à l'opposé. . .	21
1.4	Calcul des interactions pour toutes les paires	25
1.5	Calcul des interactions : (a) Illustration de la sous division cartésienne en deux dimensions. La molécule noire de la boîte centrale interagit potentiellement avec les molécules des boîtes voisines grisées. (b) Sous division pour le cas 3D.	26
1.6	Calcul des interactions : liste des voisins de la molécule centrale (noire). Les particules grises ne sont pas enregistrées dans la liste des voisins. Les particules bleues interagissent avec la particule noire pendant que les vertes sont en réserve.	27

1.7	(a) Potentiels tronqués. (b) Forces tronquées.	28
1.8	Représentation d'un mur stochastique (a) : en bleu, particule avant l'interaction, en rouge, la particule qui remplace celle qui passe à travers le mur. La flèche rouge représente la trajectoire de la particule avant l'interaction tandis que les flèches en bleu présentent les différentes trajectoires possibles. Mur spéculaire (b) : la flèche bleu présente le trajectoire spéculaire. Dans ces deux cas, l'approximation qui positionne la molécule après interaction à la verticale (pointillés noirs) de sa position à la fin du pas de temps (pointillés rouges) est justifiée si le pas de temps est suffisamment petit.	30
1.9	Représentation d'un mur atomique et de la nature des interactions.	31
1.10	Mur d'Einstein.	32
1.11	Mur fantôme.	33
1.12	Vision simplifiée d'un programme de dynamique moléculaire.	34
2	Modélisation hybride Microscopique/Macroscopique	35
2.1	Un schéma général pour la décomposition du domaine en deux sous-domaines. Le domaine moléculaire (Ω_M) et le domaine de continu (Ω_C) coïncident dans la zone de recouvrement (Ω_0). La frontière indiquée par l'arrête rouge est la limite supérieure du domaine moléculaire.	36
2.2	Diagramme de phase d'un fluide de Lennard-Jones. Les axes sont présentés en unité réduite. Cette image est tirée de l'article de Lin et al. [40]. Les cercles creux représentent les points dans le diagramme (ρ, T) pour lesquels les simulations ont été faites. Les courbes pleines indiquent la courbe de coexistence de phases et la courbe de limite de stabilité (ligne spinodale pointillée) pour l'état d'équilibre liquide-gaz. Les étiquettes sont ajoutées à côté des cercles creux pour permettre d'identifier l'état thermodynamique de chaque point (s pour solide, l pour liquide, g pour gaz, m pour métastable et u pour instable).	44
2.3	Représentation de la décomposition de domaine pour la méthode de couplage. Le domaine moléculaire (Ω_M) et le domaine de continu (Ω_C) coïncident dans la zone de recouvrement (Ω_0). Des descriptions atomistiques (b) sont utilisées pour modéliser le mur et le fluide adjacent : le domaine de la simulation moléculaire de hauteur H_M comprend l'épaisseur du mur $H_{M,w}$ et de la région fluide $H_{M,f}$ ($H_{M,w} + H_{M,f} = H_M$).	45
2.4	Exemple de la zone de recouvrement de la hauteur $H_O = 4\Delta z$, garantissant la communication entre la région moléculaire de hauteur H_M et le domaine continu recouvert localement par un maillage de triangles.	46

2.5	Élargissement de la zone de recouvrement de la figure 2.4 autour de la couche C→M. Une couche supplémentaire étiquetée C' →M', de la hauteur Δz et centrée sur la face inférieure de la couche C→M (triangle), est introduite afin de gérer les contraintes dynamique et thermique dans la couche moléculaire C→M. Les valeurs de vitesse et température aux ordonnées z_f et z_c sont calculées à partir des valeurs et de leurs gradients au point de collation \mathbf{x}_K (cercle plein bleu).	48
2.6	Domaine d'intégration (bleu) pour la force F_m . Le nombre de particules se trouvant dans cette zone est $\iint 2\pi\rho_n g(r)xdxdz$ avec ρ_n la masse volumique moyenne et $g(r)$ la fonction de distribution radiale.	52
2.7	Comparaison de la force $F^w(r_w)$ simulée en dynamique moléculaire sur une particule et celle évaluée avec la fonction de distribution radiale de Morsali et al. [47] pour (a) le cas supercritique de masse volumique $\rho = 0,6$ et de température $T = 1,8$; (b) pour le cas $\rho = 0,81$ et $T = 1,1$.	53
2.8	Schéma de couplage temporel ou itératif. Toutes les grandeurs grisées sont connues. Au cours de l'intégration temporelle au niveau moléculaire (M) entre $t^{n+1/2}$ et $t^{n+3/2}$, la dynamique sous contrainte est utilisée dans la couche C→M de sorte que la moyenne de la vitesse et sa température au niveau microscopique convergent vers les valeurs issues de l'approche macroscopique du domaine continu (C) à l'instant $t^n : (\mathbf{u}, T)_{C \rightarrow M}^{(n)}$. Puis les valeurs moyennées, calculées à l'instant t^{n+1} dans la couche M→C, $(\mathbf{u}, T)_{M \rightarrow C}$, sont transférées au domaine continu par le biais de conditions aux limites à l'instant t^{n+1} .	55
3 Étude et paramétrage des schémas numériques		59
3.1	Convergence itérative de l'algorithme de couplage pour la méthode hybride analytique avec le rapport des hauteurs $H_{M,f}/H_C = 1$ (a) Approximation linéaire. (b) Approximation quadratique; seulement les 5 premières et les 3 dernières itérations sont illustrées.	61
3.2	Convergence itérative de l'algorithme de couplage pour la méthode hybride analytique avec le rapport des hauteurs $H_{M,f}/H_C = 1$ et en supposant un profil de Poiseuille dans la zone moléculaire. Seules les 5 premières et les 3 dernières itérations sont illustrées.	62
3.3	Solution stationnaire du modèle hybride linéaire pour différents rapport $H_C/H_{M,f}$ allant de 1 à 512. La boîte encapsulée montre la diminution quadratique de l'erreur relative en norme L_2 par rapport à la solution de Poiseuille analytique en fonction du rapport H'_M/H .	63

