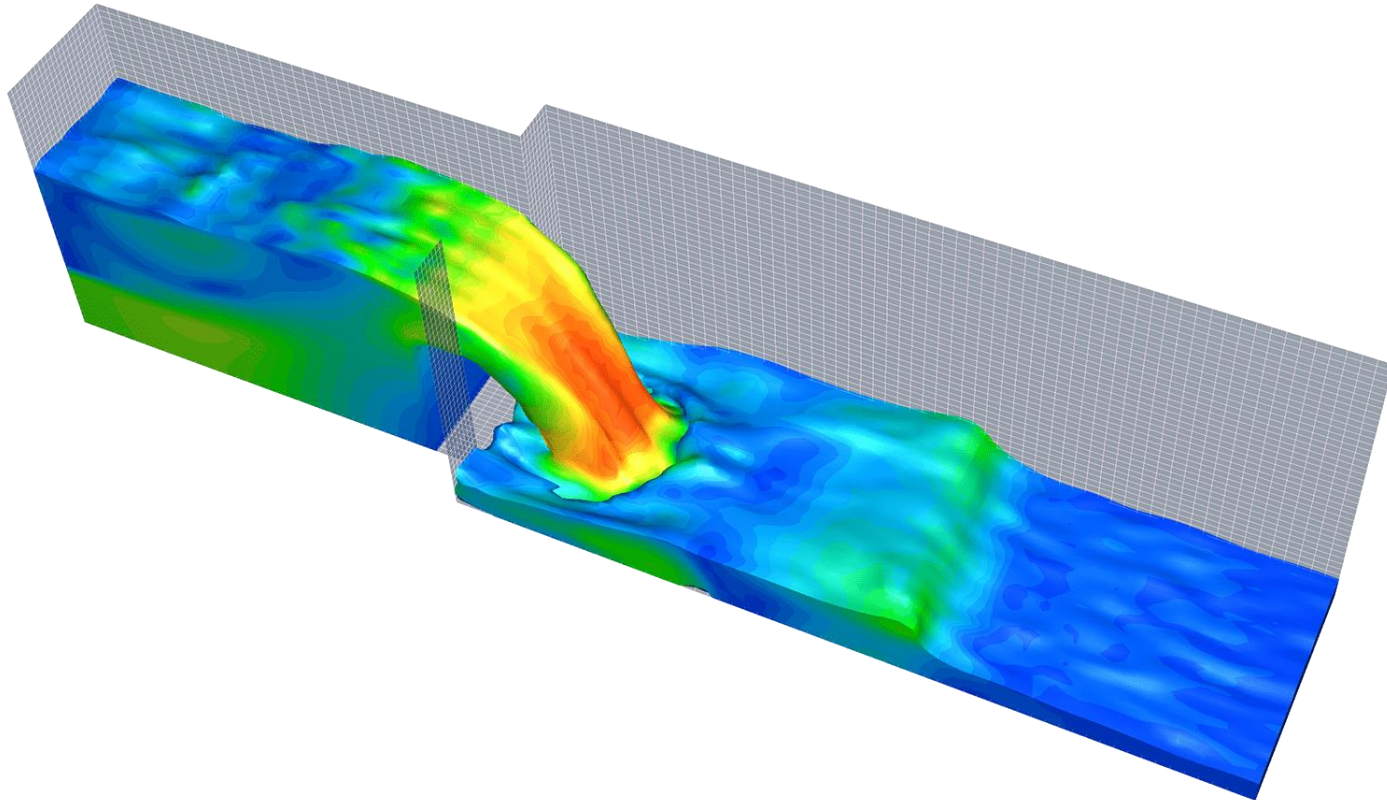


Modélisation numérique en génie chimique

GCH2535

INTRODUCTION



**POLYTECHNIQUE
MONTRÉAL**

LE GÉNIE
EN PREMIÈRE CLASSE

Diapositives adaptées de :

David Vidal

Bruno Blais

François Bertrand



Présentation de l'enseignant

Igor Belot



2013-2016
Baccalauréat
Calcul scientifique
FineMarine



**POLYTECHNIQUE
MONTRÉAL**

LE GÉNIE
EN PREMIÈRE CLASSE



2016-aujourd'hui
Candidat PhD
Lattice Boltzmann Method
Milieux poreux



Objectifs généraux

À l'aide de diverses applications en génie chimique et à partir de modèles mathématiques, ce cours vise à :

- rendre les étudiants aptes à **utiliser** et à faire une **étude critique** de la performance et de la précision de diverses **méthodes d'approximations numériques** pour le calcul scientifique
- faire **apprécier** l'importance des **erreurs** intervenant dans la résolution numérique de problèmes scientifiques et rendre les étudiants aptes à les contrôler
- faire comprendre les principaux **fondements mathématiques** des méthodes numériques afin d'en comprendre **les limites**
- démontrer comment on applique des techniques d'analyse numérique à la **réconciliation**, au **lissage** et à l'**interpolation des données** physico-chimiques
- faire **mettre en équations des phénomènes d'échanges** simples du génie chimique
- appliquer les méthodes de **différences finies**, **d'éléments finis** et de volumes finis à la simulation de phénomènes d'échanges simples

Au terme de ce cours, l'étudiant sera en mesure de :

- **identifier** le **problème mathématique** présent dans un modèle provenant d'une application du génie chimique
- **choisir** des **méthodes numériques** appropriées pour mettre en place une stratégie de résolution de ce problème
- **évaluer** la **performance** et la **précision** des méthodes numériques utilisées
- **évaluer** la **qualité du modèle numérique** utilisé dans le contexte de l'application étudiée

Plan de cours

| Semaine | Date | Séance | Notes | Sujet |
|---------|-----------------|--------|-------------------------|----------------|
| 2 | Mercredi 8 Jan | 1 | | EDP |
| 2 | Jeudi 9 Jan | 2 | | EDP |
| 3 | Mercredi 15 Jan | 3 | | EDP |
| 3 | Jeudi 16 Jan | 4 | Départ Devoir 1 (EDP) | EDP |
| 4 | Mercredi 22 Jan | 5 | | EDP |
| 4 | Jeudi 23 Jan | 6 | | TD#1 |
| 5 | Mercredi 29 Jan | 7 | Remise Devoir 1 (EDP) | Intro |
| 5 | Jeudi 30 Jan | 8 | | Intro / EDO |
| 6 | Mercredi 5 Fév | 9 | Partiel 1 (EDP) | CP#1 |
| 6 | Jeudi 6 Fév | 10 | | EDO |
| 7 | Mercredi 12 Fév | 11 | Départ Devoir 2 (MDF) | TD#2 |
| 7 | Jeudi 13 Fév | 12 | | MDF |
| 8 | Mercredi 19 Fév | 13 | | MDF |
| 8 | Jeudi 20 Fév | 14 | | MEF |
| 9 | Mercredi 26 Fév | 15 | | TD#3 (LAB-MDF) |
| 9 | Jeudi 27 Fév | 16 | | MEF |
| 10 | Mercredi 4 Mar | | Relâche | |
| 10 | Jeudi 5 Mar | | Relâche | |
| 11 | Mercredi 11 Mar | 17 | Remise Devoir 2 (MDF) | TD#4 (LAB-MEF) |
| 11 | Jeudi 12 Mar | 18 | Partiel 2 (EDO-MDF-MEF) | CP#2 |
| 12 | Mercredi 18 Mar | 19 | | Données exp. |
| 12 | Jeudi 19 Mar | 20 | Départ Devoir 3 | Données exp. |
| 13 | Mercredi 25 Mar | 21 | | Bilans |
| 13 | Jeudi 26 Mar | 22 | | TD#5 |
| 14 | Mercredi 1 Avr | 23 | | Bilans |
| 14 | Jeudi 2 Avr | 24 | | Opt./Rec. |
| 15 | Mercredi 8 Avr | 25 | Remise Devoir 3 | Opt./Rec. |
| 15 | Jeudi 9 Avr | 26 | | TD#6 |

Quelques EDP rencontrées en génie chimique

- Parmi les 3 phénomènes d'échange

1) Équation de la chaleur (parabolique):

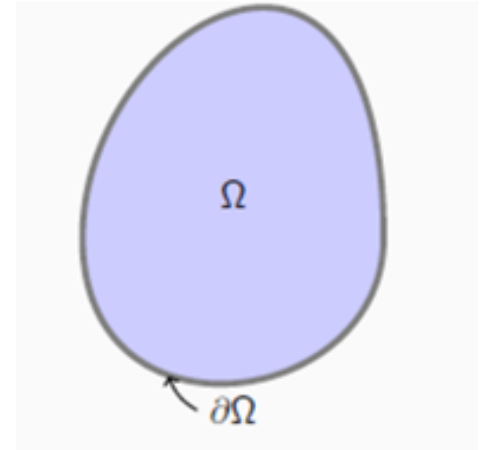
$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T + \dot{q}$$

2) Deuxième loi de Fick (parabolique):

$$\frac{\partial C_a}{\partial t} = D_a \nabla^2 C_a$$

3) Équation de Navier-Stokes (fluide incompressible):

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g}$$



Solution d'une EDP/EDO

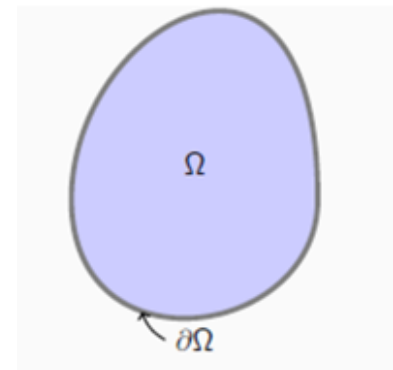
- Combien de solutions admet une équation comme celle-ci ?

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g}$$

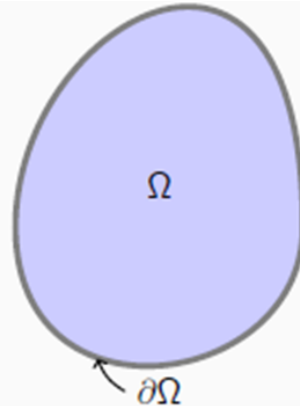
- **Réponse:** une infinité!! En fait, en général, pour pouvoir avoir une solution unique, des informations supplémentaires sont requises:
 - des conditions initiales (si le problème est transitoire)
 - le domaine (Ω) sur lequel l'équation s'applique
 - et des conditions frontières ($\partial\Omega$)



Problèmes aux limites

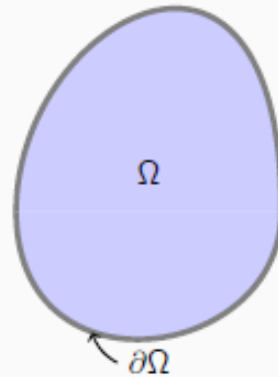


Types de conditions frontières



- ▶ **Dirichlet** : La valeur du champ inconnu est imposée sur le bord du domaine
 - ▶ $u(x) = u_D(x)$ sur $\partial\Omega$
- ▶ **Neumann** : La dérivée (ou une combinaison des dérivées) du champ inconnu est imposée sur le bord du domaine
 - ▶ $\partial u / \partial n = \phi(x)$ sur $\partial\Omega$
- ▶ **Robin** : Une combinaison de la valeur et de la dérivée du champ inconnu est imposée sur le bord du domaine
 - ▶ $\partial u / \partial n + k u(x) = 0$ sur $\partial\Omega$

Types de conditions frontières



- ▶ **Mixte** : Condition limite de Dirichlet sur une partie du bord du domaine et condition limite de Neumann sur une **autre** partie du domaine.
 - ▶ $u(x) = u_D(x)$ sur $\partial\Omega_D$
 - ▶ $\partial u / \partial n = \phi(x)$ sur $\partial\Omega_N$
 - ▶ $\partial\Omega_D \cap \partial\Omega_N = \emptyset$; $\partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N = \partial\Omega$

Remarques

- ▶ Un problème de Neumann n'a pas de solution unique
- ▶ Choisir une condition limite représentant le comportement réel du problème n'est pas toujours aisé. C'est un **choix** de modélisation.

Méthodes de résolution EDP/EDO

- Discrétisation temporelle :
 1. Schémas d'Euler
 2. Schémas de Runge-Kutta
 3. Schémas avec discrétisation du terme source (Crank-Nicolson, Adams-Bashforth)
- Discrétisation en espace :
 1. Méthode de différences finies
 2. Méthode d'éléments finis
 3. Méthode de volumes finis
- Autres méthodes :
 1. Méthodes spectrales
 2. Méthode des éléments discrets
 3. Méthode de Boltzmann sur réseau
 4. Méthode «smoothed particle hydrodynamics»
 5. ...

Quelle méthode pour quelle equation ?

- **EDP Elliptiques : Éléments finis (+ un peu de Différences finies)**

- Equations stationnaires
- Statique du solide déformable
- Ecoulement statique, écoulement de Stokes
- Thermique stationnaire

- **EDP Paraboliques : Éléments finis (+ un peu de Différences finies)**

- Equations transitoires
- Phénomènes de diffusion

- **EDP Hyperboliques : Volumes finis (fluides)**

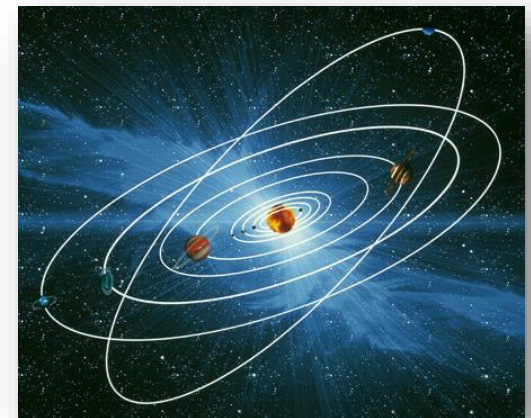
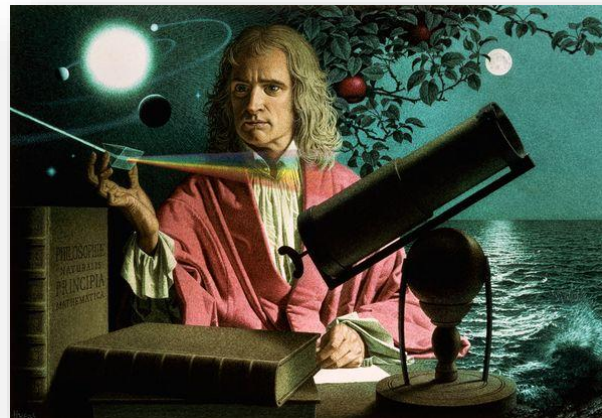
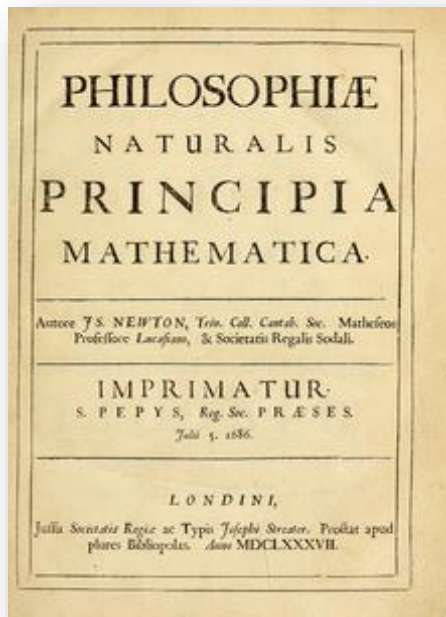
- Equation des ondes
- Equations transitoires

Le paradigme **classique** en science et ingénierie

La théorie mathématique et l'expérience sont combinées pour prédire la nature

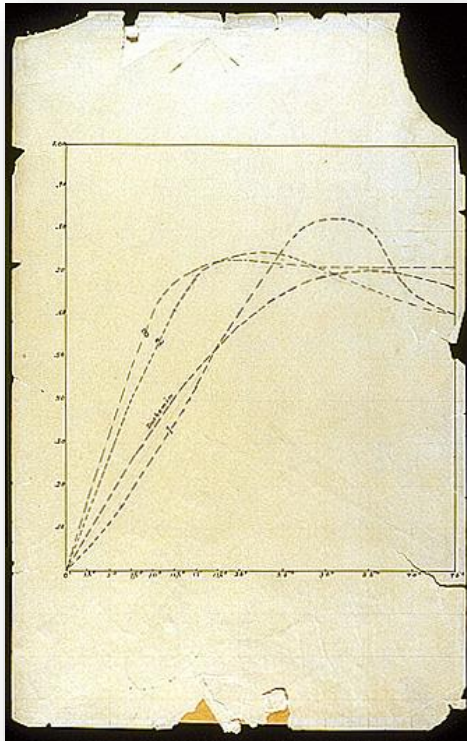
Théorie \Leftrightarrow *Expérience*

$$F_{A/B} = F_{B/A} = G \frac{m_A m_B}{d^2}$$

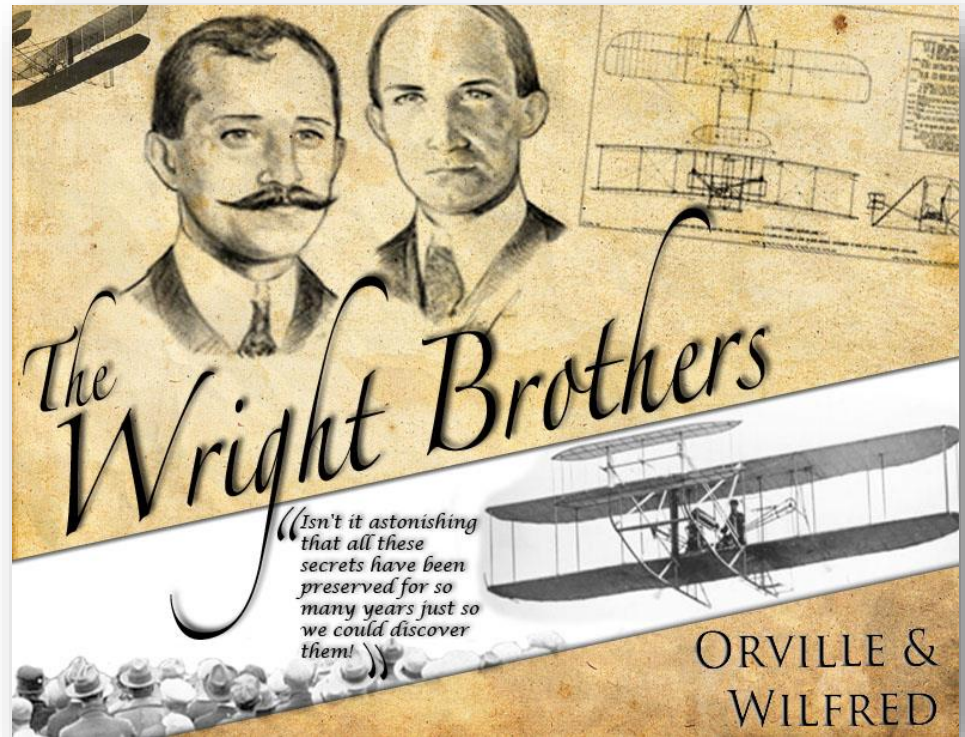


Sir Isaac Newton (1643-1727) a prédit le mouvement des planètes!

Le paradigme classique marche!



Données de soufflerie



Kitty Hawk, Caroline du Nord, 1903

Les frères Wright ont utilisé l'expérience et la théorie pour concevoir le *Flyer*!

Le paradigme **moderne** en science et ingénierie

Théorie \Leftrightarrow *Expérience* \Leftrightarrow *Modélisation numérique*



La conception des avions modernes repose sur la CFD, les essais en soufflerie et la théorie!

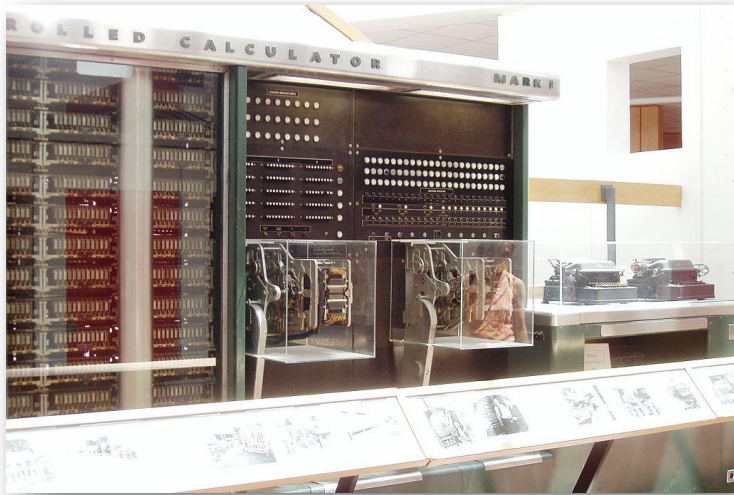
Le premier calculateur analogique connu....



