



HAL
open science

Approche multi-échelle pour l'étude de la condensation dans des micro-conduites

van Huyen Vu, Benoît Trouette, Quy-Dong To, Eric Chénier

► **To cite this version:**

van Huyen Vu, Benoît Trouette, Quy-Dong To, Eric Chénier. Approche multi-échelle pour l'étude de la condensation dans des micro-conduites. Congrès français de thermique 2016, May 2016, Toulouse, France. hal-01295602

HAL Id: hal-01295602

<https://hal.science/hal-01295602>

Submitted on 31 Mar 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Approche multi-échelle pour l'étude de la condensation dans des micro-conduites

Van Huyen VU, Benoît TROUETTE, Quy Dong TO, Eric CHÉNIER

Université Paris-Est Marne-la-Vallée, laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle,
UMR 8208 CNRS, 77454 Marne-la-Vallée cedex 2
{van-Huyen.vu; benoit.trouette; quy-dong.to; eric.chenier}@u-pem.fr

Résumé - Une modélisation hybride *dynamique moléculaire/Volumes finis* est présentée pour simuler l'écoulement d'un gaz et de son condensat dans un canal dont la température est inférieure à la température de rosée.

Nomenclature

c	chaleur massique à volume constant, J/Kg.K	<i>Symboles grecs</i>	
H	demi-hauteur de la conduite, m	ϵ	profondeur du puits de potentiel, J
k	raideur du ressort, J/m ²	λ	conductivité thermique, W/m.K
k_B	constante de Boltzmann, $k_B = 1.38063 \times 10^{-23}$ J/K	μ	viscosité dynamique, Pa.s
L	longueur de la conduite, m	ρ	masse volumique, kg/m ³
p	pression, Pa	σ	diamètre moyen des particules, m
T	température, K	<i>Indices et exposants</i>	
\mathbf{u}	vecteur vitesse, $\mathbf{u} = ue_x + we_z$, m/s	f	fluide
V	potentiel d'interaction, J	w	mur
		—	grandeurs de référence

1. Introduction

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 échelles 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 (glissements thermique et dynamique, pompage thermique). Pour intégrer la physique qui opère à petite échelle, des modèles macroscopiques ont été développés. Cependant l'écriture de ces modèles n'est toujours pas unifiée, dépend de paramètres inconnus (coefficients accommodation tangentiel, normal et d'énergie, ...) et ne capte pas complètement la complexité de la physique qui a lieu lors de l'interaction des atomes (molécules) de fluide avec ceux qui composent la paroi (physisorption par exemple).

Dans le but d'améliorer la description des écoulements fluides dans des micro-conduites de grande extension, une modélisation numérique hybride *Dynamique Moléculaire/Volumes Finis* a été développée pour tenir compte du caractère multi-échelle des transferts [5] : une approche particulière est utilisée dans des plots localisés le long de l'interface entre le fluide et la paroi de sorte à modéliser finement l'ensemble des interactions complexes aux petites échelles, alors qu'une description basée sur la mécanique des milieux continus est préférée dans le cœur de l'écoulement pour rendre compte des grandes échelles relatives aux transferts dans la direction axiale de la conduite.

L'objectif de ce papier est d'étendre le modèle monophasique d'un écoulement incompressible liquide ou gazeux à celui d'un gaz se condensant sur une très faible épaisseur aux parois d'une conduite.

2. Méthodologie

On considère une conduite de section rectangulaire (hauteur $2H$ et envergure $l \gg 2H$), de longueur $L \gg l$. Les parois internes sont recouvertes d'une fine épaisseur de platine et de l'argon, gazeux ou liquide, est injecté dans la section d'entrée. Les parois situées en $y = \pm l/2$ et $z = 0; 2H$ sont respectivement isolées thermiquement et isothermes à la température T_w . En tenant compte du rapport d'aspect $l/2H \gg 1$ et des conditions aux limites adiabatiques en $y = \pm l/2$, il est possible de simplifier le problème pour obtenir une géométrie bidimensionnelle. En considérant que l'écoulement est symétrique vis-à-vis du plan $y = \pm l/2$, la simulation se réduit simplement à un canal de longueur L , limité en $z = 0$ par une paroi isotherme à T_w et un plan de symétrie en $z = H$.