3.4	Profil de masse volumique normalisé par la densité initiale dans une boite de Dynamique Moléculaire, Murs seuls et Murs+Force F^w issue de [76]	64
3.5	Cas d'une phase liquide. Profils hybrides de vitesse (a) et température (b) et (c) pour différentes valeurs du paramètre ξ	66
3.6	Cas d'une phase gazeuse. Profils hybrides de vitesse (a) et température (b) et (c) pour différentes valeurs du paramètre ξ	67
3.7	Écart relatif en norme L_2 pour la variable vitesse et température dans la zone de recouvrement $z/H \in [0,375 : 0,5625]$, pour $\alpha_f = 1$: pour la phase liquide (a) et gazeuse (b)	67
3.8	Schématisation des deux types de couplage : constant (bleu) et linéaire (rouge). La courbe noire représente la solution souhaitée, figure inspirée de [65]. Le type de couplage linéaire a été initié en 2010 par Sun et al.	68
3.9	Comparaison entre des contraintes constantes et linéaires simulées par le modèle hybride Dynamique Moléculaire/Volumes Finis : (a) écoulement de Couette, (b) Conduction et (c) écoulement de Poiseuille.	69
3.10	Comparaison du type de couplage simulé par dynamique moléculaire avec le thermostat 3D (bleu) et 1D (rouge) pour le problème conduction. La ligne continue noire dans la figure encapsulée est le profil désiré.	70
3.11	Les profils de la masse volumique ρ dans le domaine moléculaire dans le cas de l'écoulement de Poiseuille avec deux valeurs différentes de la vitesse maximale u_{max} . Les symboles pleins présentent les profils sans contrôle de la masse volumique : la masse volumique initiale est choisie pour correspondre à celle désirée ρ_{ref} . Les symboles creux présentent les profils lorsque le contrôle est appliqué dans la zone de recouvrement tel que $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M} = \rho_{ref}$. Des valeurs supplémentaires sont données dans la tableaux 3.1. La figure encapsulée présente un zoom du profil dans la partie supérieure de la zone de recouvrement.	71
3.12	Profil de la masse volumique à l'interface liquide/gaz. Les symboles bleus représentent la masse volumique moléculaire locale et la ligne continue indique l'approximation via l'équation (3.3). L'interprétation graphique des coefficients a , b , c et d de la fonction d'approximation (3.3) sont également données.	74

3.13	Problème de condensation. Les profils de masse volumique dans le domaine moléculaire, pour l’algorithme d’insertion/retrait appliqué toutes les Δ itération(s). La masse volumique ciblée ρ_{target} est indiquée par la ligne discontinue. (a) : L’évaluation et le contrôle de la masse volumique sont faits dans la zone de contrôle ($z/H_{M,f} \in [0, 9; 1]$). (b) : L’évaluation de la masse volumique a lieu dans la sous-couche C→M ($z/H_{M,f} \in [0, 8; 0, 9]$) tandis que la gestion de masse volumique est toujours réalisée dans la zone de contrôle. Les barres d’erreur représentent les écarts types calculés sur l’ensemble des 64 échantillons. Certaines quantités extraites à partir de ces courbes sont précisées dans le tableau 3.2.	75
3.14	Problème d’évaporation. Même légende que la figure 3.13. Ici, les barres d’erreur représentent des écarts types calculés sur 32 échantillons. Certaines quantités extraites à partir de ces courbes sont données dans le tableau 3.3.	78
4	Simulations hybrides sur un unique ”plot” moléculaire	81
4.1	Schéma de la conduite étudiée. Le cœur de l’écoulement (partie bleue) est gouverné par les équations de Navier-Stokes et de l’énergie. Des descriptions atomistiques sont utilisées pour modéliser le mur et le fluide adjacent (plots rectangulaires en gris).	81
4.2	Configuration utilisée pour le problème de Couette transitoire	82
4.3	(a) Profil de vitesse $u(z/H)/u_0$ pour différents instants pour un maillage structuré. Les lignes correspondent aux solutions analytiques, les symboles pleins aux solutions continues et les symboles creux aux solutions moléculaires avec des barres d’erreur représentatives des écarts types par rapport à la moyenne des $N_E = 40$ échantillons. (b) Évolution temporelle de $u_{M \rightarrow C}/u_0$ pour la solution hybride (courbe avec les barres d’erreurs) et pour la solution analytique.	85
4.4	Similaire à la figure 4.3 pour un maillage non structuré.	86
4.5	Similaire à la figure 4.3 pour la configuration gazeuse	87
4.6	Configuration utilisée pour le problème de diffusion thermique.	88
4.7	(a) Profil de température $T(z)/T_1$ à différents instants pour un maillage non-structuré. Les lignes correspondent aux solutions analytiques, les symboles pleins aux solutions continues et les symboles creux aux solutions moléculaires avec des barres d’erreur représentatives des écarts types par rapport à la moyenne des $N_E = 40$ échantillons. (b) Évolution temporelle de $T_{M \rightarrow C}$ pour la solution hybride (courbe avec les barres d’erreur) et pour la solution analytique.	89