Machine d'Anticythère

- ✓ Permet de calculer la position des astres
- ✓ Mécanisme en bronze fait de dizaines d'engrenages
- ✓ Retrouvé en Grèce sur une galère romaine datant de ... 87 av. J.-C. !

L'un des tout premiers calculateurs numériques



L'ASCC

(Automatic Sequence
Controlled Calculator),
appelé le **Mark I**

- ✓ Conçu par Howard H. Aiken
- ✓ Construit chez IBM
- ✓ Commencé en 1937
- ✓ Livré par navire à Harvard en février 1944
- ✓ Entièrement automatique
- ✓ Capacités de programmation limitées

Avant l'essor de l'aire numérique...



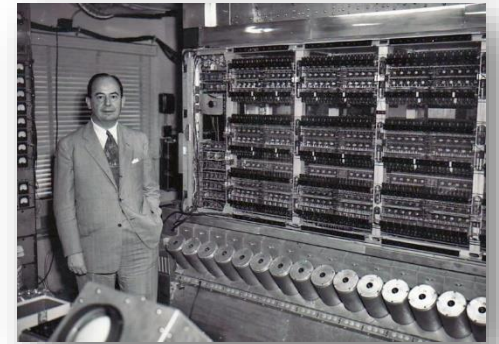
Retrace l'histoire de la Katherine G. Johnson, mathématicien qui a calculé les trajectoires sur le programme Mercury (1958) et d'autres missions



Ordinateur à la NACA dans les années 40-50 !!
(ancêtre de la NASA)

L'essor de l'analyse numérique

- Dans le cadre du **second conflit mondial**, les besoins en calculs dans l'industrie, notamment aéronautique, se sont accrus
- Le **Laboratoire National de Los-Alamos (LANL)** au Nouveau-Mexique est considéré comme le **berceau** de la modélisation numérique moderne
- **Le tournant** dans le développement informatique: l'invention du **transistor**

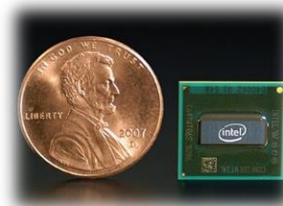
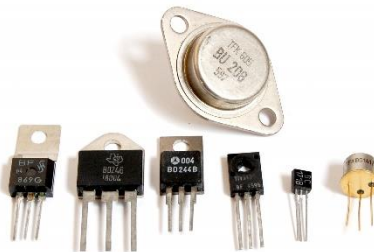


John von Neumann (1903-1957)



Alan Turing (1912-1954)

Deux des pères fondateurs de l'informatique



Évolution des transistors

Quelques définitions...

■ **Modélisation :**

- « *n.f. – 1975; de modéliser – Mise en équation d'un phénomène complexe permettant d'en prévoir les évolutions* » – Le Petit Robert
- Action visant à créer un modèle
- La modélisation est toujours basée sur une **simplification de la réalité physique** et vise à ne prendre en compte que les **phénomènes physiques importants** quant au problème à étudier

■ **Modèle :**

- « **Représentation [simplifiée]** d'un système physique ou d'un procédé développée dans le but d'améliorer notre capacité à **comprendre, prédire ou contrôler** son comportement » – Oberkampf & Roy, 2010

■ **Simulation :**

- « *Exécution ou utilisation d'un modèle dans le but d'obtenir un résultat spécifique* » – Oberkampf & Roy, 2010

■ **Modélisation numérique :**

- Mise au point d'un **outil informatique** capable de **résoudre un modèle mathématique** approché du comportement du système physique d'intérêt au moyen de méthodes de discrétisation

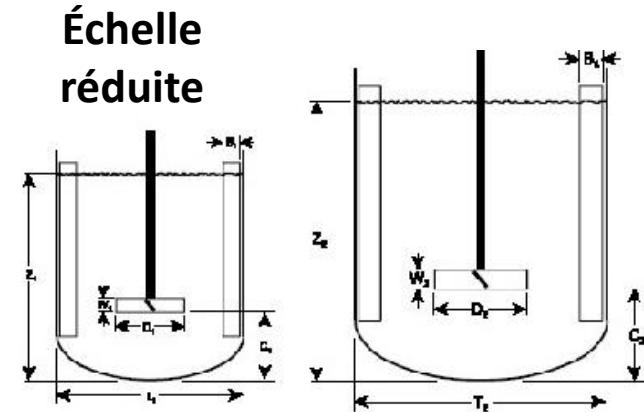
Modélisation physique vs. modélisation numérique

■ Intérêt de la modélisation physique en GCH

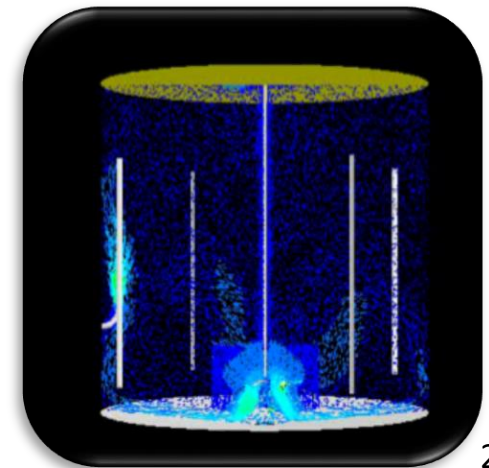
- Compréhension des mécanismes fondamentaux qui régissent les phénomènes d'échange
- Études préliminaires
- Prototypage
- Diminution du temps/coût de mise au point d'un procédé
- Complément aux données expérimentales à l'échelle réelle
- Optimisation de la conception
- Amélioration de procédés existants

■ Intérêt de la modélisation numérique en GCH

- Les EDP associées aux modèles physiques ne peuvent généralement être résolues analytiquement
- **Pourquoi ?**



Similarité géométrique au moyen de nombres adimensionnels



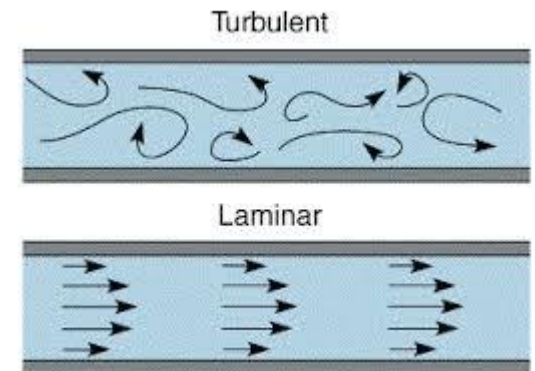
Exemple de nombres adimensionnels (sans unités)

Masse volumique du fluide Vitesse caractéristique de l'écoulement Longueur caractéristique de l'écoulement

$$Re = \frac{\rho U D}{\mu} \quad [=] \quad \frac{\frac{kg}{m^3} \cdot \frac{m}{s} \cdot m}{\frac{kg}{m \cdot s}}$$

Nombre de Reynolds Viscosité du fluide

$Re > \sim 2100$ → écoulement turbulent dans une conduite
 $Re \ll \sim 2100$ → écoulement laminaire dans une conduite

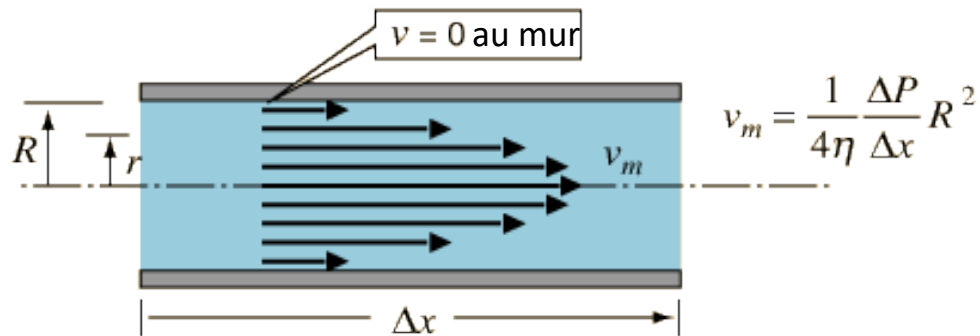


Pourquoi la modélisation numérique ?

Equation de Navier-Stokes (mécanique des fluides):

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g}$$

Solution analytique pour le cas simple d'un écoulement dans une conduite cylindrique:



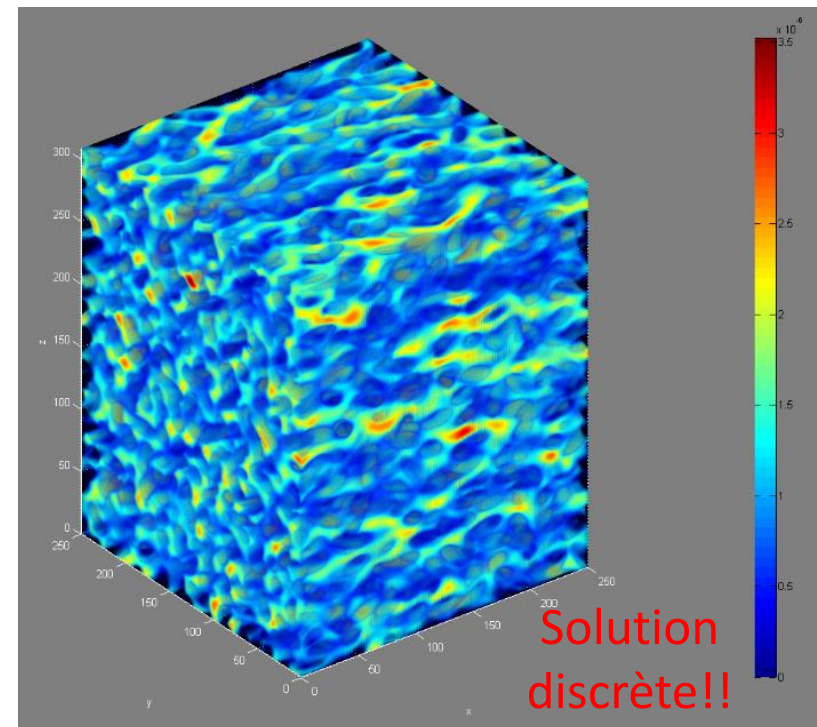
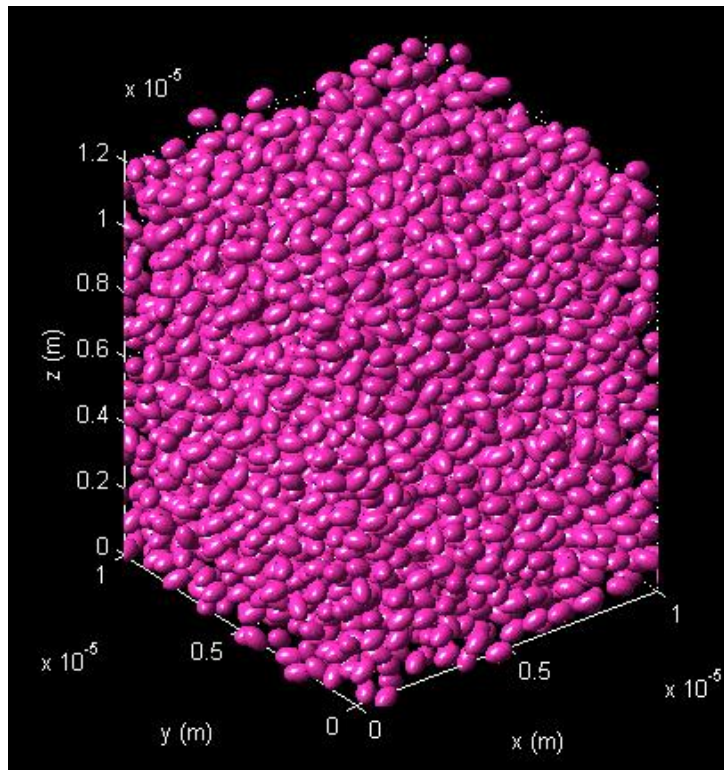
$\frac{\Delta P}{\Delta x}$ = Gradient de pression
 η = Viscosité

$v(r) = v_m \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right)$
Profil de vitesse du fluide

Solution continue!!

Pourquoi la modélisation numérique ? (suite)

Par contre, quelle est la solution pour la géométrie ci-dessous??



Solution obtenue par la **Mécanique des Fluides Numérique (CFD en anglais)** au moyen de la Méthode de Boltzmann sur Réseau

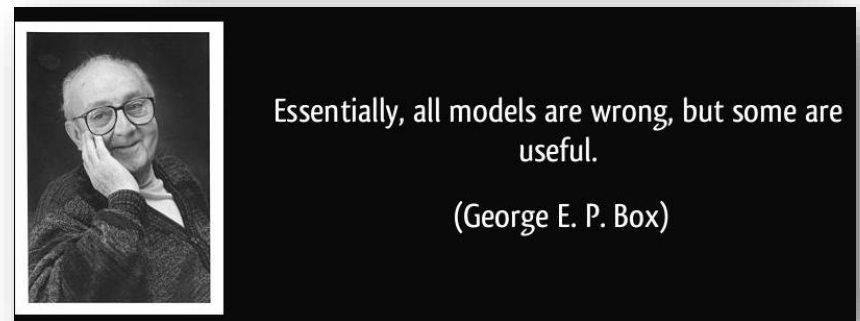
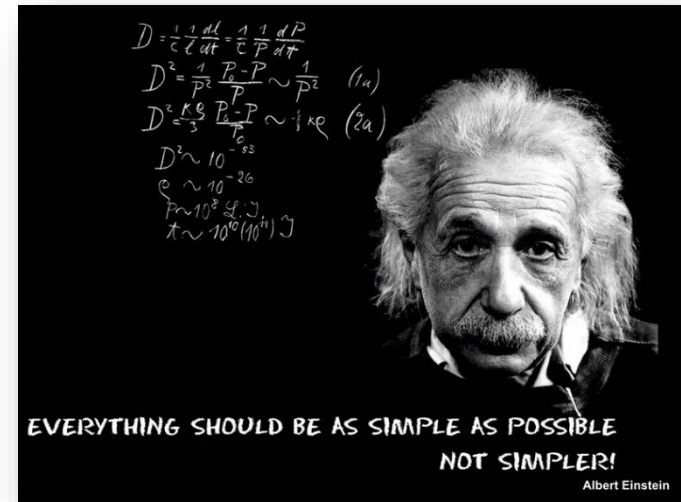
Problèmes du prix du millénaire du CMI

- Ils comptent 7 défis mathématiques réputés insurmontables posés par le [Clay Mathematics Institute](http://www.claymath.org/) en 2000
 - Hypothèse de Riemann
 - Conjecture de Poincaré (résolue en 2003)
 - Problème P = NP
 - Conjecture de Hodge
 - Conjecture de Birch et Swinnerton-Dyer
 - Équations de Navier-Stokes ← Certains problèmes rencontrés en ingénierie peuvent donc être très compliqués!!
 - Équations de Yang-Mills
- La résolution de chacun des problèmes est dotée d'un prix d'un **1M \$US** offert par l'institut.
- À ce jour, six des sept problèmes demeurent non résolus.



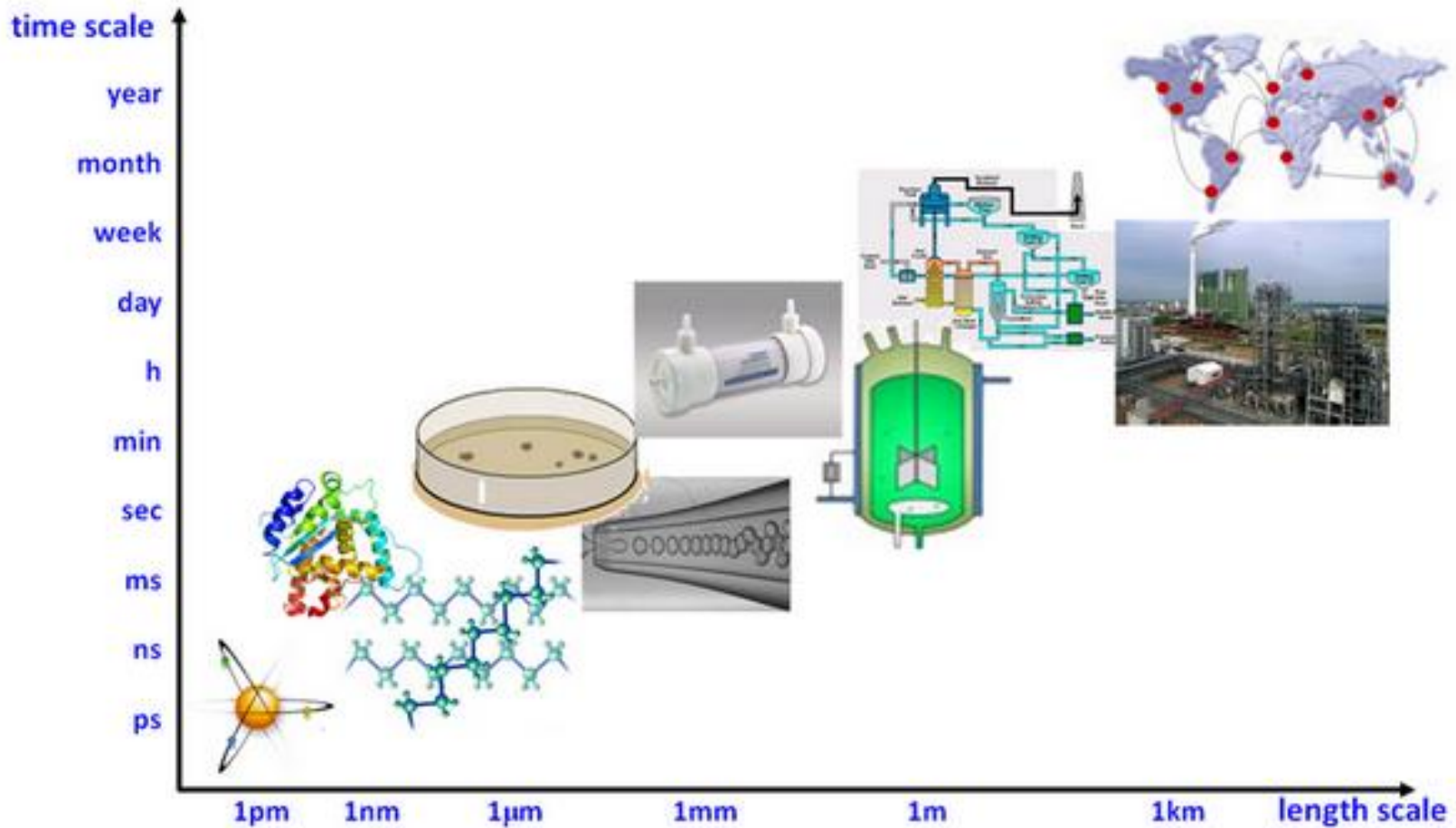
Degré de sophistication d'un modèle

- Un modèle n'a pas à être parfait pour être utile
- Son rôle n'est pas de remplacer l'expérimentation
- La modélisation vise plutôt à fournir des renseignements sur un procédé
- Dans l'industrie, le temps de cycle pour le développement d'un produit est généralement le facteur limitant



