

# Modélisations hybrides par méthode d'apprentissage supervisé pour le couplage multi-échelle d'écoulements de gaz faiblement raréfiés en conduites

**Dahia Chibouti**

dahia.chibouti@univ-eiffel.fr

Univ Gustave Eiffel, Univ Paris Est Creteil, CNRS, UMR 8208, MSME,  
F-77454 Marne-la-Vallée, France

Ce travail traite de l'importance de comprendre les écoulements de fluides et les transferts de chaleur dans des systèmes micro-électromécaniques (MEMS), en particulier dans le contexte des conduites de petites sections et de grandes extensions. Lorsque l'échelle caractéristique de l'écoulement est proche du libre parcours moyenne des molécules de gaz, des conditions aux limites spéciales doivent être considérées à proximité de la paroi, car le gaz n'est plus en équilibre thermodynamique.

De nombreux chercheurs utilisent des modèles basés sur des équations différentielles pour représenter ces comportements près de la paroi, tels que les modèles continus proposés indépendamment par Navier (1823) et ultérieurement par Maxwell (1879). Toutefois, ces modèles requièrent généralement la connaissance de paramètres qui dépendent de l'échelle moléculaire/atomique, ce qui peut être contraignant.

Pour résoudre ce problème, une approche hybride multi-échelle est proposée. Elle combine des simulations moléculaires près de la paroi avec des simulations continues (les équations de Navier-Stokes, résolues par des solveurs macro utilisant la méthode des volumes finis) dans le reste du domaine. Cependant, cette méthode s'avère coûteuse en termes de temps de calcul en raison du grand nombre de simulations moléculaires nécessaires.

Afin de réduire le nombre de ces simulations, des méthodes d'apprentissage supervisé [Bishop (2006); Rasmussen and Williams (2006)] par régression bayésienne et processus gaussiens ont été mises en place pour modéliser les réponses issues de la dynamique moléculaire, et permettre ainsi de transférer efficacement les informations entre la dynamique moléculaire et le milieu continu.

Dans la présente contribution, certains résultats concernant ce couplage associé à l'apprentissage sont illustrés pour des écoulements isothermes dans des microcanaux.

## References

- Christopher Bishop. *Pattern Recognition and Machine Learning*. Springer, January 2006.
- Jame C. Maxwell. Vii. on stresses in rarified gases arising from inequalities of temperature. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 170, 1879.
- Claude L.M.H. Navier. *Mémoires de l'Académie Royale des Sciences de l'Institut de France*, volume 6, chapter Mémoire sur les lois du mouvement des fluides. 1823.
- Carl E. Rasmussen and Christopher K. I. Williams. *Gaussian processes for machine learning*. Adaptive computation and machine learning. MIT Press, 2006.