

Calculs de viscosité par simulation moléculaire

Rémi JOUBAUD, ANDRA (service DS/EAP) et CERMICS, Université Paris Est et École des Ponts Paristech

Gabriel STOLTZ, CERMICS, Ecole des Ponts et Equipe MICMAC, INRIA Rocquencourt

La simulation moléculaire permet d'évaluer numériquement des coefficients de transports tels que la viscosité, le coefficient d'auto-diffusion ou la conductivité thermique. On s'est intéressé à une méthode de "force fictive" pour évaluer la viscosité de cisaillement d'un fluide simple. Le fluide est décrit par un système de particules interagissant via un potentiel et le système est mis hors de son équilibre thermodynamique par un forçage appliqué à toutes ces particules. La viscosité s'en déduit en postulant une loi macroscopique et en utilisant un procédé d'identification dû à Irving et Kirkwood [1].

Les équations de mouvement que nous avons considérées sont une perturbation des équations de Langevin [2]. On présentera brièvement les aspects théoriques liés à l'échantillonnage de la mesure hors-d'équilibre, puis la méthode numérique employée pour effectivement calculer la viscosité et enfin des résultats d'une étude numérique sur les paramètres de la dynamique de Langevin.

Références

- [1] IRVING, J. H. ET KIRKWOOD, J. G., *The statistical mechanical theory of transport processes. IV. The equations of hydrodynamics*, Journal of Chemical Physics, 1950.
- [2] JOUBAUD, R. ET STOLTZ, G., *Langevin dynamics for non-equilibrium shear viscosity calculations*, *En préparation*, 2011.

Rémi JOUBAUD, ANDRA (service DS/EAP), Parc de la croix blanche, 1,7 rue Jean Monnet, 92298 Châtenay-Malabry Cedex, France

Université Paris Est, CERMICS, 6 & 8, avenue Pascal, 77455 Marne-La-Vallée Cedex 2, France
`remi.joubaud@cermics.enpc.fr`

Gabriel STOLTZ, Université Paris Est, CERMICS et INRIA, équipe-projet MICMAC, Ecole des Ponts Paristech, 6 & 8 Av. Pascal, 77455 Marne-la-Vallée, France
`stoltz@cermics.enpc.fr`