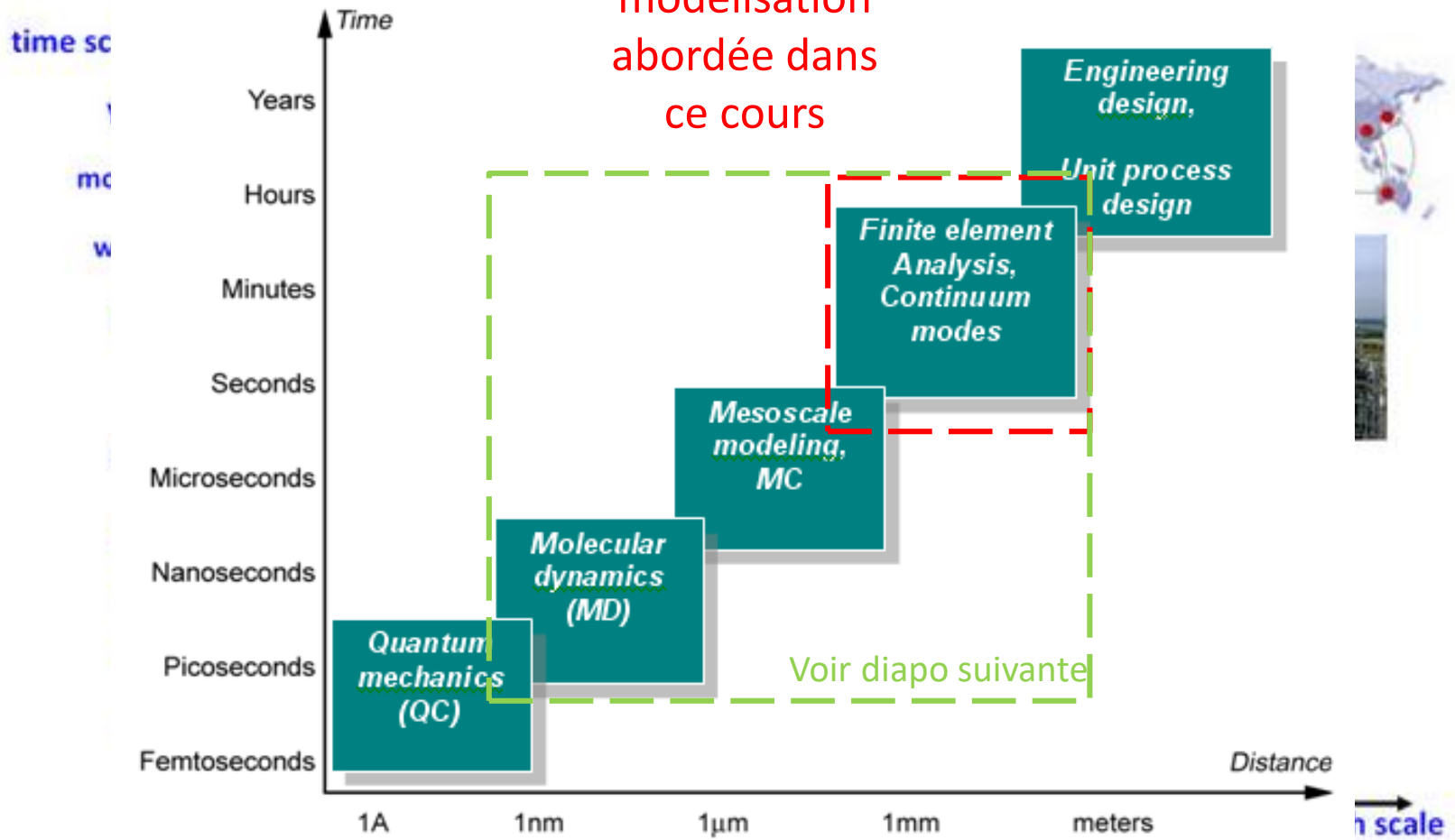
Une bonne stratégie consiste à commencer avec un modèle simple, le valider puis l'améliorer selon les besoins et les contraintes de temps et d'argent

Le type de méthode utilisée pour établir un modèle dépend de l'échelle du problème!

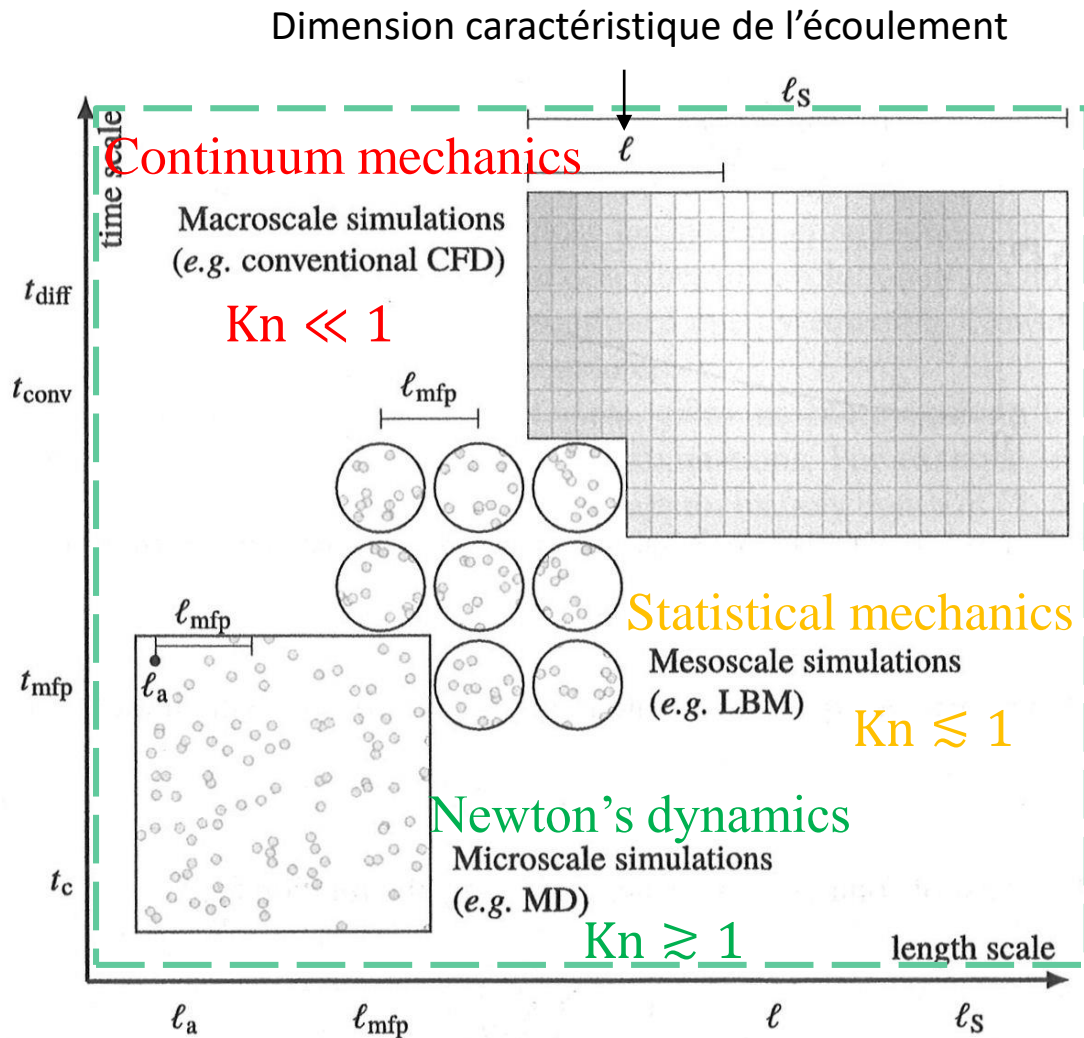


Le type de méthode utilisée pour établir un modèle dépend de l'échelle du problème!

Échelle de modélisation abordée dans ce cours



Le type de méthode utilisée pour établir un modèle dépend de l'échelle du problème! (info additionnelle pour la CFD)



(Krüger et al., 2017)

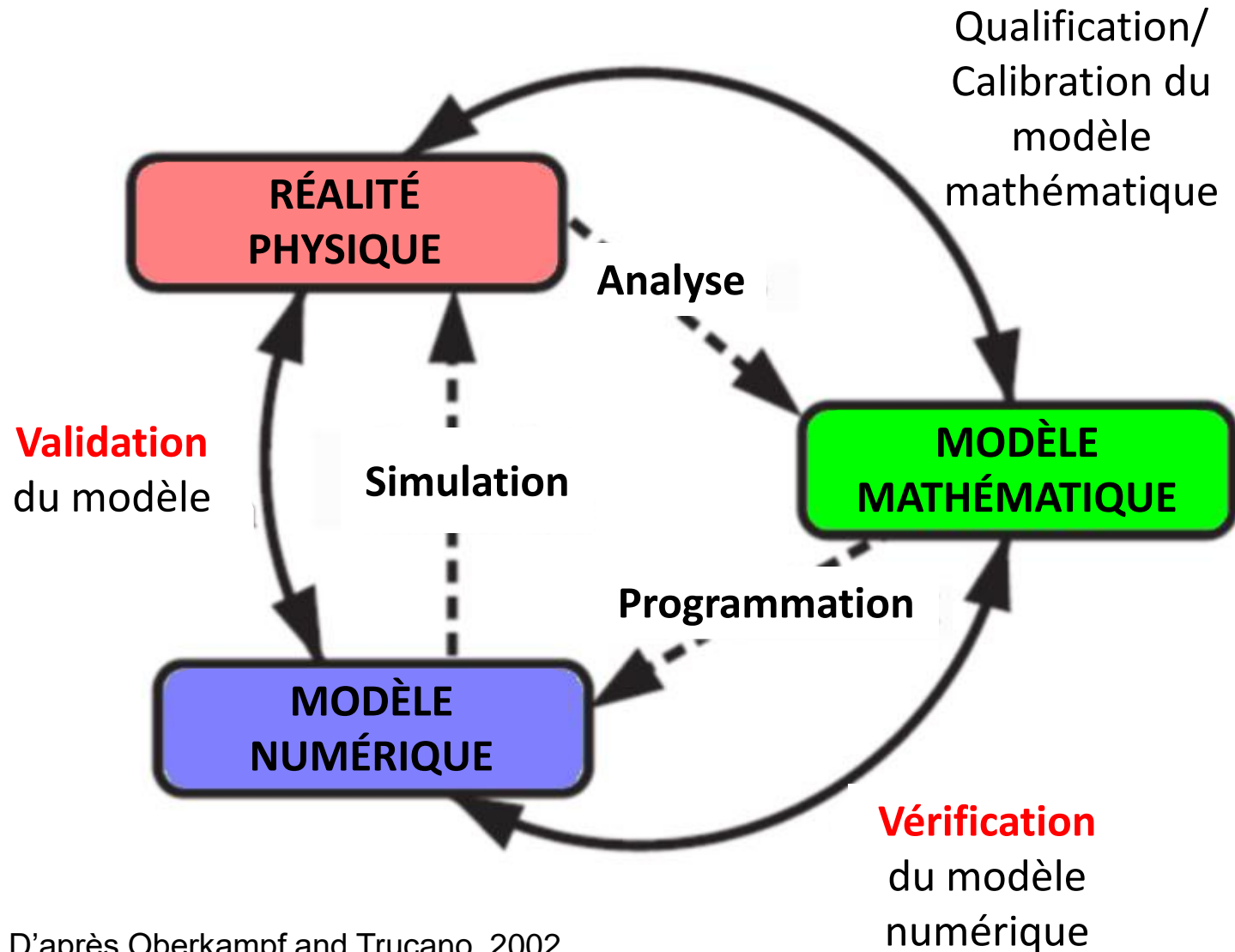
Libre parcours moyen des molécules

Nombre de Knudsen:

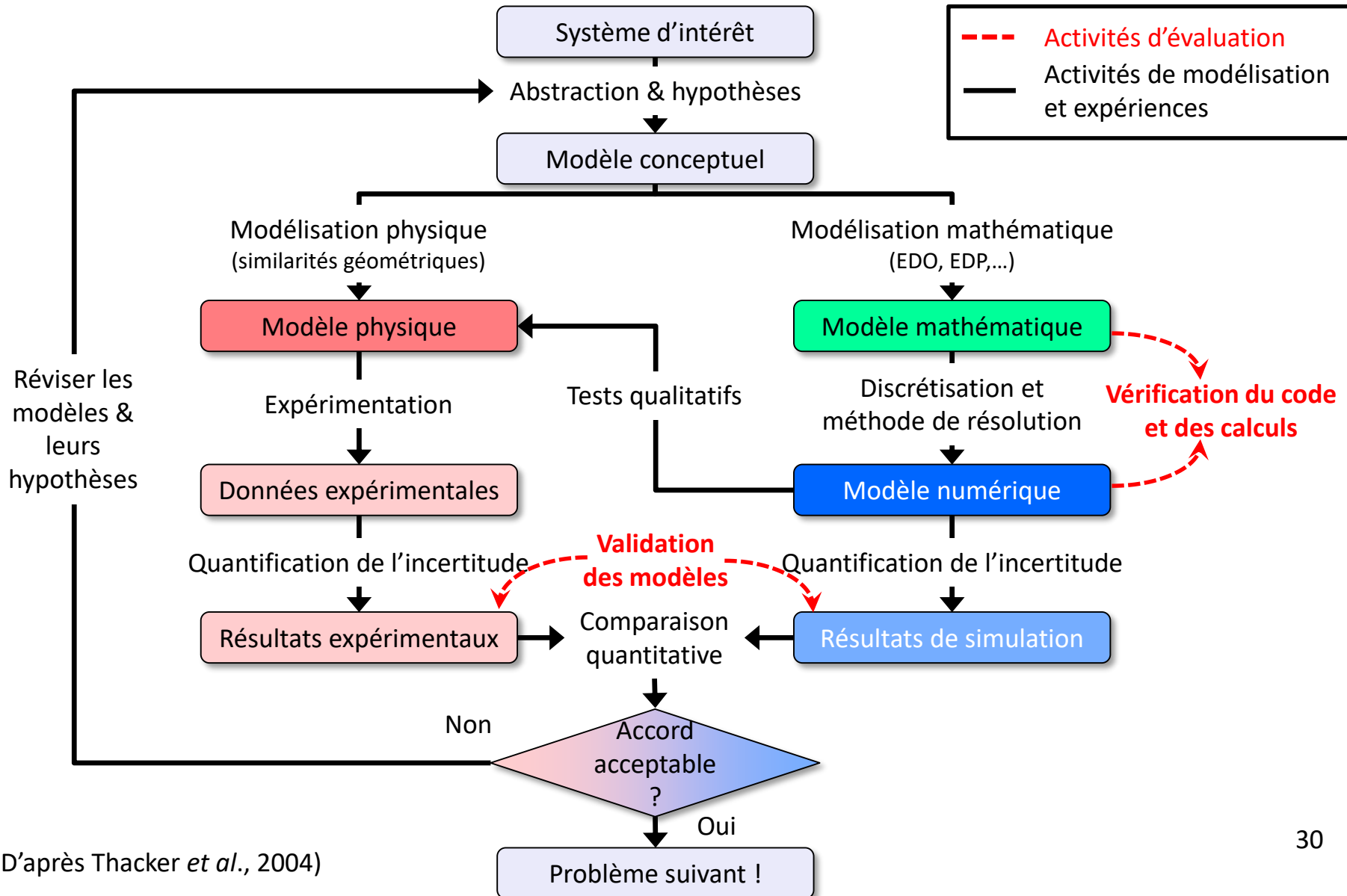
$$Kn = \frac{l_{mfp}}{l}$$

Définit la transition d'un type de méthode à l'autre en CFD

Cycle de la modélisation simplifié

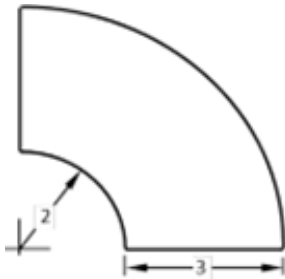


Cycle de la modélisation : développement, vérification et validation d'un modèle

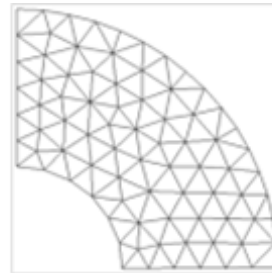


Phases typiques de la modélisation numérique

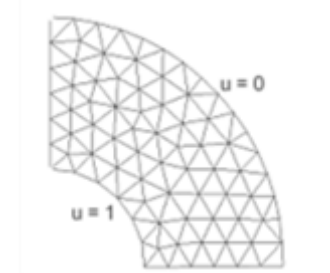
1. Prétraitement (pre processing):



Construction de la géométrie



Discrétisation (maillage)

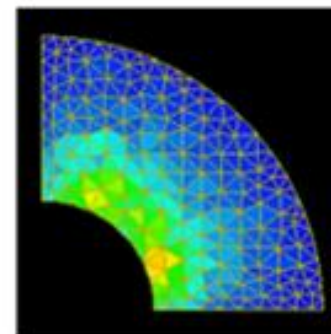


Définition des conditions frontières et initiales

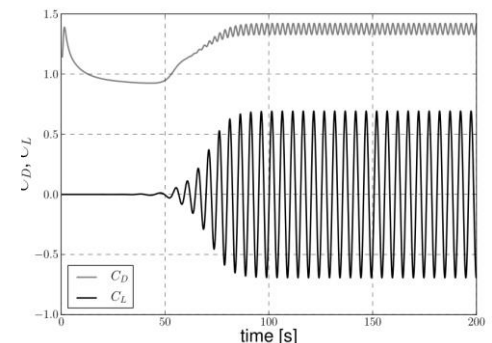
2. Résolution au moyen d'un solveur (code commercial ou maison) :



3. Post-traitement (post-processing) :



Visualisation des résultats



Extraction des quantités d'intérêt

Principales sources d'erreurs d'un modèle numérique

1. **L'erreur sur le choix du modèle mathématique** représente la différence entre la solution exacte du modèle mathématique et le comportement réel du système physique
2. **L'erreur de discrétisation** représente la différence entre la solution exacte du modèle mathématique et la solution exacte du modèle numérique (maillage & troncature)
3. **L'erreur d'origine informatique** due à la précision limitée des calculs effectués par l'ordinateur (arrondi) et éventuellement à des fautes de programmation

L'art de la modélisation consiste à **maîtriser ces erreurs**, de manière à s'assurer que la solution fournie par le logiciel est « assez » proche du comportement réel du système physique étudié

Solveurs CFD (Computational Fluid Dynamics)

■ Commerciaux :

- Adapco (*STAR-CD, CCM+*)
- Ansys Inc. (*Fluent, CFX*)
- Comsol (*Comsol Multiphysics*)
- Flow Science Inc. (*FLOW-3D*)
- Exa (*PowerFLOW*)
- etc...

■ « Open source » :

- OpenCFD Ltd. (*OpenFOAM*)
- FlowKit (*Palabos*)
- etc...

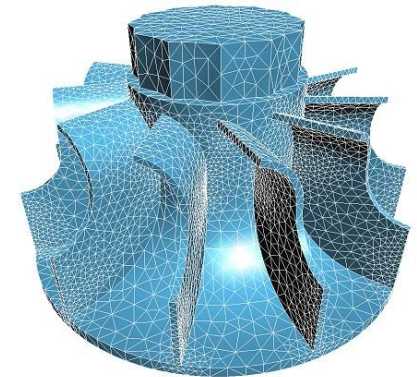
| Position | 1984 | 1994 | 2004 | 2014 |
|----------|----------------------------|---------------------------------|-----------------------------|--|
| #1 | CHAM (Phoenics) | FLUENT Inc. (FLUENT) | FLUENT Inc.* (FLUENT) | ANSYS INC. ** (CFX, FLUENT) |
| #2 | FDI (FIDAP) | FDI (FIDAP) | CD-ADAPCO (StarCD) | CD-ADAPCO (CCM+, StarCD) |
| #3 | FLUENT Inc. (FLUENT) | CD-ADAPCO (StarCD) | ANSYS Inc. ** (CFX) | MENTOR GRAPHICS *** (FloTHERM, FloEFD, Flowmaster) |
| #4 | FLOW SCIENCES (Flow-3D) | AEA TECHNOLOGIES (Flow3D) | FLOMERICS LTD (FloTHERM) | EXA CORP. (PowerFLOW) |
| #5 | SOFTWARE CRADLE (Scryu) | FLOMERICS LTD (FloTHERM) | EXA CORP. (PowerFLOW) | SOLIDWORKS (Solidworks Flow Simulation) |

Liste exhaustive sur : http://www.cfd-online.com/Wiki/Codes#Commercial_codes

Générateurs de maillage et post-processeurs graphiques

■ Générateurs de maillage :

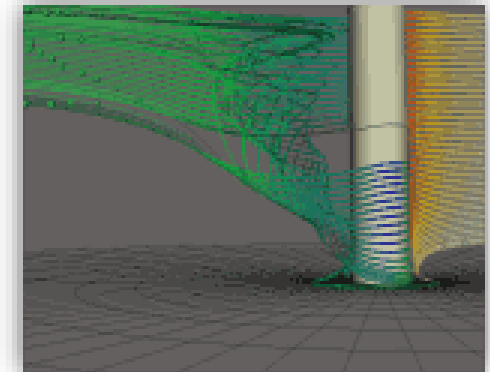
- Fluent-Ansys (*GAMBIT*)
- Ansys (*CFX-Mesh, ICEM CFD*)
- Simulog (*GHS3D*)
- CEA/EDF (*Salome*) (o.s.)
- UofA (*Aranea*)
- ...