2.1. Décomposition du domaine

La géométrie rectangulaire du canal est divisée en deux types de sous-domaines (Fig. 1(a)) :

- 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 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 (Fig 1(b)). Ces zones notées (M) sont représentées par des plots rectangulaires noirs (4 plots de hauteur H_M). Une illustration d'un plot moléculaire est donné sur la Fig. 1(b) où on distingue l'épaisseur du mur atomique $H_{M,w}$ et la hauteur de la zone fluide moléculaire $H_{M,f}$ ($H_{M,w} + H_{M,f} = H_M$).

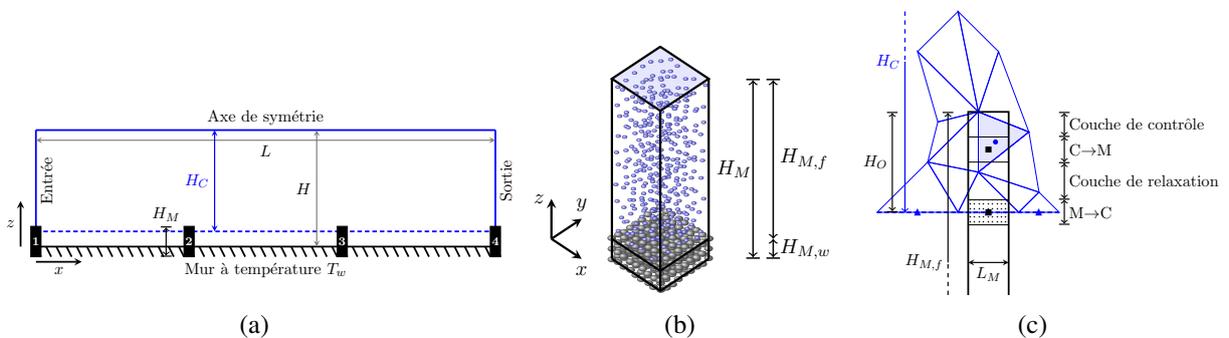


Figure 1 (a) : Schéma de la conduite de demi-hauteur H et de longueur L . La région fluide de hauteur H_C est gouvernée par les équations de Navier-Stokes et de l'énergie. Des descriptions atomistiques sont utilisées pour modéliser le mur et le fluide adjacent (plots rectangulaires numérotés et de hauteur H_M). (b) : plot de simulation moléculaire de hauteur H_M comprenant l'épaisseur du mur $H_{M,w}$ et celle de la région fluide $H_{M,f}$ ($H_{M,w} + H_{M,f} = H_M$). (c) : Exemple de la zone de recouvrement garantissant la communication entre la région moléculaire de dimension $L_M \times H_M$ et le domaine continu recouvert localement par un maillage de triangles.

La région continue (C) communique avec chaque domaine moléculaire (M) par l'intermédiaire d'une zone de recouvrement dont la taille est typiquement 40% de $H_{M,f}$. Cette zone moléculaire de recouvrement est subdivisée en 4 sous-couches : deux d'entre-elles garantissent les échanges entre les domaines continu et moléculaire (C→M et M→C), une couche de relaxation assure le découplage des dynamiques entre les zones C→M et M→C, et une couche de contrôle qui

permet de piloter la valeur de la densité.

2.2. Modèle moléculaire

Les potentiels d'interaction binaire entre les atomes d'argon (fluide/fluide) et les atomes d'argon et de platine (fluide/paroi) sont modélisés par le potentiel de Lennard-Jones

$$V_{\alpha\beta}(r) = 4\varepsilon_{\alpha\beta} \left[\left(\frac{\sigma_{\alpha\beta}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{\alpha\beta}}{r} \right)^6 \right],$$

avec le couple $\alpha\beta$ désignant les interactions fluide/fluide ($\alpha\beta := ff$) ou fluide/solide ($\alpha\beta := fw$), et les paramètres $\varepsilon_{\alpha\beta}$ et $\sigma_{\alpha\beta}$ représentant la profondeur du puits de potentiel et le *diamètre* moyen des particules. En utilisant l'argon comme élément de référence, les paramètres du couple Ar/Pt peuvent s'exprimer dans les unités réduites de Lennard-Jones : $\varepsilon_{ff} = \bar{\varepsilon}$, $\sigma_{ff} = \bar{\sigma}$, $m_f = \bar{m}$, $\varepsilon_{wf} = 0,535 \bar{\varepsilon}$, $\sigma_{wf} = 0,906 \bar{\sigma}$, $m_w = 4,8833 \bar{m}$ avec $\bar{\varepsilon} = 1,656 \times 10^{-21}$ J, $\bar{\sigma} = 3,405 \text{ \AA}$ et $\bar{m} = 6,633 \times 10^{-26}$ kg. Avec ces grandeurs, les échelles de temps, de température, de vitesse, de pression et de masse volumique peuvent être déduite : $\bar{\tau} = \sqrt{\bar{m}\bar{\sigma}^2/\bar{\varepsilon}} = 2,155 \times 10^{-12}$ s, $\bar{T} = \bar{\varepsilon}/k_B = 120$ K, $\bar{v} = \sqrt{\bar{\varepsilon}/\bar{m}} = 158$ m/s, $\bar{p} = \bar{\varepsilon}/\bar{\sigma}^3 = 4,195 \times 10^7$ Pa et $\bar{\rho} = \bar{m}/\bar{\sigma}^3 = 1680$ kg/m³.