4.8	(a) Similaire à la figure 4.7 pour le gaz et pour un maillage structuré	89
4.9	Configuration utilisée pour l'écoulement de Poiseuille plan.	90
4.10	Convergence itérative de l'algorithme de couplage pour la méthode hybride développée lorsque la solution initiale est isotherme au repos (a) Profil de vitesse. (b) Profil de température. Les 5 premières et la dernière itération sont seulement présentées. Les symboles représentent la solution hybride (rouge pour le moléculaire et bleu pour le continu). Les symboles noirs présentent la solution initiale du domaine moléculaire. La ligne continue en noir correspond à la solution analytique.	92
4.11	Évolutions de la vitesse (a) et de la température (b) obtenues par la solution hybride dans la sous couche d'échange M→C, au cours des itérations pour le problème de Poiseuille lorsque la solution initiale est isotherme au repos.	93
4.12	Convergence itérative de l'algorithme de couplage pour la méthode hybride pour $H_{M,f}/H_C = 1$ lorsque la solution est utilisée avec la solution hybride analytique. Les profils de vitesse et de température sont respectivement donnés en Figs. (a) et (c), tandis que les évolutions des valeurs échangées sont montrées en Figs. (b) et (d)	94
4.13	Cas de condensation : $\rho_{\text{ref}} = 0,05$, $T_w = 0,925$, $H_{M,f} = 139,21$, $\partial_x p = -3,11 \times 10^{-6}$. Profil de vitesse (a) et de température (b). Les symboles pleins correspondent aux solutions continues et les symboles creux aux solutions moléculaires avec des barres d'erreur représentatives des écarts types par rapport à la moyenne des $N_E = 64$ échantillons tandis que les lignes continues représentent les solutions analytiques en monophasique et diphasique. (c) Profils de masse volumique dans le domaine moléculaire.	96
4.14	Cas d'évaporation : $\rho_{\text{ref}} = 0,6$, $T_w = 1,5$, $H_{M,f} = 49,72$, $\partial_x p = -9,86 \times 10^{-5}$. Profil de vitesse (a) et de température (b). Les symboles pleins correspondent aux solutions continues et les symboles creux aux solutions moléculaires avec des barres d'erreur représentatives des écarts types par rapport à la moyenne des $N_E = 32$ échantillons. Les lignes continues représentent les solutions analytiques en monophasique et diphasique. (c) Profils de la masse volumique dans le domaine moléculaire.	98

5.1	Schéma de la conduite de demi-hauteur H et de longueur L . La région fluide de hauteur H_C est gouvernée par les équations de Navier-Stokes et de l'énergie. Des descriptions atomistiques sont utilisées pour modéliser le mur et le fluide adjacent (plots rectangulaires numérotés de 1 à 4 et de hauteur H_M).	102
5.2	Écart relatif sur tout le domaine fluide de la vitesse et de la température entre la méthode hybride analytique linéaire et une résolution complète en Volume Finis. Le nombre n_b de plots répartis uniformément le long de la micro conduite est présenté sur l'axe des abscisses. La figure encapsulée montre l'écart relatif calculé dans la région d'entrée, ici pour $x/H \leq 50$. . .	105
5.3	Écarts relatifs sur l'ensemble de l'écoulement entre les méthodes hybride analytique linéaire et Volumes Finis, en fonction de la raison géométrique n_b (cf. Eq. (5.1)) et du nombre de plots n_b . Les graphes encapsulés montrent les écarts relatifs calculés dans la région d'entrée uniquement ($x/H \leq 50$). .	107
5.4	Profils de vitesse et de température dans les 8 sections x_i des plots moléculaires d'un écoulement monophasique anisotherme. Les parois sont modélisés par des murs stochastiques. Les valeurs moyennes sont obtenues sur 1 million de pas de temps microscopiques et $N_E = 128$ échantillons. Les symboles creux et pleins représentent respectivement la solution hybride dans les domaines moléculaire et continu. Les lignes continues indique la solution purement Volumes Finis.	109
5.5	Même légende que la figure 5.4 mais pour un modèle de mur atomique. La solution Volumes Finis n'est pas indiquée.	110
5.6	Propriétés à l'interface liquide/solide aux 8 abscisses réduites x_i/H des plots moléculaire pour un écoulement dans un micro-canal avec la méthode hybride moléculaire et des murs atomiques. Les valeurs de glissement sont déduites de la régression linéaire des profils dans le domaine moléculaire sur l'intervalle $0 < z < H_{M,f}/5$. La demie-longueur des barres d'erreur représente l'écart type de la pente de régression (indication approximative de l'intervalle de confiance).	111
5.7	Profils réduits de masse volumique et de vitesse (axe de gauche), et de température (axe de droite) pour une simulation hybride moléculaire sur un unique plot, avec $\partial p/\partial x = 3,11 \times 10^{-6}$. Les symboles creux correspondent au domaine moléculaire tandis que les symboles pleins et les lignes sont les solutions continus. La figure encapsulée présente un grossissement autour de l'interface. Des régressions linéaire et quadratique sont respectivement effectuées sur les profils de vitesse et température pour approcher la position de l'interface δ (lignes pointillées).	115