GHS3D, Simulog

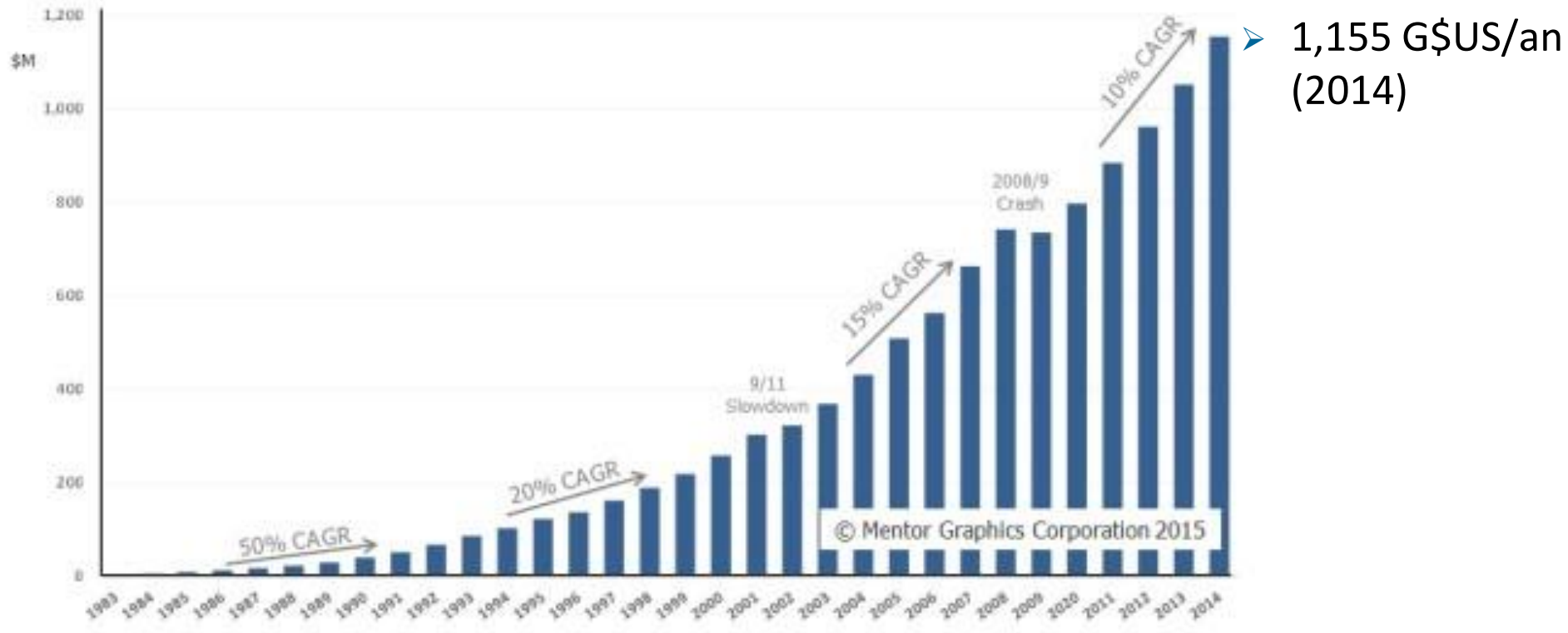
■ Post-processeurs graphiques :

- CEI (*Ensignt*)
- Tecplot Inc. (*Tecplot 360*)
- LANL (*Paraview*) (o.s.)
- Advanced Visual Systems (*AVS*)
- CEA/EDF (*Salome*) (o.s.)
- CERCA (*VU*)
- ...



Ensignt, CEI

Revenu mondial du marché de la CFD (1983-2014)



- Coût typique d'un logiciel
 - Achat: 70 000 \$US (+1%/mois pour la maintenance)
 - Location: 25 000 \$US /an (25%)
 - + Station de travail: 10 000 \$US (10%)
 - + Temps ingénieur (65%)

Langages de programmation pour les codes « maison »

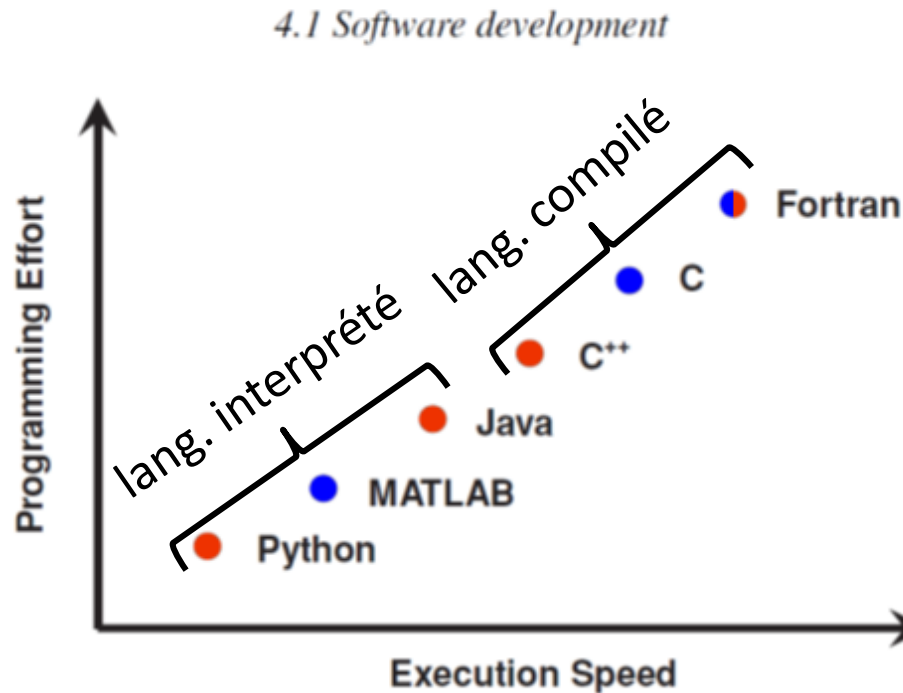


Figure 4.1 *Qualitative* example of programming effort versus execution speed (adapted from Wilson, 2009).

- Langages de programmation **procéduraux** → séries de calculs mathématiques
- Langages de programmation **orientés-objet** → relations complexes entre données

Pouvez-vous nommer des composants d'un ordinateur et leur rôle exact ?

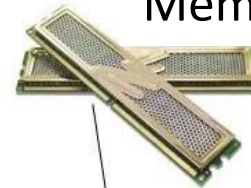


Composants internes d'un ordinateur

CPU/processeurs
(contenant des cœurs)



Mémoire vive (RAM)



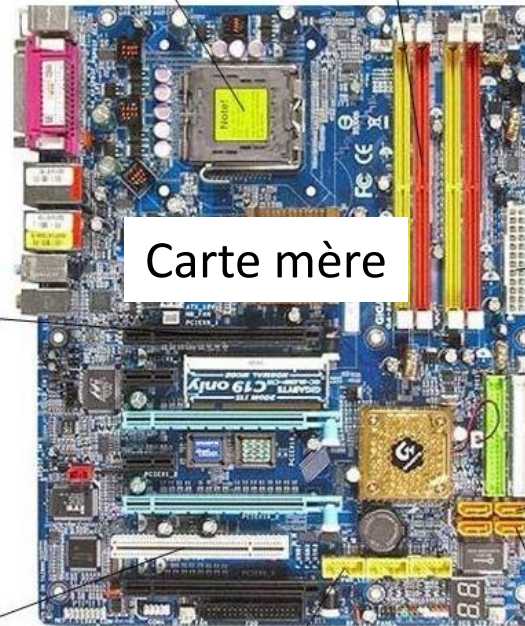
Bloc d'alimentation



Carte graphique (GPU)



Carte mère



Disques durs



Adaptateur sans
fil ou réseau



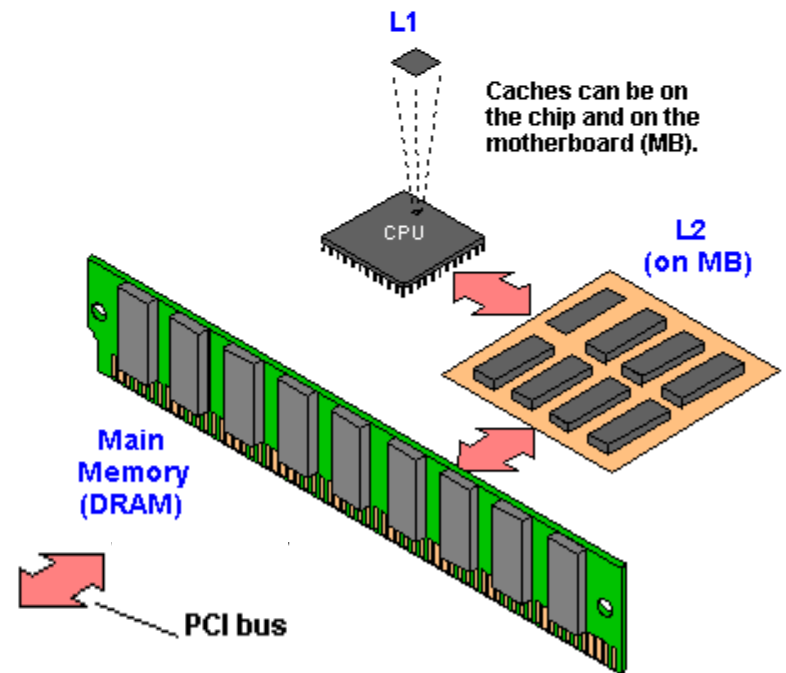
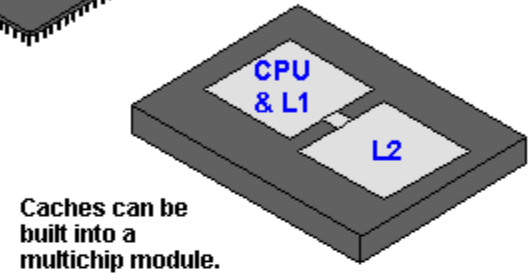
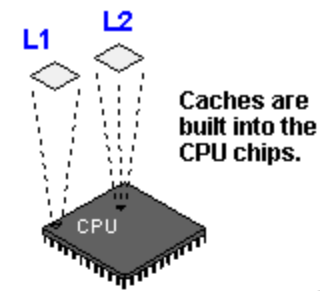
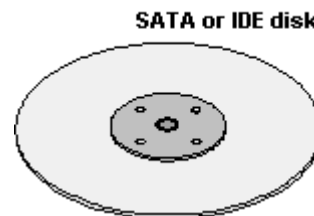
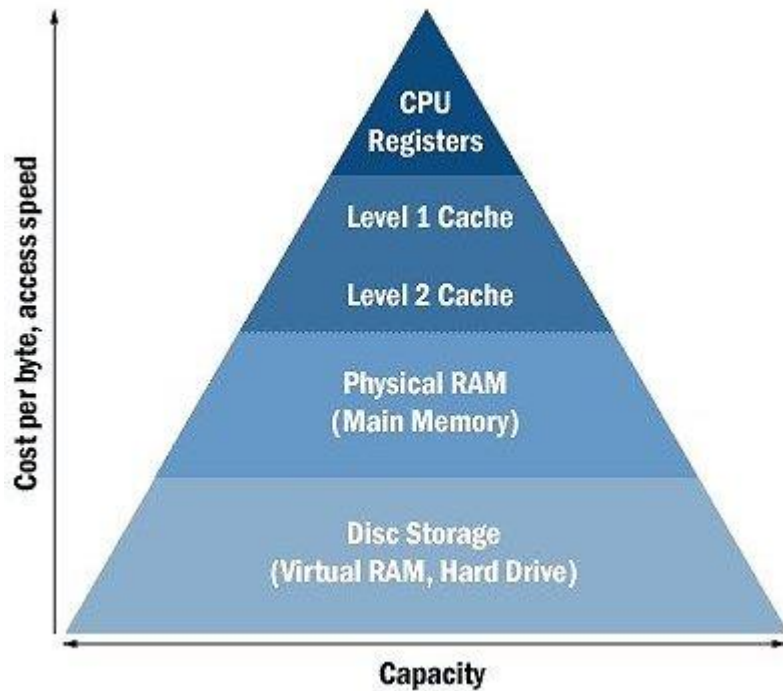
Lecteurs de
carte mémoire



Graveur/lecteur DVD

+ Bus PCI Express
+ ventilateur
+ ...

Les divers types de mémoires (cache & RAM)



Main Memory (DRAM)

PCI bus

Représentation des nombres

Entiers → 4 octets (habituellement)

→ peuvent représenter des entiers allant jusqu'à $\pm 2.147.483.648$ ($2^{(32-1)}$)

Réels simple precision → 4 octets

Réels double precision → 8 octets

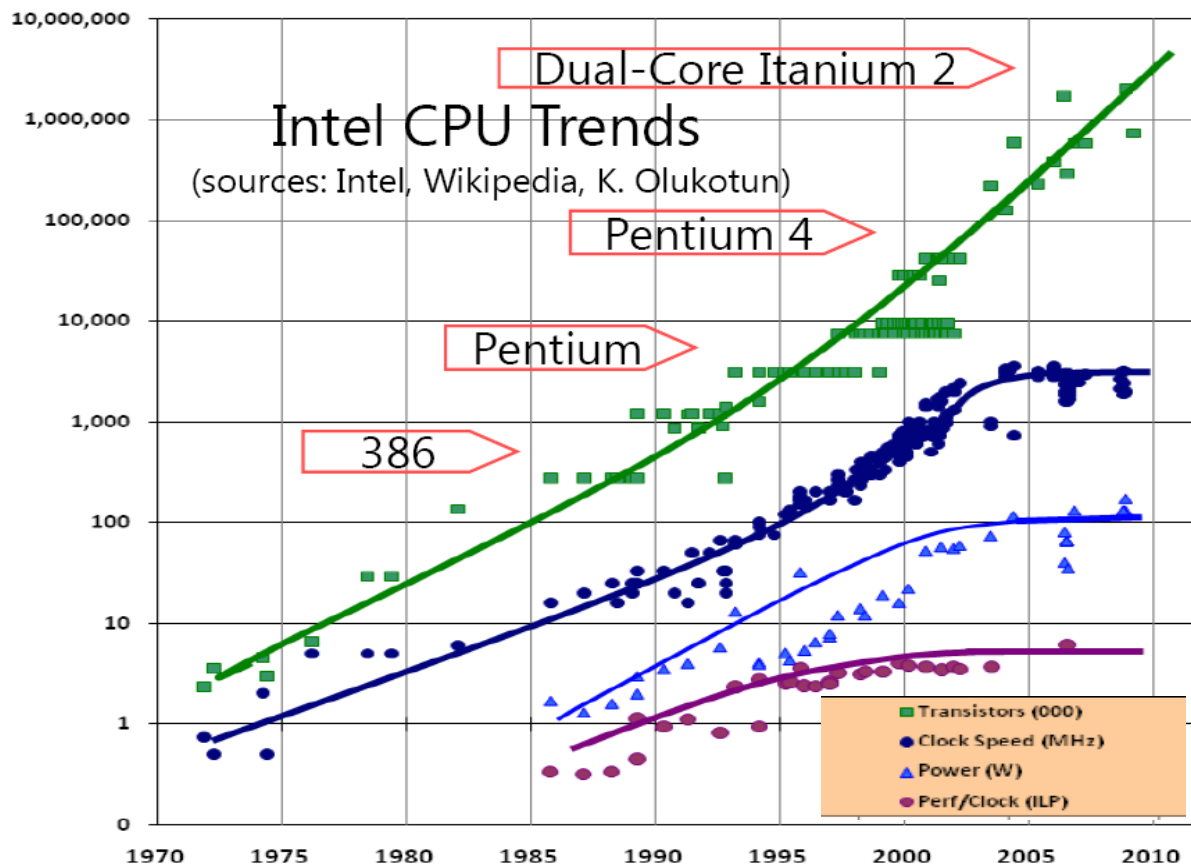
$$1.3254 = \underbrace{13254}_{\text{mantisse}} \times \overbrace{10^{-4}}^{\text{exposant}}$$

| Précision | Encodage | Signe | Exposant | Mantisse | Valeur d'un nombre | Précision | Chiffres significatifs |
|------------------|----------|-------|----------|----------|---------------------------------------|-----------|------------------------|
| Simple précision | 32 bits | 1 bit | 8 bits | 23 bits | $(-1)^S \times M \times 2^{(E-127)}$ | 24 bits | environ 7 |
| Double précision | 64 bits | 1 bit | 11 bits | 52 bits | $(-1)^S \times M \times 2^{(E-1023)}$ | 53 bits | environ 16 |

Source: Wikipedia

Puissance de calcul – Loi de Moore

- Loi de Moore: la puissance des ordinateurs doublent tous les 18-24 mois
- CRAY-1 (1976): 100 Mflops et 8MB (mémoire) pour 5 000 000 US\$
- Pentium 4 2.5 GHz (2002): 5 Gflops et 4 GB (mémoire) pour 2 000 US\$
- Core i7 3.2 GHz (2010): 100 Gflops et 16 GB (mémoire) pour 2000 US\$



Moore's law

Architecture
Multi-
Coeurs/CPU

Parallélisation
des codes de
calcul

Simulation sur ordinateur parallèle



Cedar

(Simon Fraser University/Compute Canada)

59 776 cœurs

Xeon E5-2650v4 12C 2.2GHz (Dell EMC)

Mémoire vive totale: 114 688 Go

Stockage total: N/A Go

Réseau Intel Omni-Path

Performance : 1,337 Pflops

94^{ème} au
[TOP500!!](#)
(en 2017)

Applications typiques en GCH

- Mécanique des fluides (CFD), transfert de chaleur et/ou de matière
 - Écoulements mono- ou polyphasiques
 - Écoulements newtoniens, non-newtoniens généralisés ou viscoélastiques
 - Écoulements isothermes ou non-isothermes
 - Écoulements avec ou sans réaction chimique
 - Écoulements granulaires
- De nombreux problèmes font appel à des résolutions dites « couplées » des trois phénomènes d'échange

Exemples d'application tirées des projets de
recherche de l'URPEI



Unité de Recherche en Procédés d'Écoulements Industriels



François Bertrand
Director



Louis Fradette
Professor

- ◇ 2 research associates
- ◇ 11 PhD students
- ◇ 7 MSc students

Collaborators



Jamal Chaouki
Professor



Robert Legros
Professor

ratiopharm

Hydro Québec
Institut de recherche



ARKEMA
The world is our inspiration

Fisheries and Oceans Science / Pêches et Océans Sciences

Auto21
Innovation Through Research Excellence
L'innovation par l'excellence en recherche



Fondation canadienne pour l'innovation
Canada Foundation for Innovation



TOTAL

MERCK FROSST

Natural Resources Canada / Ressources naturelles Canada

Ressources naturelles Canada

Université de Montréal

Queens UNIVERSITY

Partenaires

Fonds de recherche sur la nature et les technologies
Québec



UNAM
Universidad Nacional Autónoma de México

FPInnovations

CRAY VALLEY
La résine par excellence

Développement économique, Innovation et Exportation
Québec

PRAXAIR

SNPE
MATÉRIELS ÉNERGÉTIQUES
GRUPE SAPE

Sumitomo Corporation

P&G

TEVA

Investigations numériques et expérimentales d'écoulements polyphasiques de fluides et de poudres complexes pour divers procédés du génie chimique

- agitation mécanique
- procédés de mélange batch et en ligne
- écoulements granulaires
- écoulements en milieux poreux
- filtration des aérosols
- couchage
- extrusion
- ...