La paroi solide est modélisée par 3 couches d'atomes de platine organisées avec un réseau cristallin FCC(111), de densité $\rho_w = 12,76 \bar{\rho}$. Chaque atome de platine est relié à ses plus proches voisins par un ressort de raideur $k = 3249,1 \bar{\varepsilon}/\bar{\sigma}^2$ qui engendre un potentiel harmonique $W_{ww}(r) = kr^2/2$. Deux couches d'atomes fantômes sont ajoutées en partie inférieure pour contrôler la température et rendre le mur immobile.

La simulation par la méthode de dynamique moléculaire est basée sur la mécanique newtonienne et permet d'obtenir les trajectoires d'un ensemble de N particules ponctuelles *solides* ou *fluides*. Pour la particule i , de masse m_i et à la position $\mathbf{r}_i(t)$, les lois de la dynamique de Newton s'écrivent :

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{F}_i := - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} V_{\text{tot}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (1)$$

$$V_{\text{tot}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) := \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} V_{ff}(\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|) + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} V_{fw}(\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|) + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} W_{ww}(\|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|)$$

A la force dérivant du potentiel V_{tot} , nous devons ajouter une force de type volumique \mathbf{F}_{ext} pour modéliser la contribution de pression qui s'exerce sur les seules molécules fluides.

L'intégration temporelle des équations du mouvement est réalisée par l'algorithme Verlet-Vitesse [1] avec un pas de temps $\delta t = 5 \times 10^{-3} \bar{\tau}$. D'un point de vue pratique, il est inutile de traiter les interactions binaires entre toutes les particules : seules les couples de particules distants d'une longueur inférieure à $2,5 \bar{\sigma}$ interviennent dans le calcul de V_{tot} .

Les conditions aux limites sont périodiques dans les directions horizontales x et y ce qui implique que le flux moyen de masse à travers une section horizontale est nul. Pour contrôler la température de la paroi solide à T_w , il est nécessaire d'ajouter une force $\mathbf{F}_{i,w}$ à l'équation standard du mouvement (1) pour les atomes de platine appartenant à la couche fantôme supérieure. En utilisant le thermostat de Langevin, cette force s'écrit : $\mathbf{F}_{i,w} = -\alpha_w \dot{\mathbf{r}}_i + \mathbf{R}_{i,w}$ avec $\alpha_w = 168,3 \bar{\tau}^{-1}$ et $\mathbf{R}_{i,w}$ un vecteur dont chaque composante est tirée d'une distribution Gaussienne de valeur moyenne nulle et d'écart type $\sqrt{2\alpha_w m_w k_B T_w / \delta t}$. Dans la sous-couche C→M de la zone de recouvrement, la dynamique des particules fluides doit être contrainte de sorte à ce