5.8	Température de changement de phase $T_{l/g}$ en fonction de la température d'échange $T_{C \rightarrow M}$ calculée pour 6 valeurs du gradient de pression $\partial p / \partial x = -(0,9; 1; 1,05; 1,1; 1,15; 1,2) \times 3,11 \times 10^{-6}$	116
5.9	Erreurs relatives en norme L_2 dans la région d'entrée ($x/H < 300$) entre la solution obtenue avec une distribution de plots donnée et celle déterminée avec un nombre maximal de plots, $n_b = N_x$	117
5.10	Les profils de la vitesse et température pour les abscisses x_i des plots moléculaires. Deux illustrations du couplage sont présentées via les agrandissements de la zone de recouvrement pour les profils du 5ème plot. Les simulations sont effectuées sur 192 échantillons.	118
5.11	Comparaison de l'épaisseur de condensat obtenue aux 10 abscisses x_i des plots, entre la simulation multi-échelle hybride moléculaire (traits bleus) et le modèle multi-échelle hybride analytique (traits noirs). Les traits rouges sont les épaisseurs de condensat obtenues avec le modèle analytique (5.6), dans lequel la longueur de glissement thermique L_{s-T} et la température de changement de phase $T_{l/g}$ ont été extraites de chacun des plots de la simulation multi-échelle hybride moléculaire. Les barres d'erreur du modèle moléculaire sont définies par $[\min_i \delta_i; \max_i \delta_i]$ pour chaque position des plots. L'épaisseur de condensat δ_i est identifiée par l'une des trois méthodes suivantes : les changements des pentes des profils de vitesse ou de température, ou l'approximation en tangente hyperbolique du profil de masse volumique.	119
5.12	Variation des températures de glissement $T_f = T(z = 0^+)$ et de changement de phase $T_{l/g}$ en fonction de la température de glissement $T(z = 0^+)$ sur chacun des plots. Les numéros croissants des plots apparaissent de droite vers la gauche.	120
5.13	Erreurs relatives en norme L_2 sur l'ensemble de l'écoulement entre la solution obtenue avec une distribution de plots donnée et celle déterminée avec un nombre maximal de plots, $n_b = N_x$	121
5.14	Profils de vitesse, température et masse volumique pour les abscisses x_i des 8 plots. Les symboles vides correspondent à la solution dans le domaine microscopique et les symboles pleins avec les lignes continues indiquent la solution de la région continue.	123
5.15	Profils de masse volumique et de vitesse dans les sections positionnées aux abscisses x_i des 8 plots. Les lignes continues présentent les solutions purement macroscopiques provenant d'un modèle Volumes Finis, les symboles pleins indiquent les solutions continues du modèle hybride et les symboles creux celles de la région moléculaire. Les simulations sont effectuées sur 192 échantillons.	125

5.16	Profils de température pour les différentes abscisses correspondant aux positions des 8 plots. Les symboles pleins indiquent les solutions du domaine continu du modèle hybride et les symboles creux celles de la région moléculaires. Les simulations sont effectuées sur 192 échantillons.	126
5.17	Profils de température pour les différentes abscisses x_i des 8 plots. Les lignes continues indiquent les solutions purement Volumes Finis, les symboles pleins et creux sont les résultats des simulations hybrides multi-échelles pour respectivement les grandeurs des domaines continu et moléculaire. Les simulations sont effectuées sur 192 échantillons.	127
5	Conclusion et Perspectives	131

Liste des tableaux

0	Introduction	1
1	Description microscopique	9
1.1	Définition des constantes et grandeurs de référence pour l'argon à 120 K.	12
2	Modélisation hybride Microscopique/Macroscopique	35
3	Étude et paramétrage des schémas numériques	59
3.1	La valeur moyenne de la masse volumique pour tout le domaine moléculaire $\langle \rho \rangle$ et dans le sous domaine C→M, $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$ avec ou sans contrôle de la masse volumique. Les écarts par rapport aux masses volumiques initiales et désirées sont également écrites ($\rho_{init} = \rho_{target} = 0,05$). Se référer à la figure 3.11 pour visualiser le profil de masse volumique dans le domaine moléculaire.	72
3.2	Problème de condensation avec l'évaluation et le contrôle de la masse volumique appliquée dans une ou deux différentes couches. Sont donnés en fonction de Δ : l'ordonnée (b) et la demi-épaisseur (c) de l'interface (Eq. (3.3) avec un intervalle d'approximation $0,05 \leq z \leq 0,3$), la valeur moyenne de la masse volumique $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$ dans la couche C→M, l'écart relatif entre la valeur de la masse volumique mesurée et ciblée $\text{diff}_{\rho_{target}} = \langle \rho \rangle_{C \rightarrow M} / \rho_{target} - 1$) et l'écart type relatif de $\langle \rho \rangle(z)$ dans la couche C→M ($\sigma_{\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}} / \langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$). Les deux dernière lignes donnent la moyenne et l'écart type relatif sur toutes les valeurs de Δ , pour b , c et $\langle \rho \rangle_{C \rightarrow M}$.	76
3.3	Problème d'évaporation. Même légende que le tableau. 3.2 mais avec l'intervalle d'approximation pour la fonction (cf. Eq. (3.3)) tel que $0,05 \leq z \leq 0,3$.	78