Exemple d'application: mélange granulaire

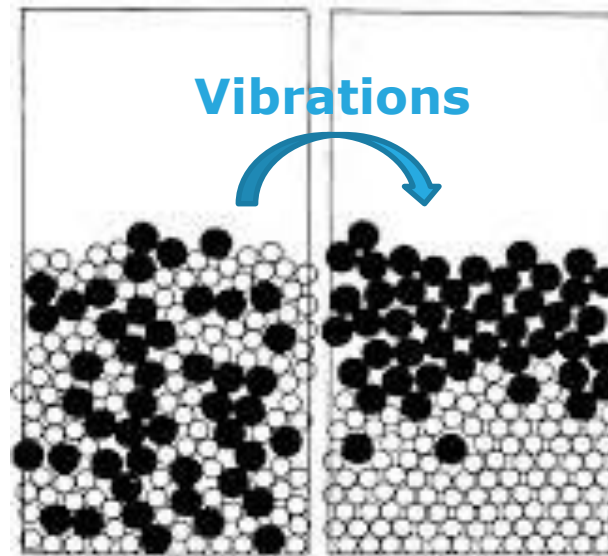
- Applications dans de nombreuses industries
 - Alimentaire, chimique, minière, pharmaceutique, recyclage
 - Particules de formes et de tailles diverses
 - De grains grossiers jusqu'à des fines particules
- La conception de ce type de procédé passe par la connaissance des phénomènes physiques qui gouvernent les écoulements granulaires
- Exemple: fabrication de pilules dans l'industrie pharmaceutique



PRÉDIRE L'ÉCOULEMENT/MÉLANGE DE MILIEUX GRANULAIRES N'EST PAS SI FACILE...



Le phénomène de ségrégation dit « des noix du Brésil »

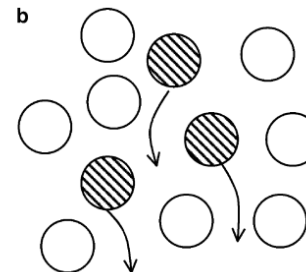
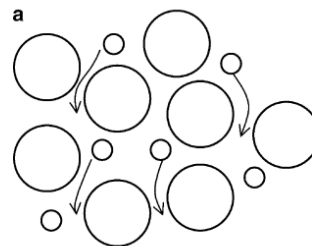


Autres conséquences:



Différences de:

- a) tailles → percolation
- b) densités



LE PHÉNOMÈNE DE SÉGRÉGATION DIT « DES NOIX DU BRÉSIL »



MODÉLISER LES ÉCOULEMENTS GRANULAIRES PAR LA MÉTHODE DES ÉLÉMENTS DISCRETS (DEM)



Calculer les trajectoires des grains au moyen de la seconde loi de Newton:

$$m\vec{a} = m \frac{d^2\vec{x}}{dt^2} = \sum_i \vec{F}_i$$

Masse

Accélération

Trajectoire

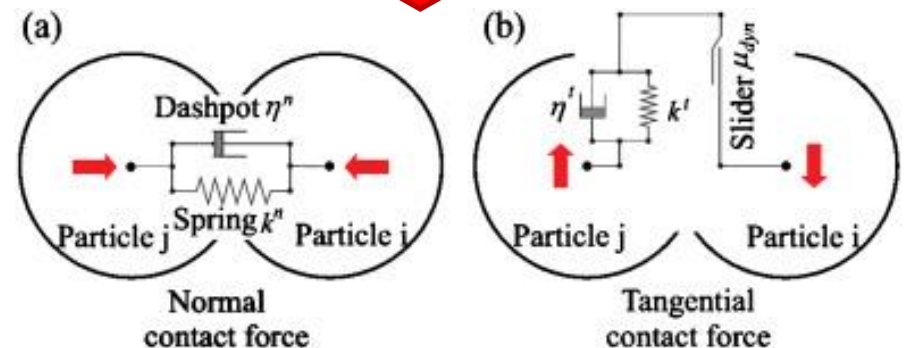
Force de gravité

Interactions avec un fluide

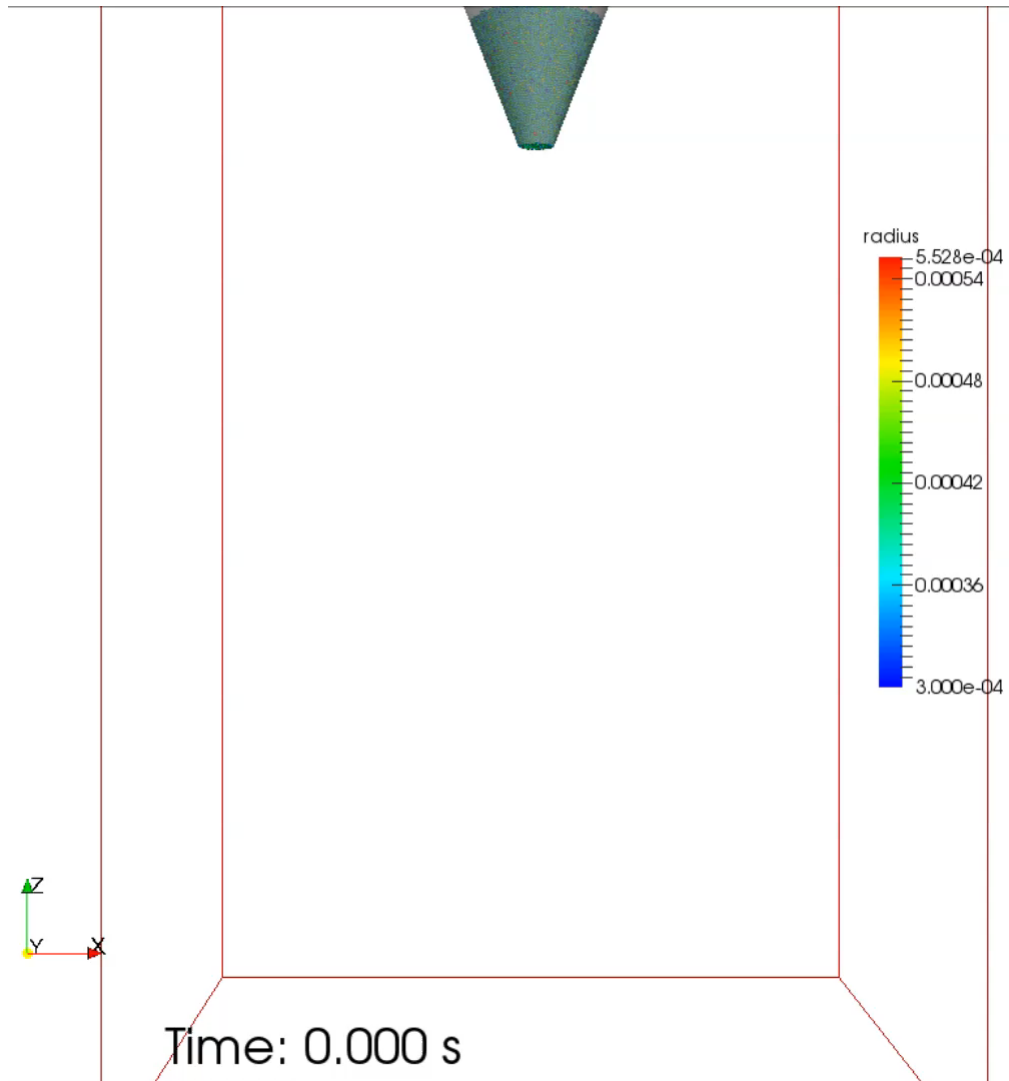
Forces de contact

Pourquoi:

- gain de temps
- gain d'argent
- meilleur contrôle des variables du problème
- sécuritaire (!)



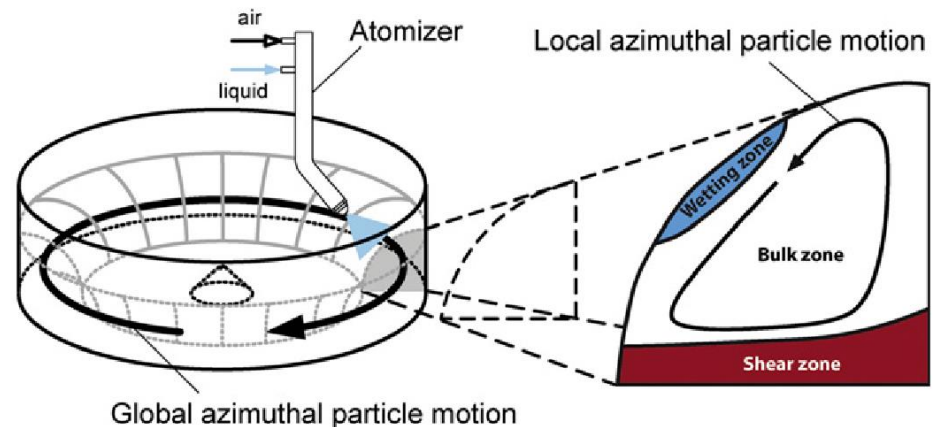
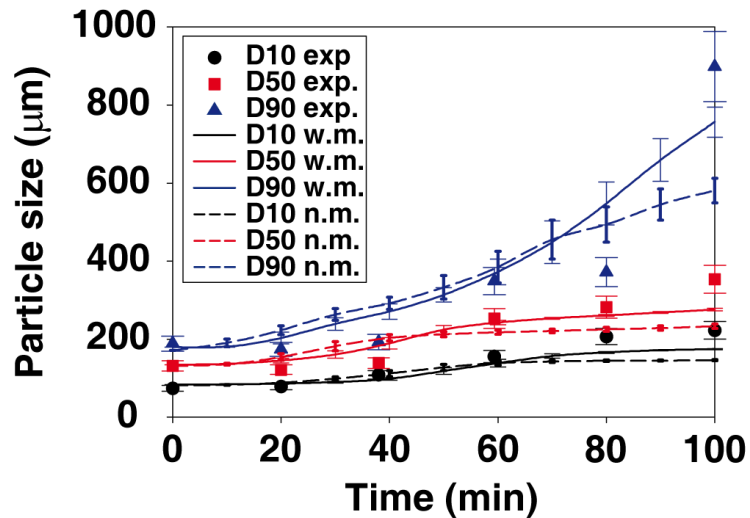
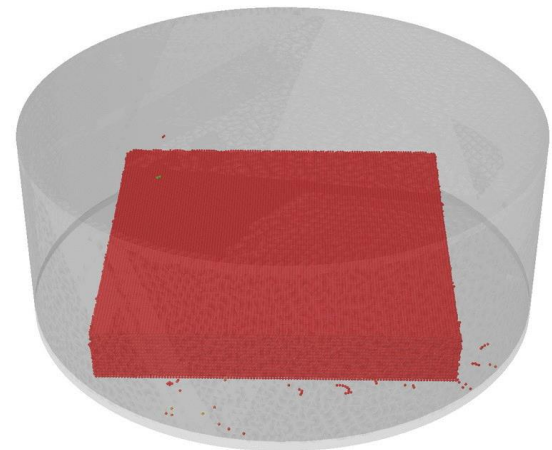
CALIBRAGE DES MODÈLES DEM



EXEMPLE DE VALIDATION ENTRE EXPERIENCES ET SIMULATIONS



Étude de la dynamique des particules dans un sphéroniseur

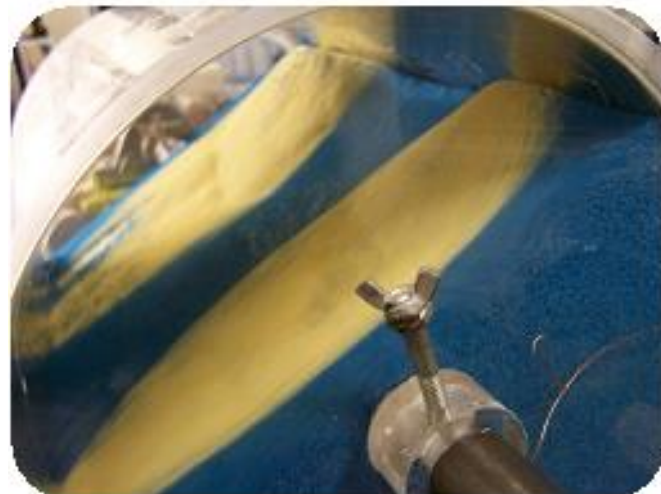


Exemple d'application: mélange granulaire

Fabrication de pilules

- De petits changements dans les ingrédients ou les conditions d'opération peuvent entraîner des conséquences importantes sur la qualité du médicament
- Besoin de comprendre les phénomènes physiques qui gouvernent l'écoulement et le mélange de particules solides

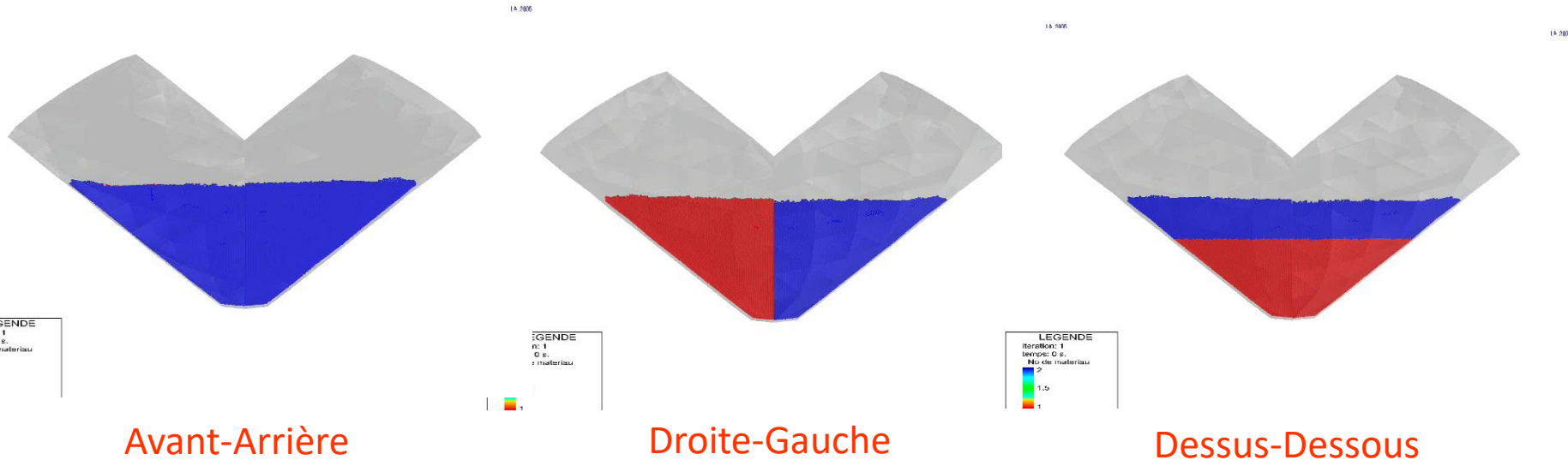
L'écoulement de poudres est complexe !



SIMULATION DU MÉLANGE GRANULAIRE DANS UN MÉLANGEUR EN V (PHARMACEUTIQUE)



Importance du mode de remplissage des deux poudres



225 000 particules sphériques de 3 mm

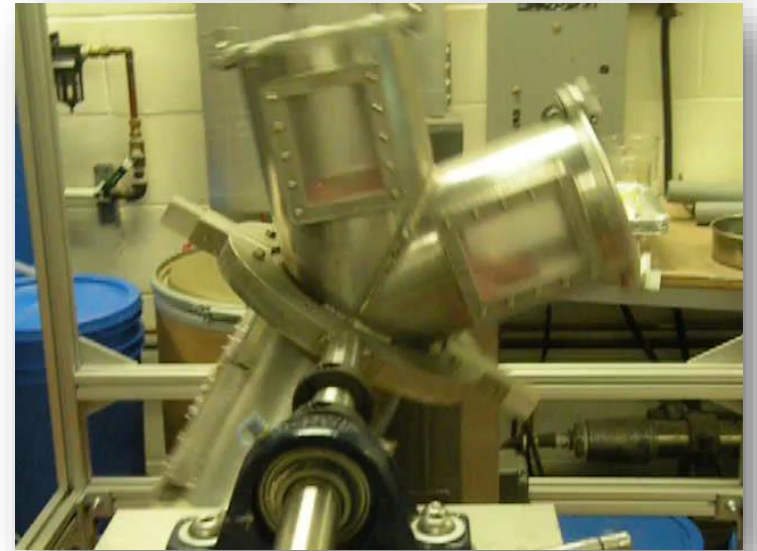
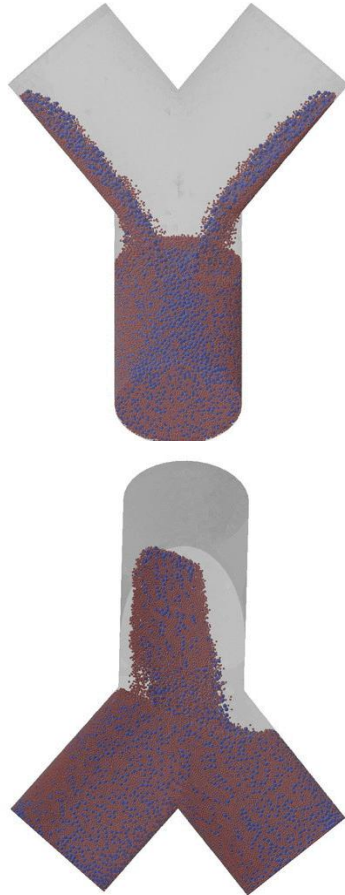
Vitesse de rotation: 30 RPM

Temps simulé: 120 s



(Alizadeh et al., 2014)

AMÉLIORATION PROPOSÉE AU MÉLANGEUR EN V GRÂCE À LA SIMULATION DEM



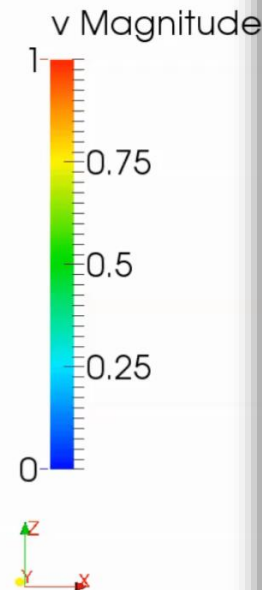
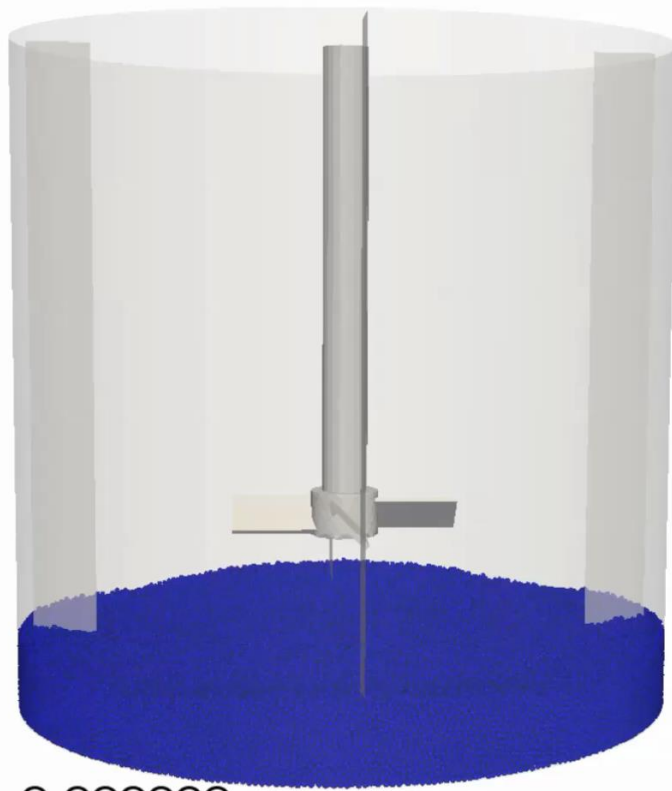
**Mélangeur tétrapodal
(breveté)**

TEVA

(Alizadeh et al., 2014)