que la vitesse moyenne $\langle \dot{\mathbf{r}} \rangle(z)$ et la température $\langle m[\dot{\mathbf{r}}(z) - \langle \dot{\mathbf{r}} \rangle(z)]^2 \rangle / 3k_B$ soient les mêmes que les profils linéaires instantanés reconstruits à partir de la vitesse macroscopique $\mathbf{u}_{C \rightarrow M}(z)$ et de la température $T_{C \rightarrow M}(z)$ issues des équations continues [4, 5]. Pour obtenir les profils de vitesse moyenne et de température dans la zone moléculaire, les équations de la dynamique (1) sont d'abord résolues avec une contrainte, en ajoutant la force $\mathbf{F}_{i,f} = -\langle \mathbf{F}(t) \rangle + \xi \frac{m}{\delta t} (\mathbf{u}_{C \rightarrow M}(z) - \langle \dot{\mathbf{r}}(t) \rangle(z))$. L'accélération calculée $\ddot{\mathbf{r}}_i^*$ est ensuite corrigée par l'utilisation d'un thermostat de Langevin : $m\ddot{\mathbf{r}}_i(t) = m\ddot{\mathbf{r}}_i^*(t) - m\alpha [\dot{\mathbf{r}}_i(t) - \langle \dot{\mathbf{r}}(t) \rangle(z)] + \mathbf{R}_{i,f}(z, t)$. Les paramètres sont $\alpha = 1\bar{\tau}^{-1}$, $\xi = 2 \times 10^{-2}$ (resp. $\xi = 5 \times 10^{-3}$) lorsque la phase est liquide (resp. gazeuse). La limite supérieure du domaine de dynamique moléculaire n'est pas une vraie frontière physique. Elle est modélisée par une paroi spéculaire. Dans le cas des liquides, une force additionnelle est également appliquée sur les molécules voisines de cette paroi pour éviter la stratification non physique engendrée par celle-ci [6]. En situation de condensation, la densité d'argon proche de la paroi spéculaire fictive correspond à un état gazeux. Du fait des variations de l'épaisseur de condensat sur la paroi inférieure, la densité de la phase gazeuse peut varier. Afin de piloter celle-ci, des particules sont, soit extraites au voisinage immédiat de la paroi fictive, soit introduites dans la couche de contrôle avec l'algorithme USHER [3].

2.3. Modèle continu

Dans le domaine continu, l'écoulement fluide, supposé incompressible, est solution des équations de Navier-Stokes et de l'énergie écrites sous la forme stationnaire

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \\ \rho \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)) \\ \rho c \nabla \cdot (\mathbf{u} T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) : \nabla \mathbf{u} \end{cases}$$

avec les conditions aux limites

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

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. Les profils des vitesses $u_{\text{in}}(z)$ et des températures $T_{\text{in}}(z)$ dépendent du problème traité 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 des fonctions 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

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

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 , $\mathcal{H}(x, a, b) = H(a - x) \times H(x - b)$ et $H(x)$ la fonction de Heaviside, et n_p le nombre total de plots. La même démarche est suivie pour exprimer le profil de température $T_{M \rightarrow C}^{\text{macro}}(x)$.

Les champs discrets sont approximés par une méthode de Volumes Finis utilisant des variables co-localisées et des maillages non-structurés [2]. L'algorithme est du second ordre en espace. Les équations non-linéaires, couplant implicitement l'ensemble des variables, sont résolues par un algorithme de Newton-Raphson.

3. Résultats

3.1. Écoulement monophasique

La méthode de couplage entre les modélisations particulaire et continue a déjà été partiellement validée pour des problèmes transitoires de Couette plan et de diffusion thermique sur un unique plot [5]. Dans cette section nous présentons brièvement la validation d'un écoulement anisotherme d'argon liquide dans une conduite de grand allongement utilisant plusieurs plots de dynamique moléculaire. Les caractéristiques de cette simulation sont les suivantes : $H_{M,f} = 99,44\bar{\sigma}$, $H_{M,f}/H_C = 1/25$ ($H = 2545,6\bar{\sigma}$), $L = 4000H$, $T_w = 1,1\bar{T}$. Le domaine continu de hauteur H_C est discrétisé en $N_x \times N_z = 48000 \times 30$ volumes de contrôles rectangulaires, avec des tailles de mailles plus petites proches de l'entrée et de la frontière inférieure. Les propriétés de l'argon liquide, de masse volumique $\rho = 0,81\bar{\rho}$ et à T_w sont $\mu = 2,073\sqrt{\bar{m}\bar{\varepsilon}}/\bar{\sigma}^2$, $\lambda = 6,832k_B\sqrt{\bar{m}\bar{\varepsilon}}/\bar{\sigma}^2$ et $c = 2,375k_B/\bar{m}$. La vitesse d'entrée $u_{in}(z)$ se raccorde à zéro à la paroi et s'écrit $u_{in}(z)/u_0 = z(2\chi - z)/\chi^2$ pour $0 \leq z \leq \chi$ et $u_{in}(z)/u_0 = 1$ pour $z > \chi$, avec $u_0 = 1\bar{v}$ et $\chi = 0,2H$. La température d'entrée est égale à la température des parois : $T_{in} = T_w$.