4	Simulations hybrides sur un unique "plot" moléculaire	81
4.1	Paramètres de simulation pour le problème de Couette transitoire en phase liquide.	83
4.2	Paramètres de simulation pour le gaz qui sont utilisées pour étudier le cas de Couette.	87
5	Simulations hybrides multi-échelles dans des micro conduites	101
5.1	Grandeurs locales dans les sections x_i des plots pour le modèle Volumes Finis pur (VF), le modèle hybride analytique linéaire (ML) et les modèles hybrides moléculaires avec un mur stochastique (MS) ou un mur atomique (MA). La notation $e_{/ref}$ représente l'écart relatif par rapport à la référence "ref".	108
5.2	Erreur relative par rapport au débit analytique $Q_0 = 2,630 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}/\text{m}$ dans les sections transversales aux 8 plots pour le modèle hybride linéaire (ML) et la méthode hybride moléculaire avec les murs stochastique (MS) et atomique (MA).	110
5.3	Masse volumique moyenne, libre parcours moyen et nombre de Knudsen dans chacun des plots de la conduite.	122
5.4	Masse volumique moyenne, libre parcours moyen et nombre de Knudsen dans chacun des plots de la conduite.	125
5.5	Vitesse horizontale réduite et température réduite en $z = H$ aux positions des différents plots, pour les solutions provenant d'un modèle purement Volumes Finis (VF) et celles issues des modèles multi-échelles hybrides, soit analytique ou moléculaires pour des murs stochastiques (MS). La notation $e_{/VF}$ indique l'écart relatif par rapport à la solution référence (Volumes Finis).	128

Bibliographie

- [1] Open MPI : Open Source High Performance Computing. Disponible sur <https://www.open-mpi.org>. (cf. page 23.)
- [2] A. AHMED et R. J. SADUS : Solid-liquid equilibria and triple points of n-6 Lennard-Jones fluids. *The Journal of Chemical Physics*, 131(17), 2009. (cf. page 27.)
- [3] M. ALLEN et D. TILDESLEY : *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, New York, 1989. (cf. pages 9 et 11.)
- [4] Y. ASANO et K. FUCHIZAKI : Phase diagram of the modified Lennard-Jones system. *The Journal of Chemical Physics*, 137(17), 2012. (cf. page 27.)
- [5] H. J. C. BERENDSEN, J. P. M. POSTMA, W. F. van GUNSTEREN, A. DI NOLA et J. R. HAAK : Molecular dynamics with coupling to an external bath. *Journal of Chemical Physics*, 81(8):3684–3690, 1984. (cf. pages 22 et 60.)
- [6] R. B. BIRD, W. E. STEWART et E. N. LIGHTFOOT : *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons, Inc. 2nd edition, 2006. (cf. page 42.)
- [7] M. K. BORG, D. A. LOCKERBY et J. M. REESE : A Multiscale Method for Micro/Nano Flows of High Aspect Ratio. *Journal of Computational Physics*, 233:400–413, jan. 2013. (cf. page 4.)
- [8] M. K. BORG, D. A. LOCKERBY et J. M. REESE : A hybrid molecular-continuum simulation method for incompressible flows in micro/nanofluidic networks. *Microfluidics and Nanofluidics*, 15(4):541–557, 2013. (cf. page 4.)
- [9] M. K. BORG, D. A. LOCKERBY et J. M. REESE : The FADE mass-stat : A technique for inserting or deleting particles in molecular dynamics simulations. *Journal of Chemical Physics*, 2014. (cf. page 55.)
- [10] M. K. BORG, D. A. LOCKERBY et J. M. REESE : A hybrid molecular-continuum method for unsteady compressible multiscale flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 768: 388–414, 4 2015. (cf. page 4.)