Autre exemple: mélange solide-liquide turbulent

- Simulation volumes finis avec LES (Large Eddy Simulations) combinée avec la méthode des éléments discrets (DEM)



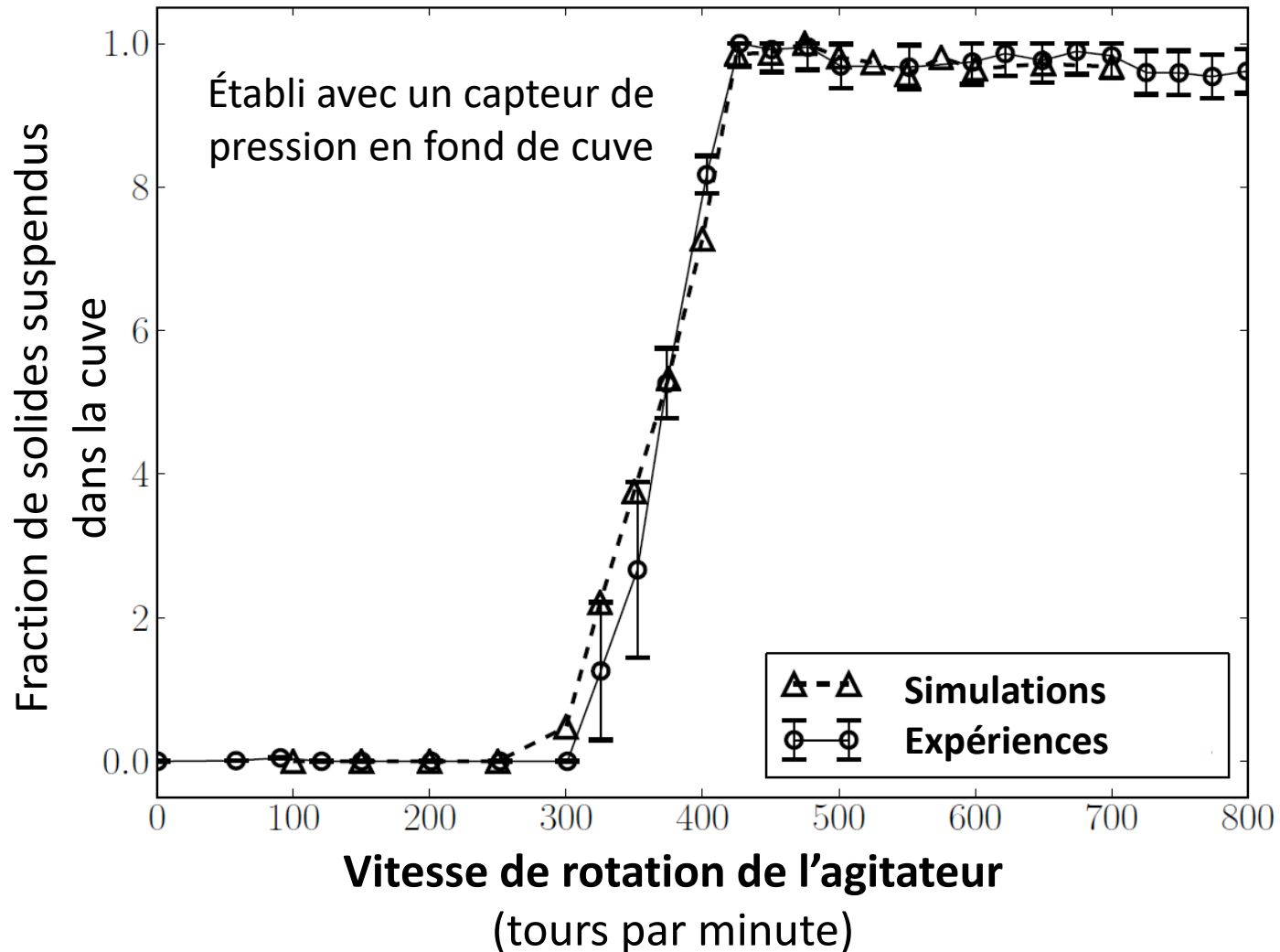
Re=2700
(400 RPM)

(Blais et al., 2015)

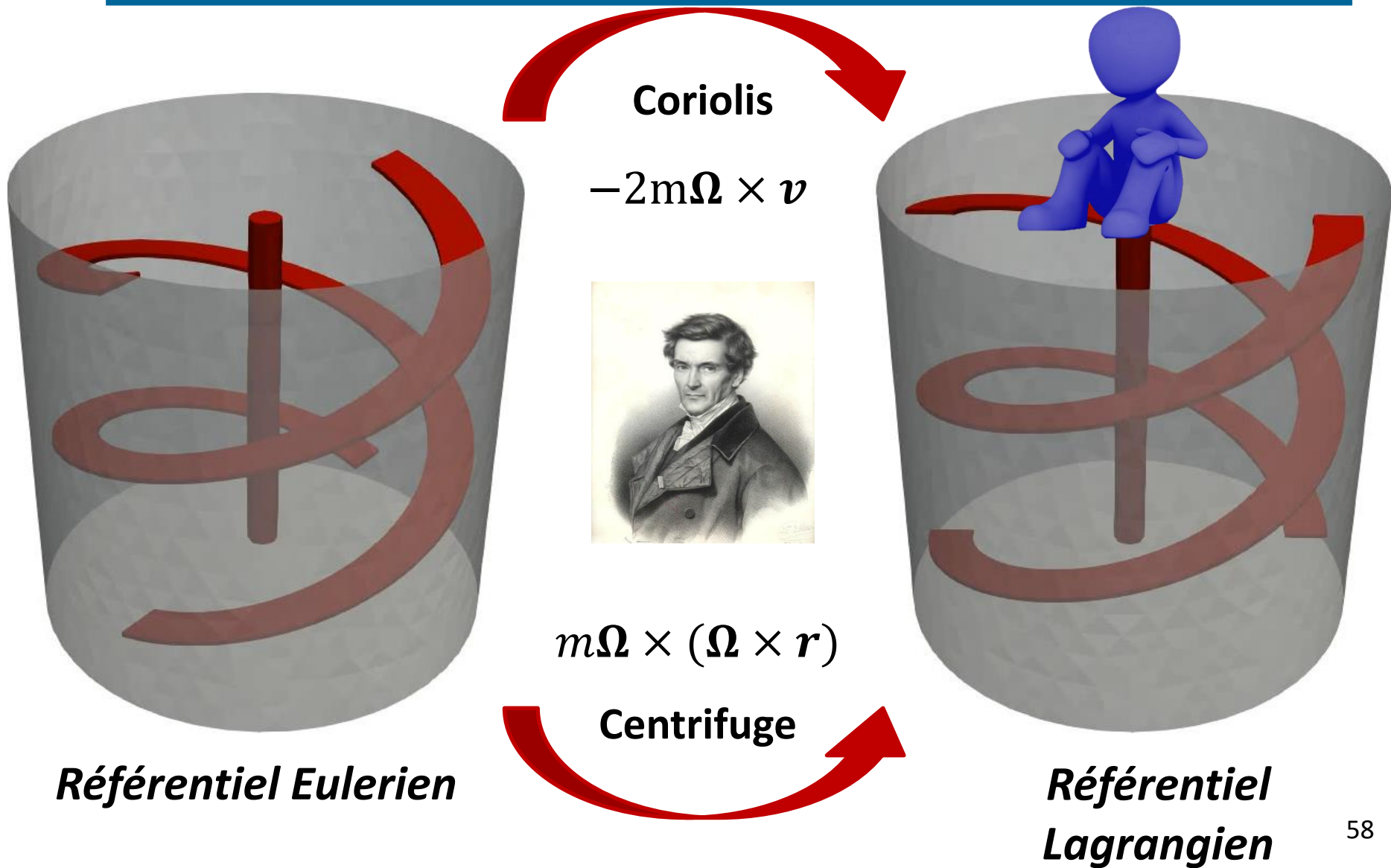


Validation du modèle CFD

(Blais et al., 2015)

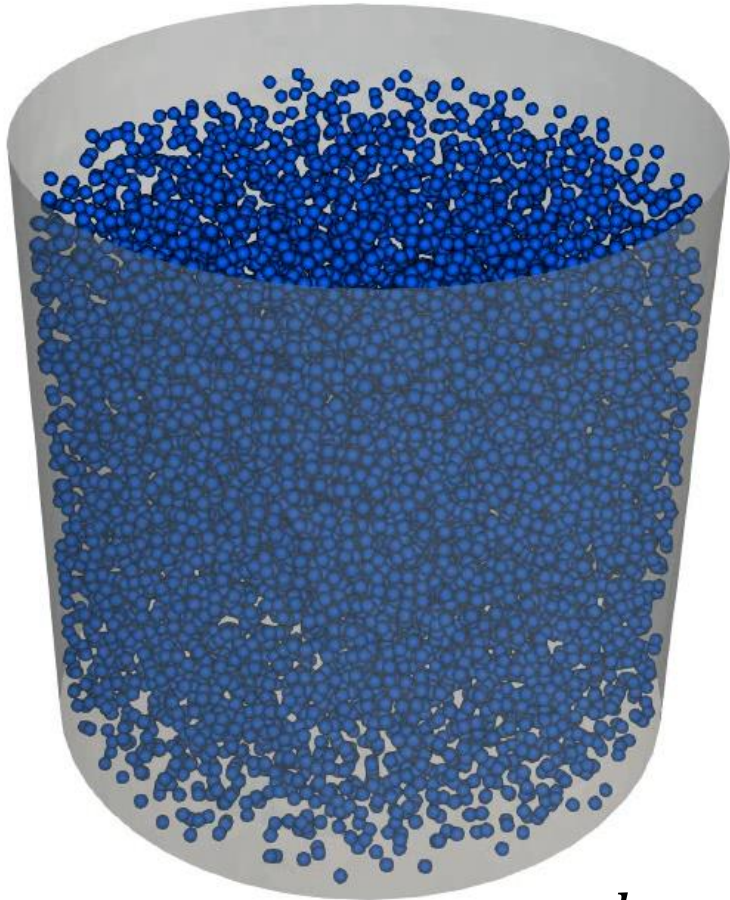


Changer notre point de vue

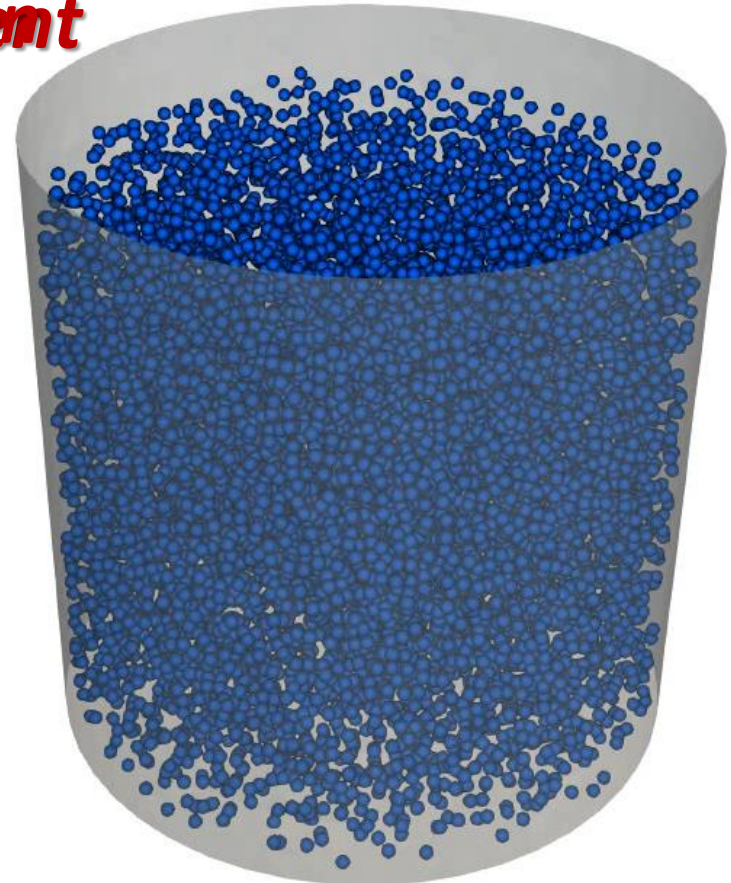


Verification avec 160 000 particules

Référentiel Eulérien



Référentiel Lagrangien

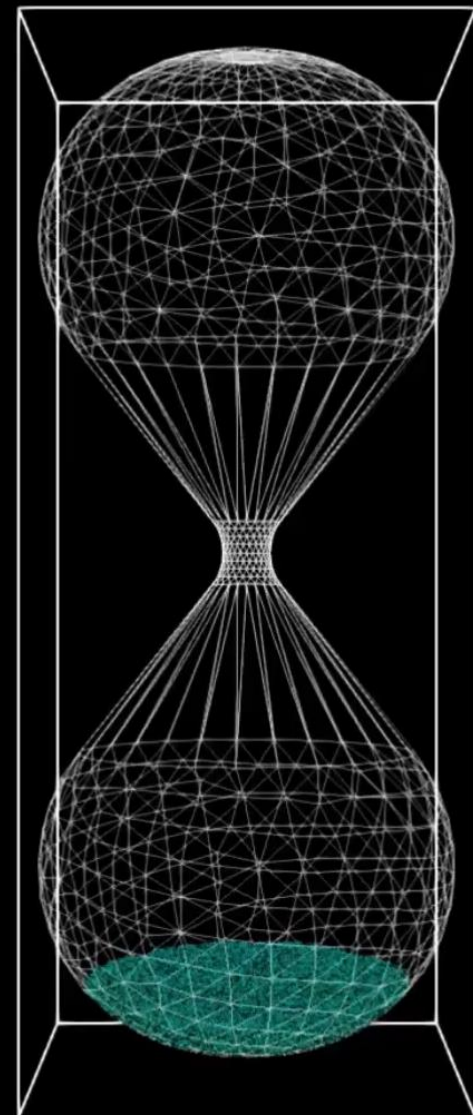
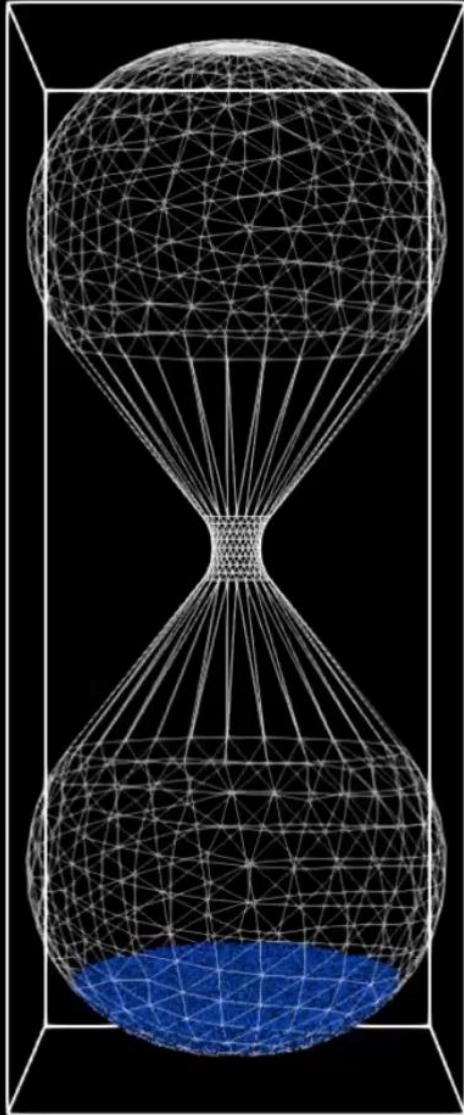


~~Stabilisation~~
 Initialisation
 et
 Rotation

80 RPM

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = \sum_j f_{c,ij} + m_i \mathbf{g} + \mathbf{f}_{inertial,i}$$

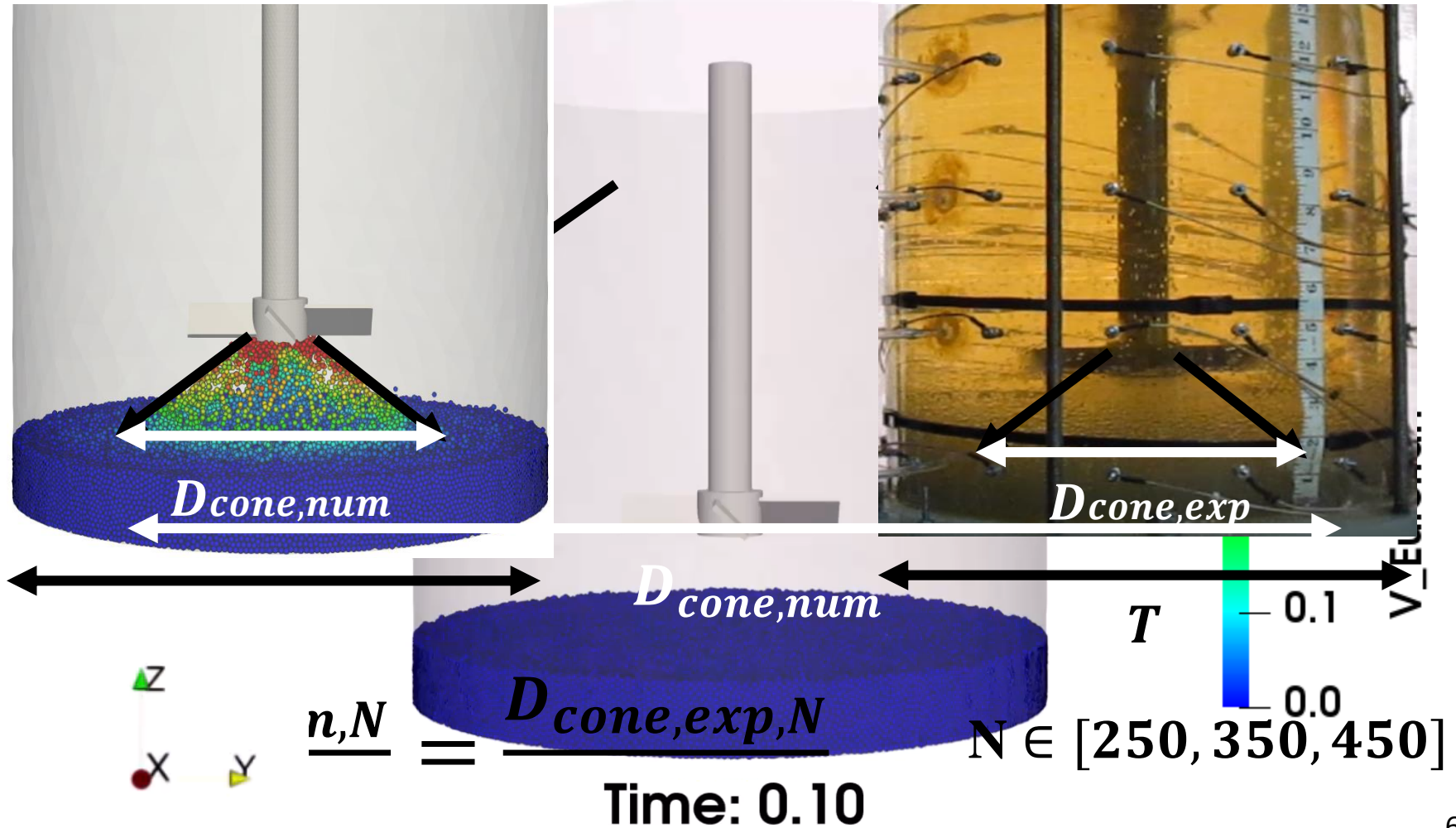
Vérification avec 160 000 particules



Validation 250RPM

CFD-DEM

Expérimentale*

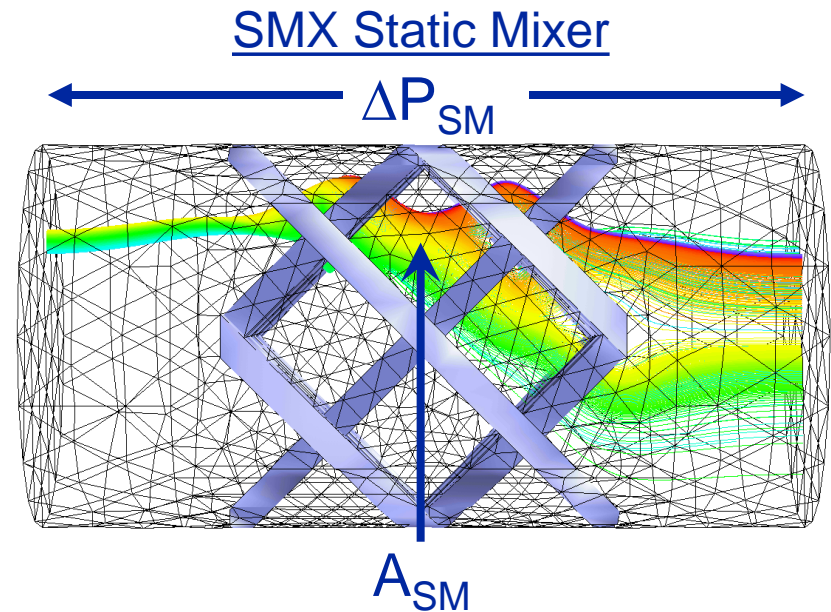
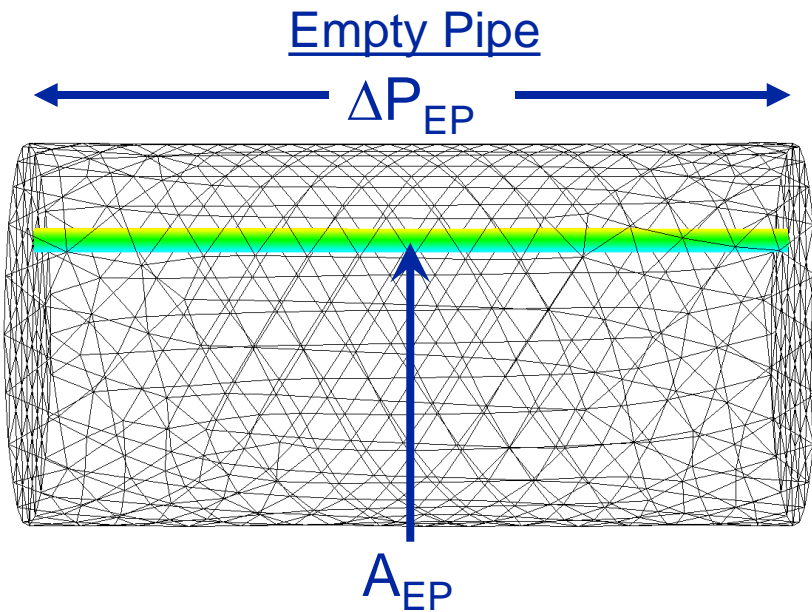
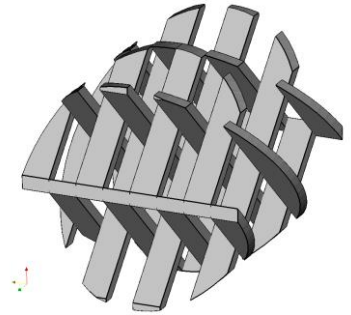