Pour limiter les sauts de température et de vitesse à l'interface fluide/solide, la modélisation atomique du mur est substituée par un mur stochastique : toute particule traversant cette paroi est réinsérée avec une vitesse dont les composantes tangentiels et normal sont tirées respectivement dans une distribution Gaussienne et de Rayleigh, avec une valeur moyenne nulle et un écart type construit sur la température du mur T_w .

Dans les simulations hybrides avec une approche multi-échelle, le coût de calcul est lié à la dynamique moléculaire : le calcul d'une solution stationnaire pour le milieu continu est de l'ordre de quelques minutes tandis qu'une simulation sur un unique plot moléculaire prend plusieurs jours-CPU. Réduire le temps global de la simulation est indispensable. Cet objectif est atteint à la fois en utilisant quelques centaines de processus de calcul en parallèle pour chaque simulation de dynamique moléculaire et en minimisant le nombre de plots interfaçant le cœur du fluide avec la paroi. Le nombre et la position des plots moléculaires jouent alors un rôle déterminant sur la qualité de la solution. Pour réaliser cette étude avec un coût de calcul faible, nous allons d'abord remplacer dans les plots la résolution par dynamique moléculaire par un modèle analytique de la composante horizontale (écoulement de Poiseuille) et du champ de température (profil de conduction). Pour le $i^{\text{ème}}$ plot M_i , on obtient

$$u_a^i(z) = \frac{1}{2\mu} \left. \frac{\partial p}{\partial x} \right|_{C \rightarrow M_i} (z - z_{C \rightarrow M_i})z + u_{C \rightarrow M_i} \frac{z}{z_{C \rightarrow M_i}}, \quad T_a^i(z) = \frac{T_{C \rightarrow M_i} - T_w}{z_{C \rightarrow M_i}} z + T_w$$

avec $z_{C \rightarrow M_i}$ l'ordonnée du centre de la sous-couche $C \rightarrow M_i$ du plot M_i . Il est important de noter que l'intérêt du modèle analytique est à la fois de fournir une modélisation qualitative du comportement moyen du fluide à l'échelle atomique mais également permet d'initialiser le champ de vitesse de la dynamique moléculaire réduisant ainsi le temps de convergence global de la méthode hybride. Une fois les profils analytiques connus, nous mesurons ensuite en norme L_2 l'écart relatif entre les solutions obtenues avec N_x plots (1 plot par maille de frontière) et avec un petit nombre de plots n_p distribués selon la loi $x_i = x_1 + (x_{n_p} - x_1)(1 - r_p^{i-1})/(1 - r_p^{n_p-1})$, avec $r_p \neq 1$ la raison de la suite géométrique. La figure 2 montre qu'il existe une valeur optimale de raison $r_{p,\text{opt}}$ qui minimise l'écart relative sur la vitesse et qu'il est globalement préférable de choisir $r_p > r_{p,\text{opt}}$ que $r_p < r_{p,\text{opt}}$. La figure 3 illustre le très bon accord entre les profils verticaux des vitesses horizontales de la simulation hybride obtenue avec $n_p = 8$ et $r_p = 4$ (symboles) et ceux issus de la simulation purement continue (lignes continues). Les mêmes conclusions sont tirées pour les champs thermiques.

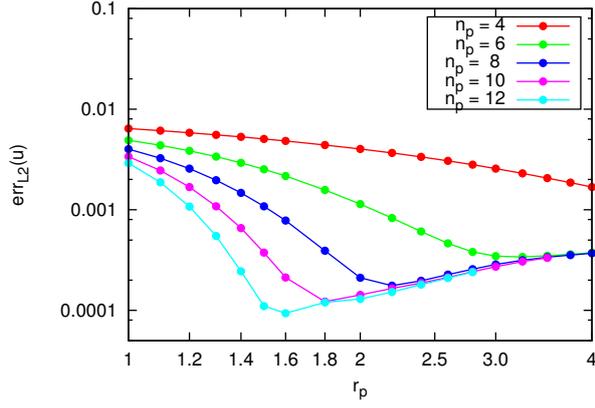


Figure 2 Norme L_2 de l'erreur relative commise sur la vitesse calculée pour $x/H < 50$ (région d'entrée) pour un nombre n_p de plots distribués selon la raison r_p et la référence construite avec N_x plots.