-
- [11] M. BUGEL : *Couplage entre la Dynamique Moléculaire et la Mécanique des Milieux Continus*. Thèse de doctorat, Université de Bordeaux I, 2009. (cf. pages [14](#), [38](#), [41](#), [43](#), [50](#), [51](#), [55](#), [67](#) et [82](#).)
- [12] M. BUGEL et G. GALLIÉRO : Thermal conductivity of the Lennard-Jones fluid : an empirical correlation. *Chemical Physics*, 2008. (cf. pages [42](#), [43](#) et [57](#).)
- [13] M. BUGEL, G. GALLIÉRO et J.-P. CALTAGIRONE : Hybrid atomistics-continuum simulations of fluid flows involving interfaces. *Microfluidics and Nanofluidics*, 10(3): 637–647, 2011. (cf. pages [41](#) et [50](#).)
- [14] B. Y. CAO, M. CHEN et Z. Y. GUO : Temperature dependence of the tangential momentum accommodation coefficient for gases. *Applied Physics Letters*, 86:091905, 2005. (cf. pages [32](#) et [122](#).)
- [15] C. CERCIGNANI et M. LAMPIS : Kinetic models for gas-surface interactions. *Transport Theory and Statistical Physics*, 1(9):101–114, 1971. (cf. page [30](#).)
- [16] E. CHÉNIER, R. EYMARD, R. HERBIN et O. 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. (cf. page [44](#).)
- [17] E. CHÉNIER, R. EYMARD et O. TOUAZI : Numerical Results Using a Collocated Finite-Volume Scheme on Unstructured Grids for Incompressible Fluid Flows. *Numerical Heat Transfer, Part B : Fundamentals*, 49(3):259–276, 2006. (cf. page [44](#).)
- [18] S. COLIN : Gas microflows in the slip flow regime : A critical review on convective heat transfer. *Journal of Heat Transfer*, 134(2):020908–020908, déc. 2011. (cf. page [122](#).)
- [19] S. K. DADZIE et J. G. MÉOLANS : Temperature jump and slip velocity calculations from an anisotropic scattering kernel. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 358(2–4):328 – 346, 2005. (cf. page [2](#).)
- [20] R. DELGADO-BUSCALIONI et P. V. COVENEY : USHER : an algorithm for particle insertion in dense fluids. *Journal of Chemical Physics*, 119(2):978–987, 2003. (cf. pages [38](#), [40](#), [52](#), [54](#), [57](#) et [73](#).)
- [21] F. ERCOLESSI : *A molecular dynamics primer*. Springer College in Computational Physics Press, ICTP, 1997. (cf. page [10](#).)
- [22] T. EWART, P. PERRIER, I. A. GRAUR et J. G. M'ÉOLANS : Mass flow rate measurements in a microchannel, from hydrodynamic to near free molecular regimes. *Journal of Fluid Mechanics*, 584:337–356, 008 2007. (cf. page [122](#).)

- [23] R. P. FEYNMAN : There's Plenty of Room at the Bottom. Disponible en ligne : www.zyvex.com/nanotech/feynman.html. (cf. page 1.)
- [24] E. G. FLEKKØY, G. WAGNER et J. FEDER : Hybrid model for combined particle and continuum dynamics. *Europhysics letters*, 2000. (cf. pages 39, 40 et 52.)
- [25] D. FRENKEL et B. SMIT : *Understanding Molecular Simulation*. Academic Press, Inc., Orlando, FL, USA, 2nd édn, 2001. (cf. page 9.)
- [26] G. GALLIÉRO, C. BONED et A. BAYLAUCQ : Molecular Dynamics Study of the Lennard-Jones Fluid Viscosity : Application to Real Fluids. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2005. (cf. pages 42 et 57.)
- [27] C. W. GEAR : *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations*. Prentice-Hall, 1971. (cf. page 15.)
- [28] W. GROPP, E. LUSK et R. THAKUR : *Using MPI-2 : Advanced Features of the Message-Passing Interface*. MIT Press, Cambridge, MA, USA, 1999. (cf. page 23.)
- [29] N. G. HADJICONSTANTINOÛ : Hybrid Atomistic-Continuum Formulations and the Moving Contact-Line Problem. *Journal of Computational Physics*, 154(2):245 – 265, 1999. (cf. page 37.)
- [30] N. G. HADJICONSTANTINOÛ, A. L. GARCIA, M. Z. BAZANT et G. HE : Statistical error in particle simulations of hydrodynamic phenomena. *Journal of Computational Physics*, 187:274–297, 2003. (cf. page 40.)
- [31] N. G. HADJICONSTANTINOÛ et A. T. PATERA : Heterogeneous Atomistic-Continuum Representations for Dense Fluid Systems. *International Journal of Modern Physics C*, 1997. (cf. pages 37 et 53.)
- [32] D. M. HEYES : Transport coefficients of simple fluids with steeply repulsive potentials. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 6(32):6409, 1994. (cf. page 27.)
- [33] W. G. HOOVER : Canonical dynamics : Equilibrium phase-space distributions. *Physical Review A*, 31:1695–1697, Mar 1985. (cf. page 22.)
- [34] P. H. HÜNENBERGER : *Thermostat Algorithms for Molecular Dynamics Simulations*, p. 105–149. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2005. (cf. page 22.)
- [35] J. K. JOHNSON, J. A. ZOLLWEG et K. E. GUBBINS : The Lennard-Jones equation of state revisited. *Molecular Physics*, 1993. (cf. pages 13 et 43.)
- [36] G. KARNIADAKIS, A. BESKOK et N. ALURU : *Microflows and Nanoflows : Fundamentals and Simulation*. 2005. (cf. page 2.)