Autre exemple d'application

- Modélisation numérique de l'écoulement de fluide dans un mélangeur statique en vue d'optimiser la forme

- Critères:

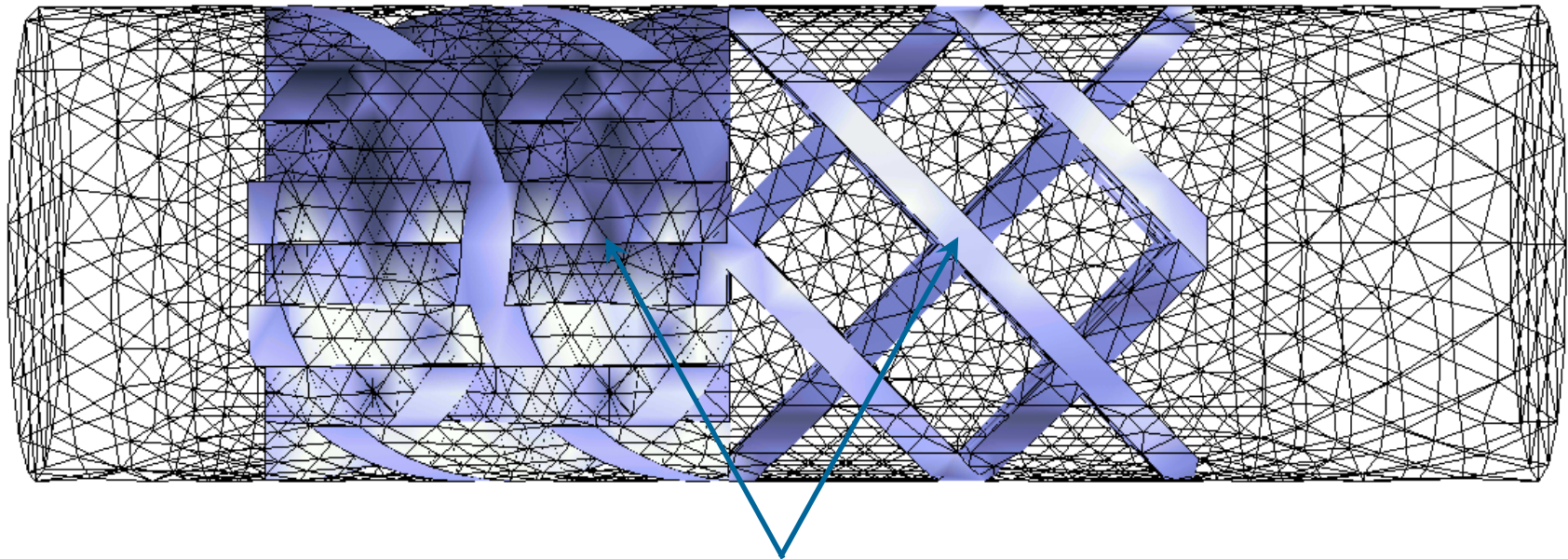
- faible perte de charge (ΔP)
- bonne qualité du mélange (e.g. création d'interface)



$$\frac{A_{SM}}{A_{EP}}$$

Modélisation numérique de l'écoulement de fluide dans un mélangeur statique

Exemple de maillage de MEF

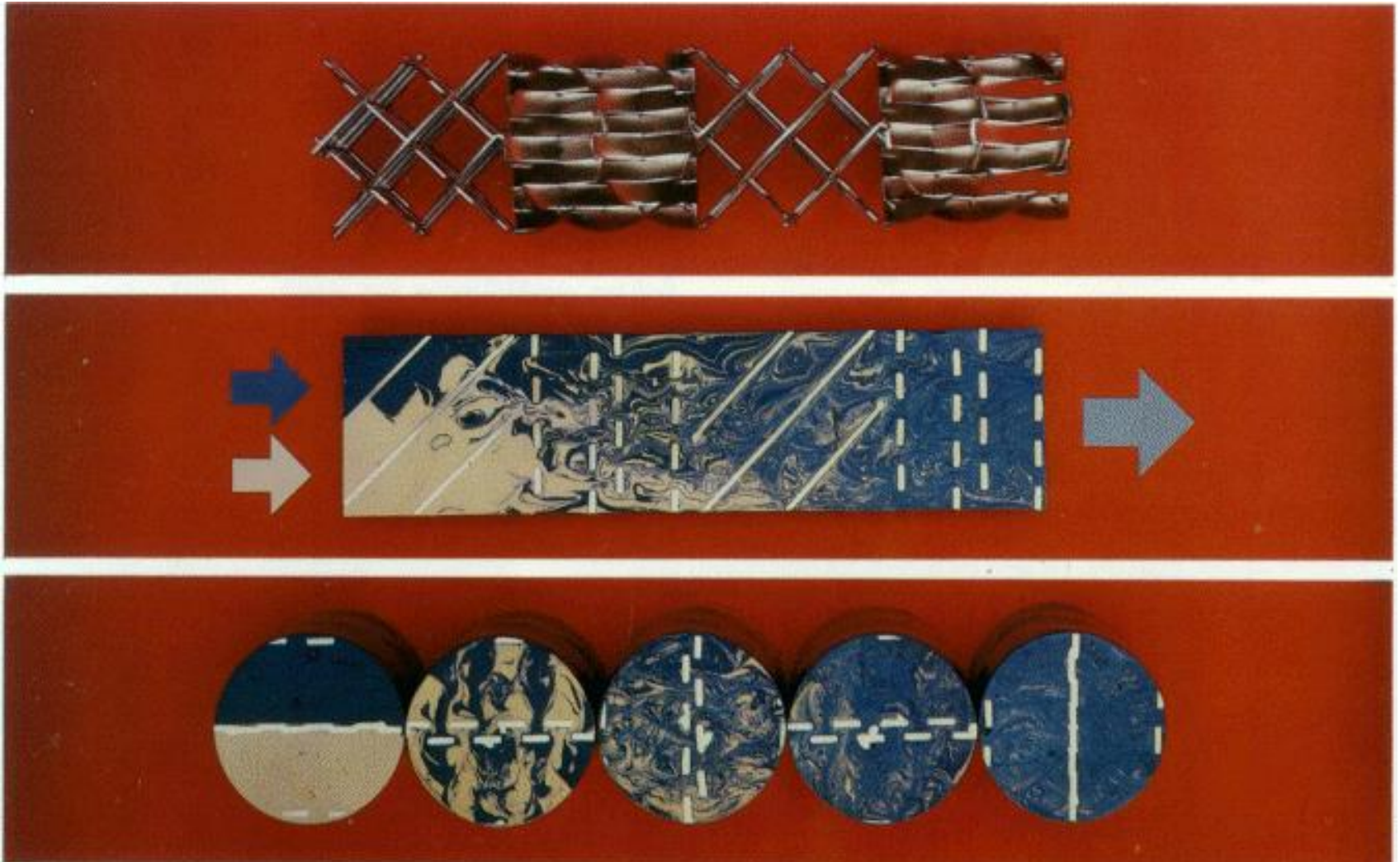


2 SMX à 90°

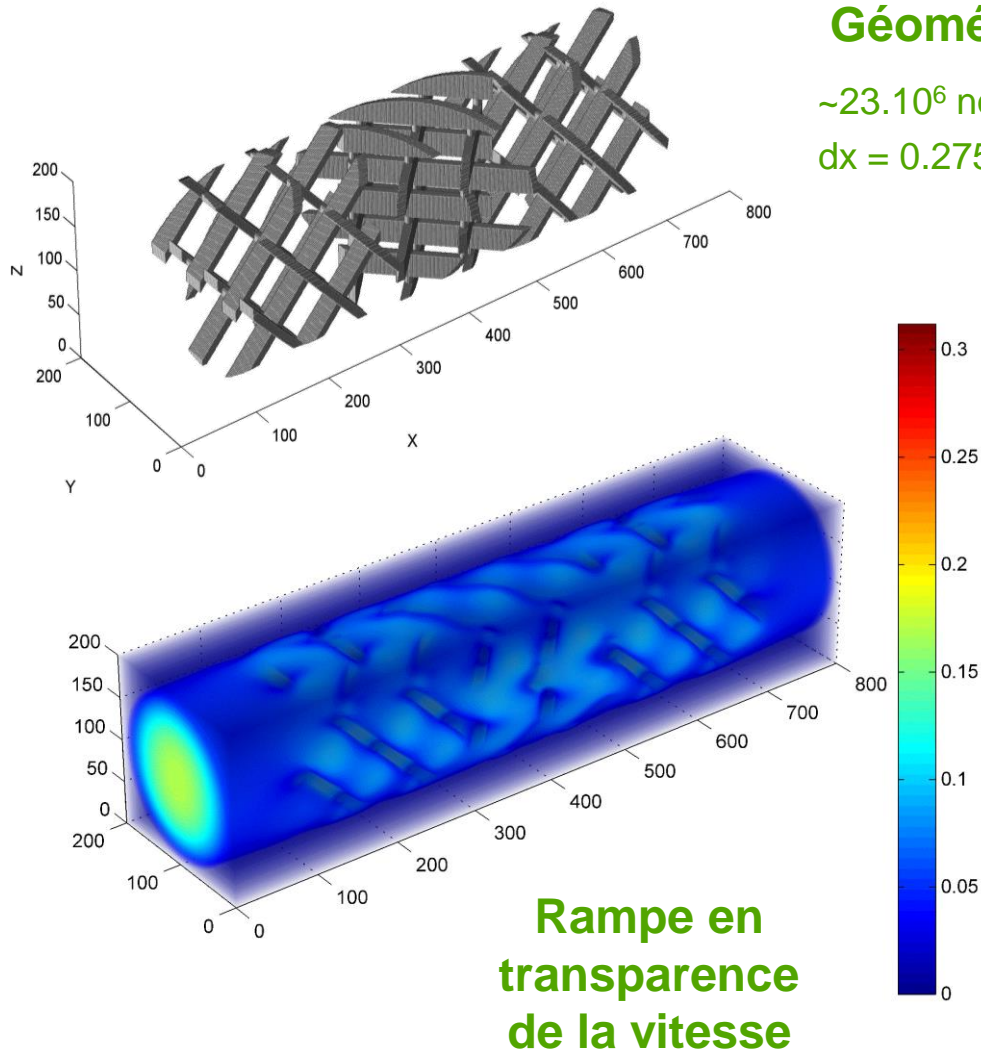
(33041 éléments)

Modélisation numérique de l'écoulement de fluide dans un mélangeur statique

Exemple de mélange par 4 SMX en série



Modélisation numérique de l'écoulement de fluide dans un mélangeur statique



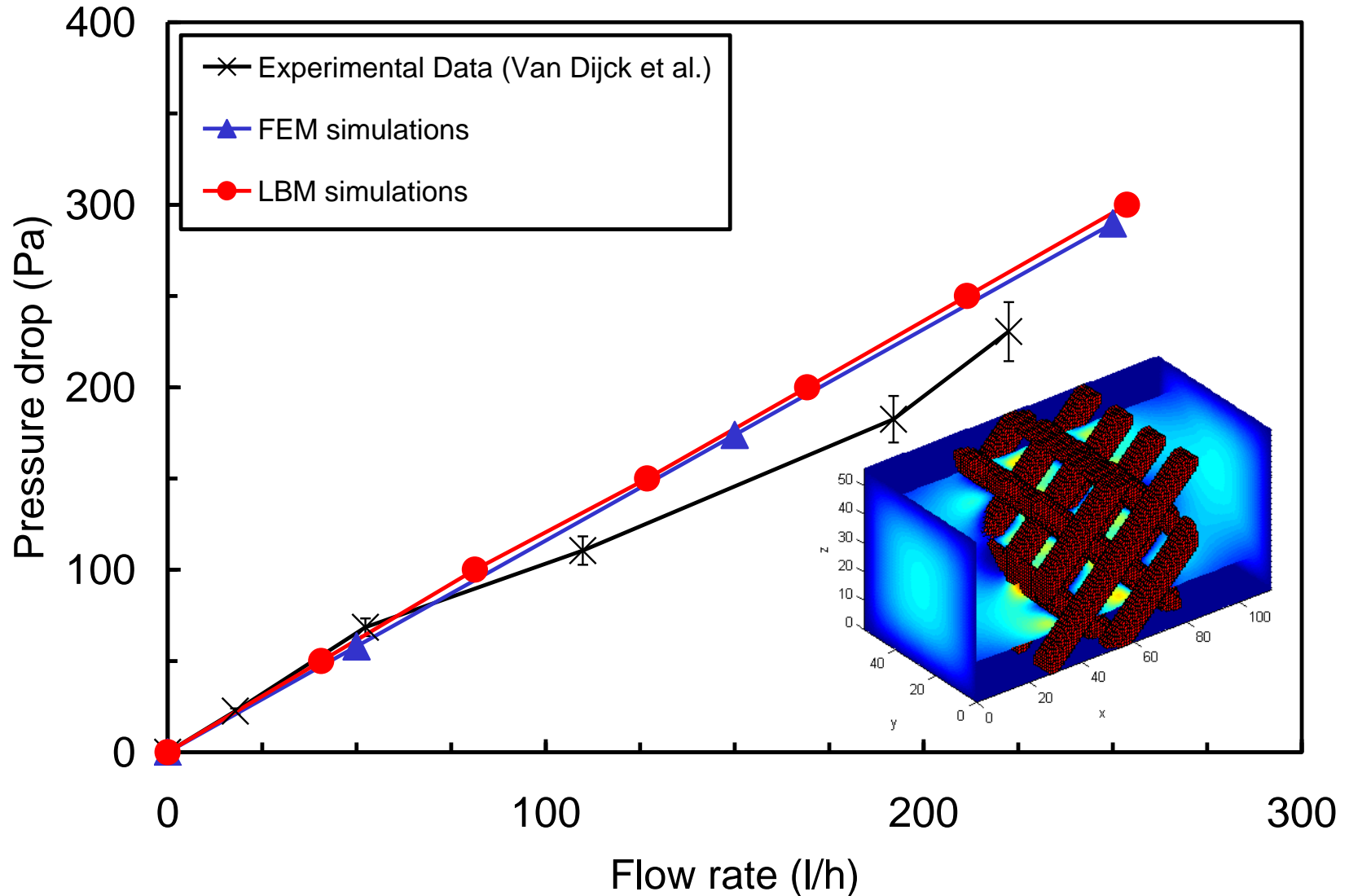
CPU: 130× processeurs
(Intel 5440 Xeon à 2.83 GHz)

RAM: ~ 5 GB

Temps de calcul: ~10 min

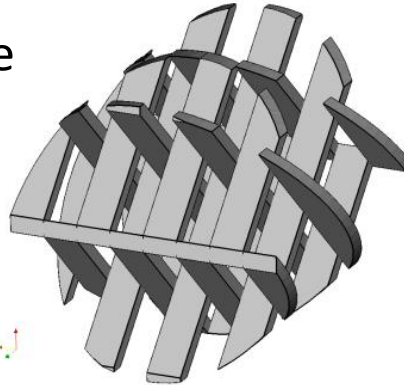
Modélisation numérique de l'écoulement de fluide dans un mélangeur statique