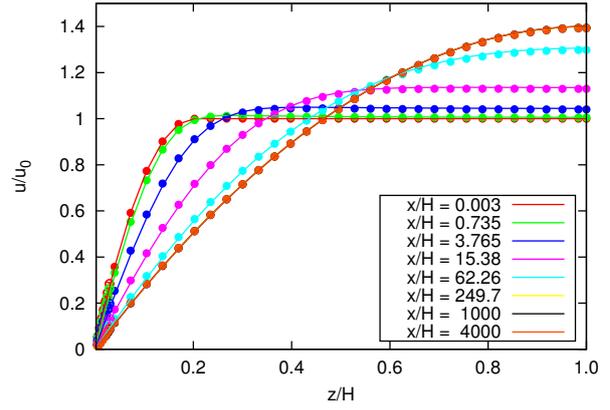


Figure 3 Comparaison entre la solution hybride pour $n_p = 8$ et $r_p = 4$ (symboles pleins et vides respectivement pour les domaines continu et particulaire) et la solution purement continue sur la totalité du domaine (lignes continues).

Cette section a montré l'utilité et la pertinence d'un modèle simple analytique pour positionner au mieux les plots le long de la conduite et elle a permis de valider la modélisation hybride multi-échelle que nous avons développée. La section suivante étend la démarche précédente à une situation où le fluide circulant dans la conduite en phase gazeuse se condense sur les parois de la conduite.

3.2. Écoulement diphasique, condensation en paroi

Le canal est de hauteur $H = 424,6 \bar{\sigma}$, de longueur $L = 500H$ et sa température de paroi est $T_w = 0,925 \bar{T}$. L'argon gazeux entre avec des profils de vitesse et de température établis : $u_{in}(z)/u_0 = (z/H)(2 - (z/H))$ et $T_{in}(z) = T_{w,0} + \mu u_0^2(1 - (1 - z/H)^4)/3\lambda$ avec $u_0 = 2\bar{u}$ et $T_{w,0} = 1,1\bar{T} > T_w$. Les propriétés de l'argon, évaluées à la température $1,25\bar{T}$ proche de $T_{in}(z = H/2)$, sont $\rho = 0,05 \bar{\rho}$, $\mu = 0,14 \sqrt{\bar{m}\bar{\varepsilon}}/\bar{\sigma}^2$, $\lambda = 0,61 k_B \sqrt{\bar{m}\bar{\varepsilon}}/\bar{\sigma}^2$ et $c = 1,76 k_B/\bar{m}$. Les caractéristiques de la simulation hybride sont les suivantes : $H_{M,f} = 139,21 \bar{\sigma}$ et $H_{M,f}/H_C = 1/2,45$.

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 les vitesses moyennes et la température dans chaque plot de dynamique moléculaire. Le modèle analytique repose sur plusieurs hypothèses : les propriétés sont constantes dans chaque phase, les profils de vitesse dans le gaz et le liquide s'écrivent $\mathbf{v}_{a,g} = u_{a,g}(z)\mathbf{e}_x$ et $\mathbf{v}_{a,l} = u_{a,l}(z)\mathbf{e}_x$, 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 phases et la température est continue entre le gaz et le liquide, égale à la température de rosée T_R . En notant δ_a l'épaisseur analytique de condensat, les équations s'écrivent

$$0 \leq z \leq \delta_a : \quad \lambda_l \frac{d^2 T_{a,l}}{dz^2} + \frac{\mu_l}{2} u_{a,l} \frac{du_{a,l}}{dz} = 0 \text{ et } - \left. \frac{dp}{dx} \right|_{C \rightarrow M} + \mu_l \frac{d^2 u_{a,l}}{dz^2} = 0$$

$$\delta_a \leq z \leq z_{C \rightarrow M} : \quad \lambda_g \frac{d^2 T_{a,g}}{dz^2} + \frac{\mu_g}{2} u_{a,g} \frac{du_{a,g}}{dz} = 0 \text{ et } - \left. \frac{dp}{dx} \right|_{C \rightarrow M} + \mu_g \frac{d^2 u_{a,g}}{dz^2} = 0$$

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

$$\bullet z = 0 : \begin{cases} u_{a,l} = 0 \\ T_{a,l} - T_w = C \frac{dT_{a,l}}{dz} \end{cases} \quad \bullet z = z_{C \rightarrow M} : \begin{cases} u_{a,g} = u_{C \rightarrow M} \\ T_{a,g} = T_{C \rightarrow M} \end{cases}$$

$$\bullet z = \delta_a : \begin{cases} u_{a,l} = u_{a,g} \\ T_{a,l} = T_{a,g} = T_R \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \mu_l \frac{du_{a,l}}{dz} = \mu_g \frac{du_{a,g}}{dz} \\ \lambda_l \frac{dT_{a,l}}{dz} = \lambda_g \frac{dT_{a,g}}{dz} \end{cases}$$