- [37] J. KOLAFKA et I. NEZBEDA : The Lennard-Jones fluid : An accurate analytic and theoretically-based equation of state. *Fluid Phase Equilibria*, 100:1–34, 1994. (cf. pages [13](#), [42](#), [43](#), [57](#) et [121](#).)
- [38] R. KUBO : Statistical-mechanical theory of irreversible processes.I. general theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *Journal of the Physical Society of Japan*, 12(6):570–586, 1957. (cf. page [42](#).)
- [39] E. LEMMON, M. MCLINDEN et D. FRIEND : *Thermophysical Properties of Fluid Systems*, chap. NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69. 2011. (cf. page [42](#).)
- [40] S.-T. LIN, M. BLANCO et W. A. GODDARD : The two-phase model for calculating thermodynamic properties of liquids from molecular dynamics : Validation for the phase diagram of Lennard-Jones fluids. *The Journal of Chemical Physics*, 119(22):11792–11805, 2003. (cf. pages [43](#), [44](#) et [136](#).)
- [41] J. LIU, S. CHEN, X. NIE et M. O. ROBBINS : A continuum atomistic simulation of heat transfer in micro- and nano-flows. *Journal of Computational Physics*, 227:279–291, 2007. (cf. pages [27](#), [28](#), [38](#) et [87](#).)
- [42] S. MARUYAMA : Molecular dynamics method for microscale heat transfer. *Advances in Numerical Heat Transfer*, 2(6):189–226, 2000. (cf. page [32](#).)
- [43] S. MARUYAMA et T. KIMURA : A Study on Thermal Resistance over a Solid-Liquid Interface by the Molecular Dynamics Method. *Thermal Science and Engineering.*, 7:63–68, 1999. (cf. pages [22](#), [31](#) et [32](#).)
- [44] J. MAXWELL : On the Dynamical Theory of Gases. In S. BRUSH, éd. : *Kinetic Theory*, International Series in Natural Philosophy, p. 23 – 87. Pergamon, 1966. (cf. page [29](#).)
- [45] H.-O. MAY et P. MAUSBACH : Riemannian geometry study of vapor-liquid phase equilibria and supercritical behavior of the Lennard-Jones fluid. *Physical Review E*, 85:031201, Mar 2012. (cf. pages [13](#) et [43](#).)
- [46] K. MEIER : *Computer Simulation and Interpretation of the Transport Coefficients of the Lennard-Jones Model Fluid*. Thèse de doctorat, University of the Federal Armed Forces, Hamburg, Germany, 2002. (cf. pages [42](#) et [77](#).)
- [47] A. MORSALI, E. K. GOHARSHADI, G. A. MANSOORI et M. ABBASPOUR : An accurate expression for radial distribution function of the Lennard-Jones fluid. *Chemical Physics*, 310, 2005. (cf. pages [51](#), [52](#), [53](#) et [137](#).)

- [48] F. MULLER-PLATHE : Reversing the perturbation in nonequilibrium molecular dynamics : An easy way to calculate the shear viscosity of fluids. *Physical Review E*, 59:4894–4898, May 1999. (cf. page 42.)
- [49] J. NICOLAS, K. GUBBINS, W. STREETT et D. TILDESLEY : Equation of state for the Lennard-Jones fluid. *Molecular Physics*, 37(5):1429–1454, 1979. (cf. pages 13 et 43.)
- [50] X. NIE, S. CHEN et M. ROBBINS : A continuum and molecular dynamics hybrid method for micro-and nano-fluid flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 500:55–64, 2004. (cf. pages 27, 28, 37, 38, 39, 40, 52, 67 et 82.)
- [51] X. NIE, S. CHEN et M. O. ROBBINS : Hybrid continuum-atomistic simulation of singular corner flow. *Physics of Fluids*, 16:3579/13, 2004. (cf. page 37.)
- [52] S. NOSE : A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble. *Molecular Physics*, 52(2):255–268, 1984. (cf. page 22.)
- [53] S. T. O’CONNELL et P. A. THOMPSON : Molecular dynamics continuum hybrid computations : A tool for studying complex fluid flows. *Physical Review E*, 52:R5792–R5795, Dec 1995. (cf. pages 3, 36, 37, 44, 49 et 51.)
- [54] A. PATRONIS, D. A. LOCKERBY, M. K. BORG et J. M. REESE : Hybrid continuum–molecular modelling of multiscale internal gas flows. *Journal of Computational Physics*, 255:558 – 571, 2013. (cf. page 4.)
- [55] D. RAPAPORT : *The art of molecular dynamics simulation, 2nd edition*. Cambridge University Press, New York, 2004. (cf. pages 9, 14, 15, 22, 27 et 42.)
- [56] W. REN : Analytical and numerical study of coupled atomistic-continuum methods for fluids. *Journal of Computational Physics*, 2007. (cf. pages 3 et 40.)
- [57] W. REN et W. E : Heterogeneous multiscale method for the modeling of complex fluids and micro-fluidics. *Journal of Computational Physics*, 204(1):1 – 26, 2005. (cf. page 4.)
- [58] B. SMIT : Phase diagrams of Lennard-Jones fluids. *The Journal of Chemical Physics*, 96(11):8639–8640, 1992. (cf. page 27.)
- [59] P. SPIJKER, A. J. MARKVOORT, S. V. NEDEA et P. A. J. HILBERS : Computation of accommodation coefficients and the use of velocity correlation profiles in molecular dynamics simulations. *Physical Review E*, 81:011203, Jan 2010. (cf. page 31.)
- [60] P. SPIJKER, H. M. M. ten EIKELDER, A. J. MARKVOORT, S. V. NEDEA et P. A. J. HILBERS : Implicit particle wall boundary condition in molecular dynamics. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C : Journal of Mechanical Engineering Science*, 222(5):855–864, 2008. (cf. page 31.)

- [61] S. D. STODDARD et J. FORD : Numerical Experiments on the Stochastic Behavior of a Lennard-Jones Gas System. *Physical Review A*, 8:1504–1512, Sep 1973. (cf. page 27.)
- [62] H. STRUCHTRUP : Maxwell boundary condition and velocity dependent accommodation coefficient. *Physics of Fluids*, 25(11), 2013. (cf. page 2.)
- [63] J. SUN, Y. L. HE et W. Q. TAO : Molecular dynamics continuum hybrid simulation for condensation of gas flow in a microchannel. *Microfluidics and Nanofluidics*, 7:407–422, 2009. (cf. pages 27, 28, 31, 40, 49, 69, 82 et 87.)
- [64] J. SUN, Y. L. HE et W. Q. TAO : Scale effect on flow and thermal boundaries in micro/nano-channel flow using molecular dynamics-continuum hybrid simulation method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 81(2):207–228, 2010. (cf. pages 41, 48, 49 et 69.)
- [65] J. SUN, Y. L. HE, W. Q. TAO, J. W. ROSE et H. S. WANG : Multi-scale study of liquid flow in micro/nanochannels : effects of surface wettability and topology. *Microfluidics and Nanofluidics*, 2012. (cf. pages 41, 68 et 138.)
- [66] J. SUN, Y. L. HE, W. Q. TAO, X. YIN et H. S. WANG : Roughness effect on flow and thermal boundaries in microchannel/nanochannel flow using molecular dynamics-continuum hybrid simulation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 89(1):2–19, 2012. (cf. page 41.)
- [67] R. TEHVER, F. TOIGO, J. KOPLIK et J. BANAVAR : Thermal walls in computer simulations. *Physical Review E*, 57(1):R17, 1998. (cf. pages 29 et 30.)
- [68] L. H. THOMAS : The Stability of Plane Poiseuille Flow. *Physical Review*, 91:780–783, août 1953. (cf. page 104.)
- [69] P. A. THOMPSON et S. M. TROIAN : A general boundary condition for liquid flow at solid surfaces. *Nature*, 389:360–362, 1997. (cf. pages 40 et 69.)
- [70] Q. D. TO, C. LÉONARD et G. LAURIAT : Free-path distribution and Knudsen-layer modeling for gaseous flows in the transition regime. *Physical Review E*, 91:023015, Feb 2015. (cf. page 122.)
- [71] Q.-D. TO, V.-H. VU, G. LAURIAT et C. LÉONARD : Boundary conditions for gas flow problems from anisotropic scattering kernels. *Journal of Mathematical Physics*, 56(10), 2015. (cf. page 2.)
- [72] C. TROZZI et G. CICCOTTI : Stationary nonequilibrium states by molecular dynamics. II. Newton’s law. *Physical Review A*, 29(2):916–925, Feb 1984. (cf. pages 29 et 30.)
- [73] M. W. TYSANNER et A. L. GARCIA : Measurement bias of fluid velocity in molecular simulations. *Journal of Computational Physics*, 196, 2004. (cf. page 19.)

- [74] V. H. VU, B. TROUETTE, Q. D. TO et E. CHÉNIER : Multi-scale modelling and hybrid atomistic-continuum simulation of non-isothermal flows in microchannels. *Microfluidics and Nanofluidics*, 20(2):1–15, 2016. (cf. page 97.)
- [75] Y. WANG et G. HE : A dynamic coupling model for hybrid atomistic-continuum computations. *Chemical Engineering Science*, 62(13):3574 – 3579, 2007. Frontier of Chemical Engineering - Multi-scale Bridge between Reductionism and Holism. (cf. pages 39, 67 et 82.)
- [76] T. WERDER, J. H. WALTHER et P. KOUMOUTSAKOS : Hybrid Atomistic-continuum Method for the Simulation of Dense Fluid Flows. *Journal of Computational Physics*, 205(1):373–390, mai 2005. (cf. pages 38, 51, 52, 57, 64, 65 et 138.)
- [77] K. YAMAMOTO, H. TAKEUCHI et T. HYAKUTAKE : Characteristics of reflected gas molecules at a solid surface. *Physics of Fluids*, 18(4), 2006. (cf. page 30.)
- [78] T. YEN, C. SOONG et P. TZENG : Hybrid molecular dynamics-continuum simulation for nano/mesoscale channel flows. *Microfluidics and Nanofluidics*, 3:665–675, 2007. (cf. pages 39, 40, 67, 69 et 82.)
- [79] W. J. ZHOU, H. B. LUAN, Y. L. HE, J. SUN et W. Q. TAO : A study on boundary force model used in multiscale simulations with non-periodic boundary condition. *Microfluidics and Nanofluidics*, 16:587–595, 2014. (cf. page 50.)