A l'aide des équations et conditions aux limites, nous pouvons exprimer l'épaisseur de condensat δ_a en fonction des propriétés des phases liquide et gazeuse, de la vitesse $u_{C \rightarrow M}$ température $T_{C \rightarrow M}$ et pression $(dp/dx)|_{C \rightarrow M}$ transmis du modèle continu à moléculaire, de la température de rosée T_R et de la grandeur C traduisant le saut de température à la paroi. La grandeur C et la température de rosée T_R sont déterminées par des simulations hybrides continus/moléculaires sur un unique plot, pour 4 valeurs du gradient de pression (dp/dx) . La figure 4 présente la masse

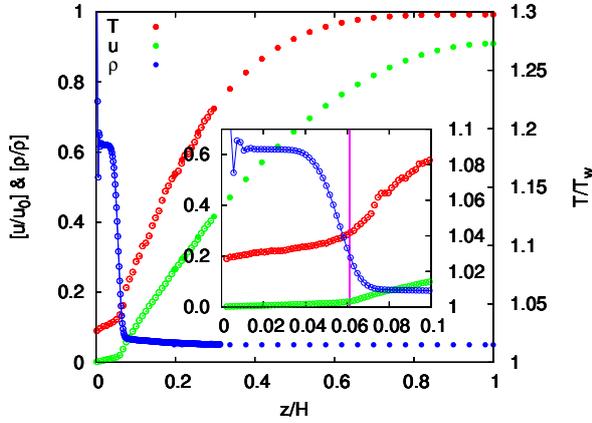


Figure 4 Profils réduits de densité et de vitesse (axe de gauche), et de température (axe de droite) pour une simulation hybride sur un unique plot, avec $(dp/dx) = 3, 11 \times 10^{-6} \bar{p}/\bar{\sigma}$.

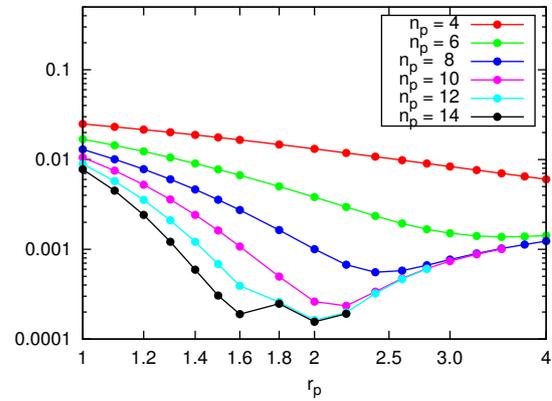


Figure 5 Norme L_2 de l'erreur relative commise sur la température calculée pour $x/H < 300$ (région d'entrée) pour un nombre n_p de plots distribués selon la raison r_p et la référence construite avec N_x plots.

volumique du fluide, le profil moyen de vitesse et le champ de température pour $(dp/dx) = 3, 11 \times 10^{-6} \bar{p}/\bar{\sigma}$. Dans la zone moléculaire (symboles creux), on distingue un changement de pente dans les profils de vitesse et de température qui sont dus à une variation des coefficients de transport μ et λ . Cette discontinuité dans les dérivées a lieu pour $z/H \approx 0,06$, dans la région haute de la zone de changement de phase caractérisée par une variation rapide de la densité. L'épaisseur de condensat et la température de rosée correspondent ici à $\delta \approx 0,06H$ et $T_R = T(z = 0,06H) \approx 1,04T_w$. La grandeur C , définie par $(T(0) - T_w)/(dT/dz)_{z=0}$, s'avère quasiment indépendante de dp/dx alors que la température de rosée est corrélée à la vitesse avec $u_{C \rightarrow M}$. Pour le modèle analytique, nous choisissons $C = 55 \bar{\sigma}$ et $T_R = 0,204178 T_{C \rightarrow M} + 0,733117 \bar{T}$. Il faut noter que l'épaisseur du film liquide δ_a est très sensible à la valeur de la température de rosée T_R : une augmentation de 0,1% sur T_R engendre un accroissement de 6,5% de δ_a . Les profils analytiques étant maintenant déterminés, nous pouvons étudier l'erreur relative commise sur les champs de température et de vitesse entre un grand nombre de plots ($n_p = N_x$) et l'écoulement obtenu avec $n_p \ll N_x$ plots distribués selon une raison r_p (Fig. 5). En choisissant $n_p = 10$ plots de dynamique moléculaire et une raison $r_p = 2$, l'erreur relative

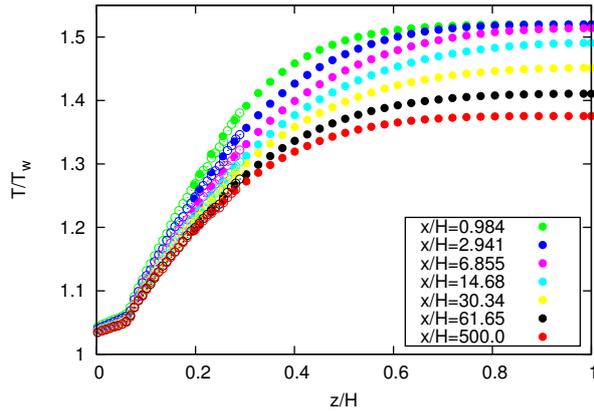


Figure 6 Profils des températures réduites pour différentes abscisses des plots moléculaires dans le micro-canal.

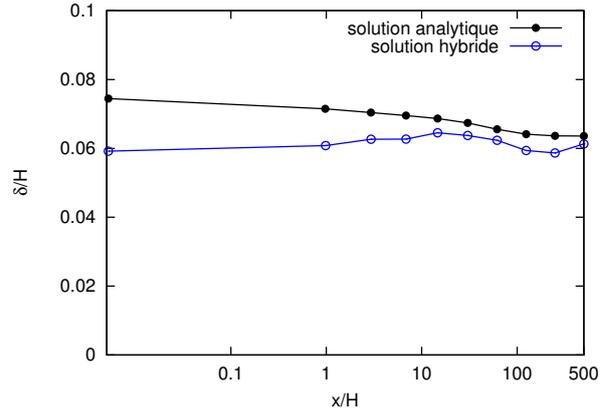


Figure 7 Épaisseur réduite de condensat obtenue aux abscisses des 10 plots de dynamique moléculaire. Comparaison de la simulation hybride et du modèle analytique ($\mu_l = 0,8 \sqrt{m\bar{\epsilon}}/\bar{\sigma}$ et $\lambda_l = 3,32 k_B \sqrt{m\bar{\epsilon}}/\bar{\sigma}$).

sur la vitesse (et sur la température) est largement inférieure à 0,1%. La figure 7 présente les profils des températures pour 7 abscisses correspondant aux plots de dynamique moléculaire. Le gaz chaud entre dans le canal, est refroidi au contact du mur froid dont la température T_w est inférieure à la température de rosée T_R : il résulte un changement de phase et l'apparition d'un film liquide dont l'épaisseur est quasiment indépendante de l'abscisse x/H (Fig. 7).

4. Conclusion

La modélisation hybride multi-échelle a été étendue pour traiter la condensation de gaz sous l'approximation d'un écoulement incompressible. Le modèle analytique pour rendre compte de la condensation est très sensible à la température de rosée ce qui a nécessité de le calibrer pour qu'il soit représentatif des simulations de dynamique moléculaire. Ce travail préliminaire doit être poursuivi pour traiter du couplage multi-échelle d'un écoulement de gaz compressible dans le cœur de l'écoulement et une approche particulière au voisinage des parois.

Références

- [1] M. Allen, D. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, *Oxford University Press, New York*, (1989)
- [2] E. Chénier, R. Eymard, O. Touazi, Numerical results using a colocated finite-volume scheme on unstructured grids for incompressible fluid flows. *Numer. Heat Tr. B-Fund* 49(3), (2006) 259–276
- [3] R. Delgado-Buscalioni, P.V. Coveney, Continuum-particle hybrid coupling for mass, momentum, and energy transfers in unsteady fluid flow. *Phys. Rev. E* 67, (2003) 046704
- [4] J. Sun, Y.L. He, W.Q. Tao, Molecular dynamics continuum hybrid simulation for condensation of gas flow in a microchannel. *Microfluid. Nanofluid.* 7, (2009) 407–422
- [5] V.-H. Vu, B. Trouette, Q.-D. To, E. Chénier, Multi-scale modelling and Hybrid atomistic-continuum simulation of non-isothermal flows in microchannel. *Microfluid Nanofluid.* to appear, (2016)
- [6] T. Werder, J.H. Walther, P. Koumoutsakos, Hybrid atomistic-continuum method for the simulation of dense fluid flows. *J. Comput. Phys.* 205(1), (2005) 373–390