Validation des codes MEF et LBM

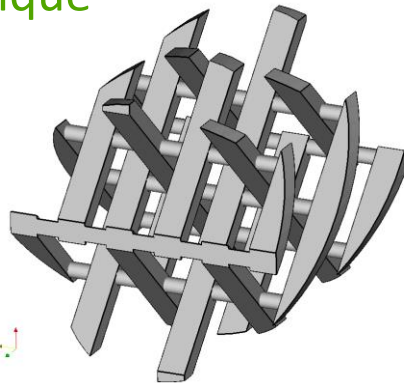


Modélisation numérique de l'écoulement de fluide dans un mélangeur statique

Optimisation de forme

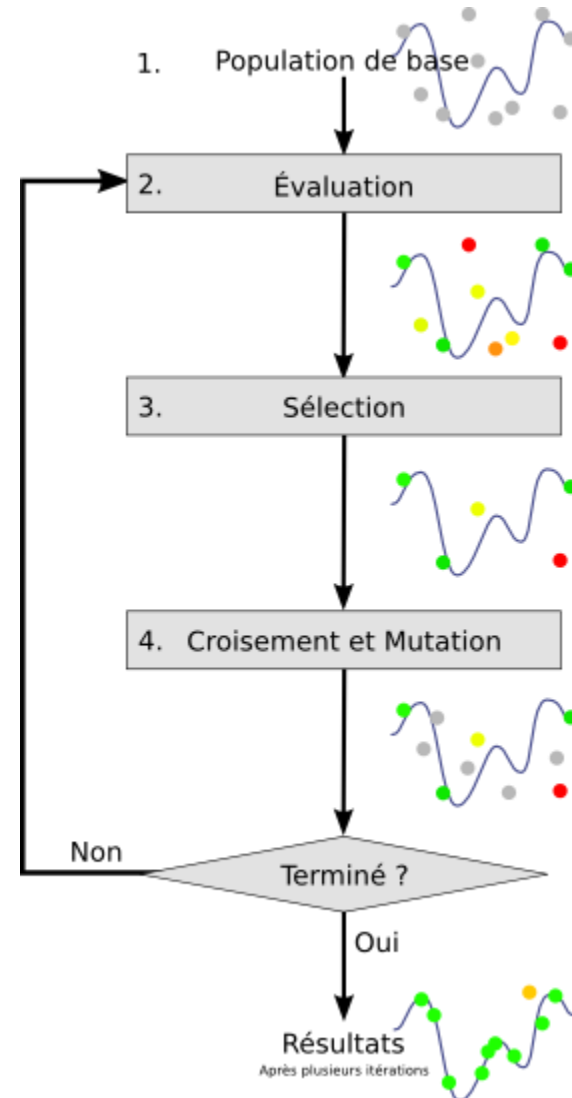


CFD
+
Algorithme génétique

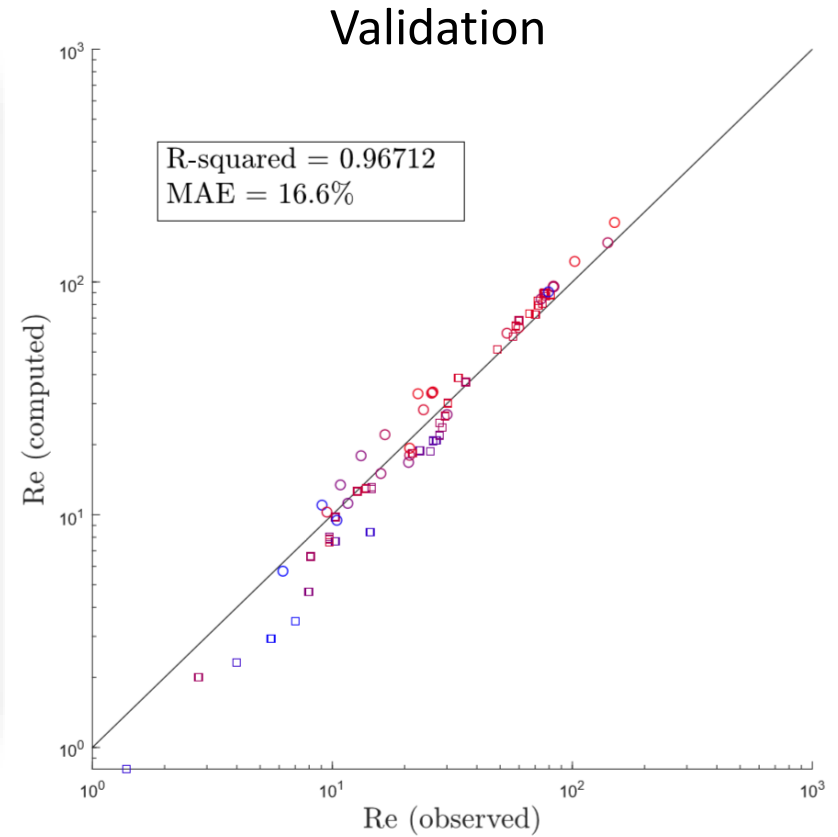
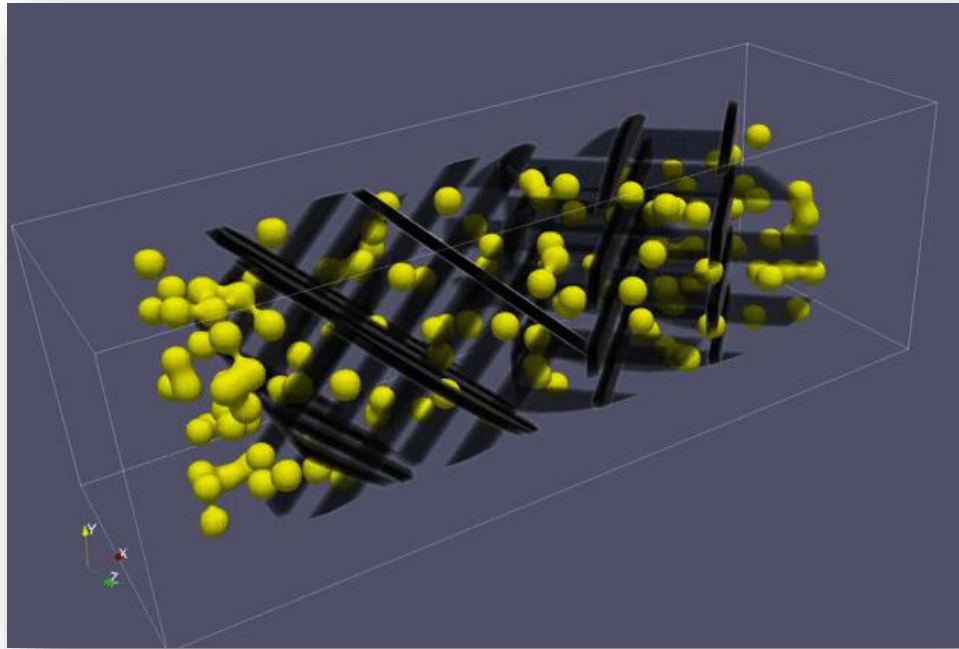


- $\Delta P \approx -30\%$
- Qualité de mélange similaire

SULZER

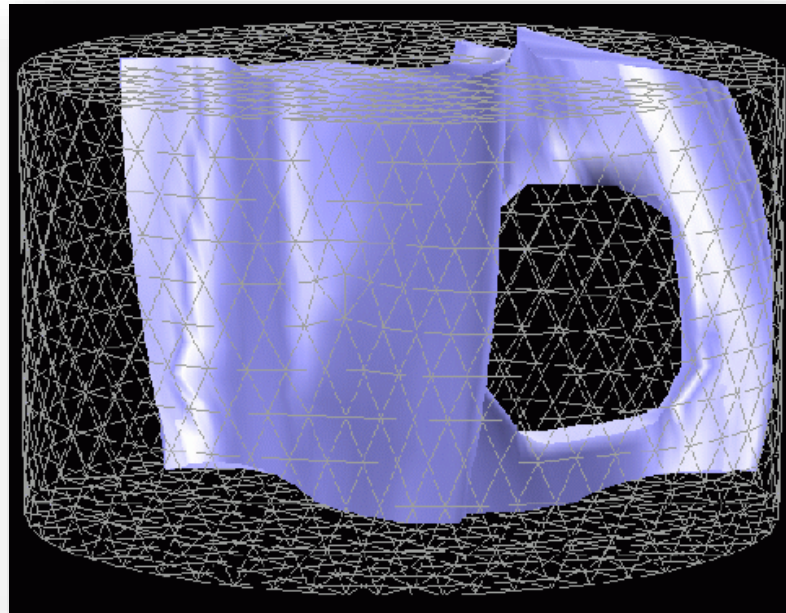


Exemple de simulation d'écoulements bi-phasiques dans un mélangeur statique



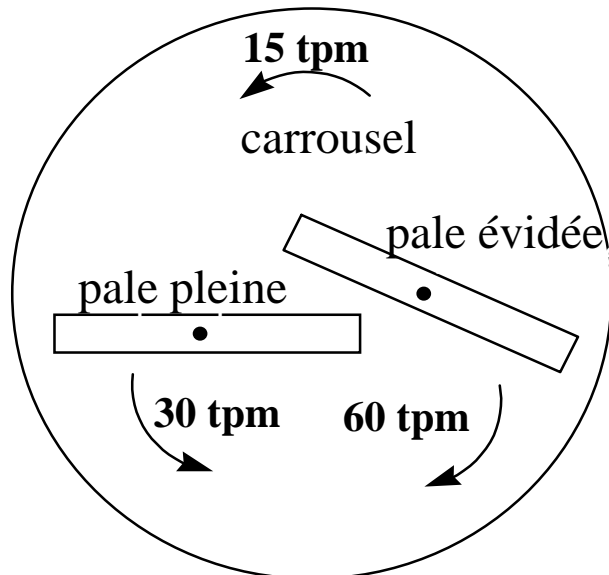
Exemple d'application de la méthode des éléments finis

- Modélisation numérique de l'écoulement de fluide dans un mélangeur bipale à mouvement planétaire
 - Géométrie à parties mobiles
 - Problème 3D
 - Écoulement transitoire non-isotherme
 - Fluide visqueux



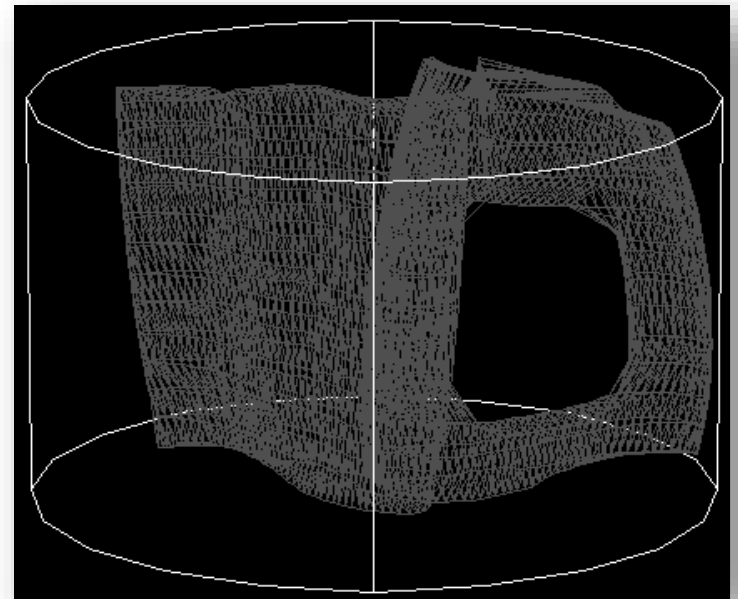
Simulation de l'écoulement dans un malaxeur à mouvement planétaire

- Fabrication de matériaux énergétiques composites (propergol)
- Mélange de charges dans des liants polymériques visqueux (PBHT)
 - Limite de la coulabilité
 - Ingrédients en quantités infimes qui doivent être parfaitement mélangés
 - Élévation de la température



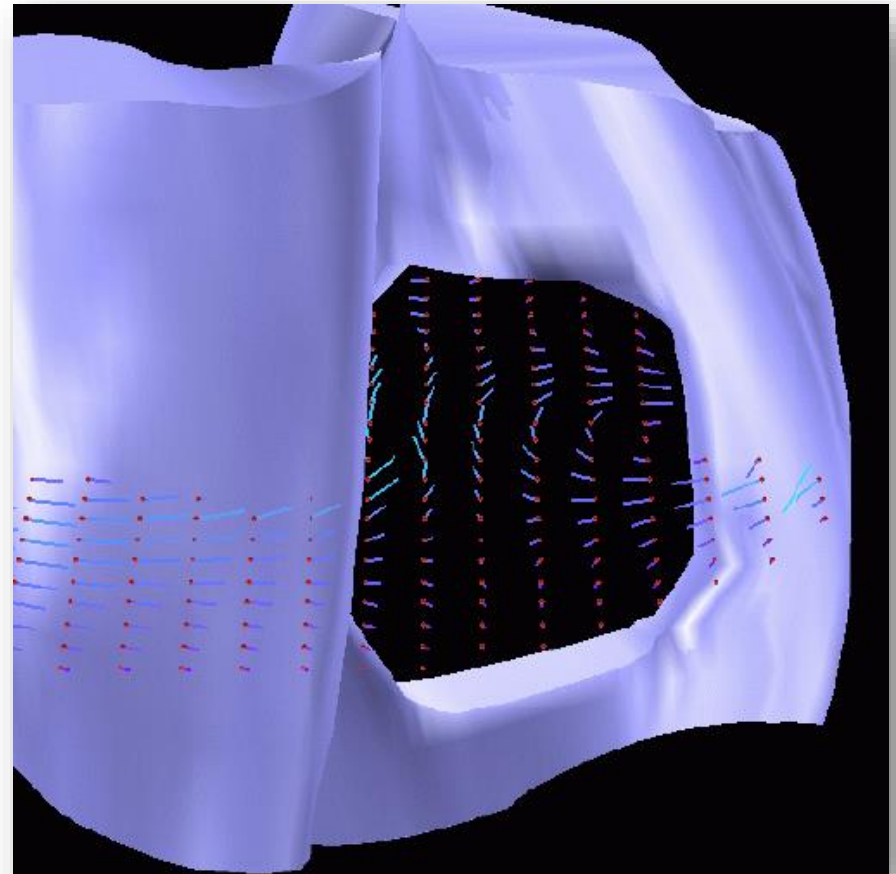
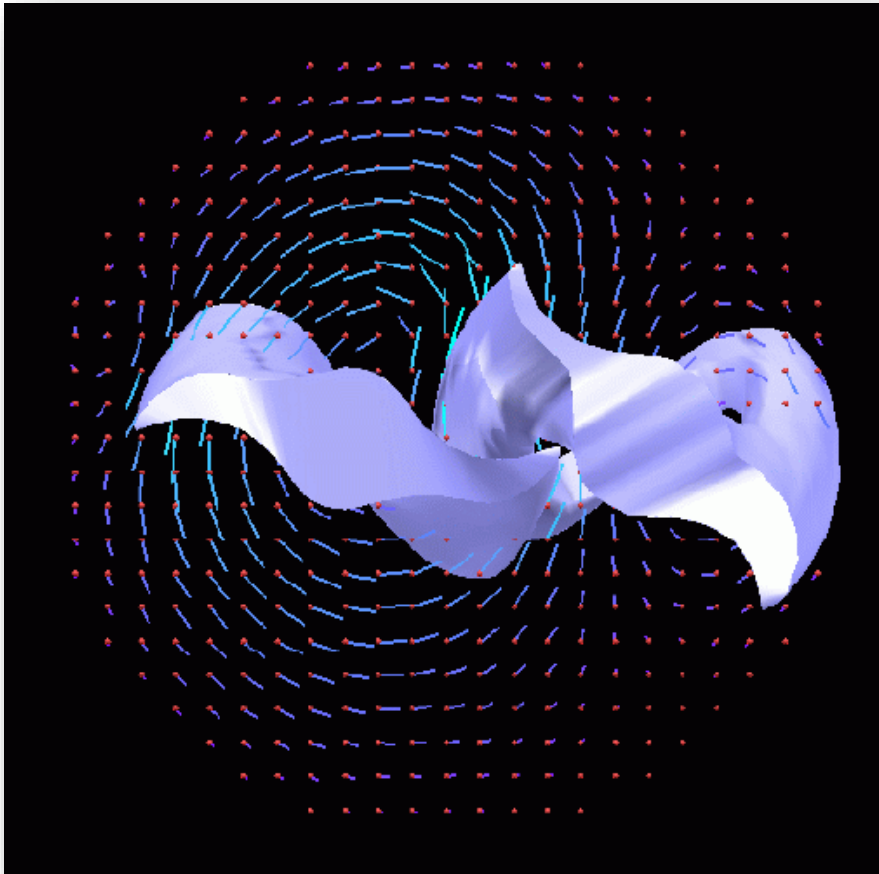
Simulation de l'écoulement dans un malaxeur à mouvement planétaire

- Rhéologie: fluide obéissant à une loi de puissance
- Résolution des équations d'échange à l'aide de la MEF
- Représentation des pales à l'aide de la méthode des domaines fictifs
 - 17 552 éléments finis P_1+P_0 pour la cuve
 - 2574 points de contrôle pour les 2 pales
 - 20 pas de temps par tour de carrousel
- Validation: traçage fluorimétrique



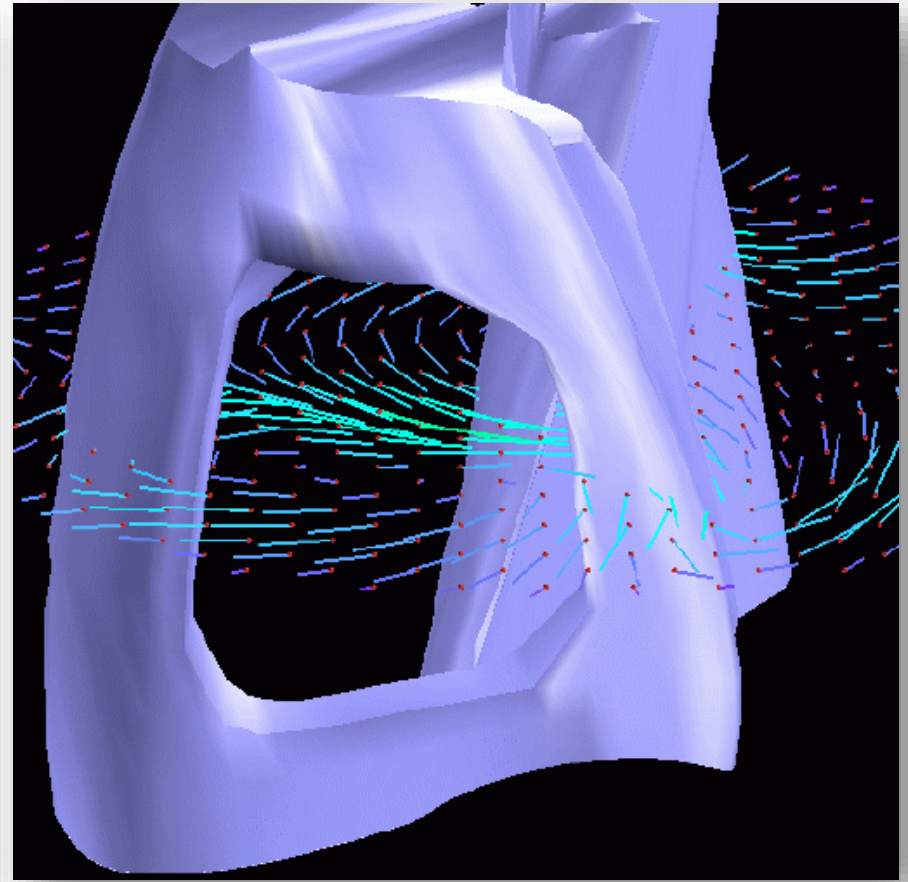
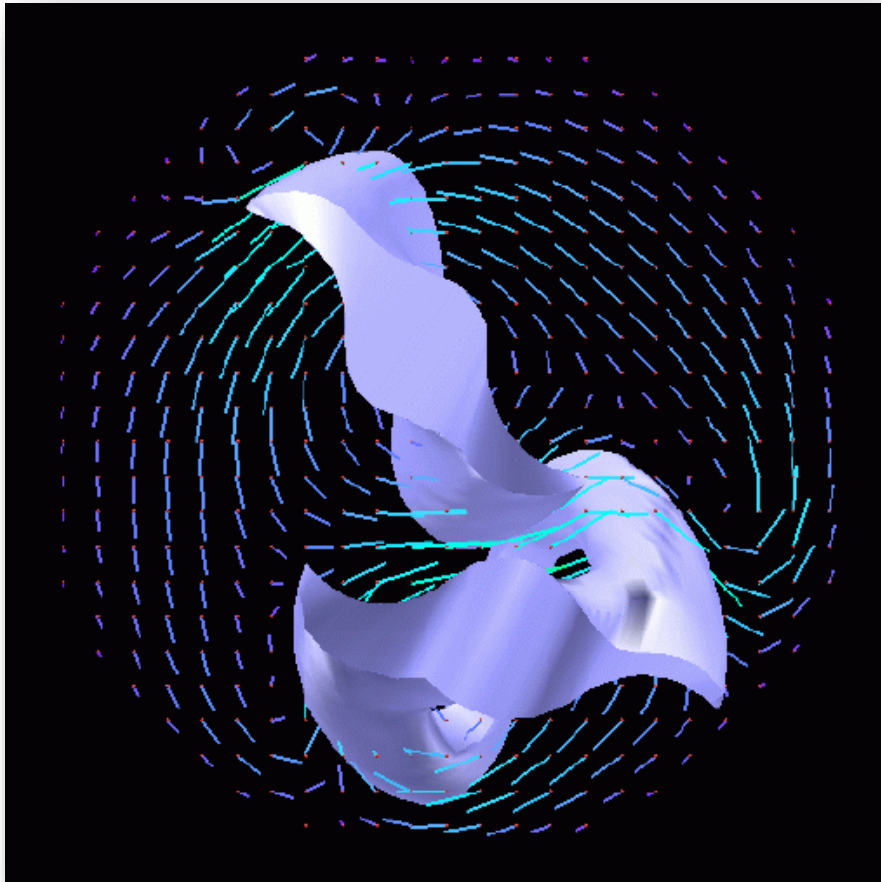
Simulation de l'écoulement dans un malaxeur à mouvement planétaire

Champ de vitesse (position 0°)



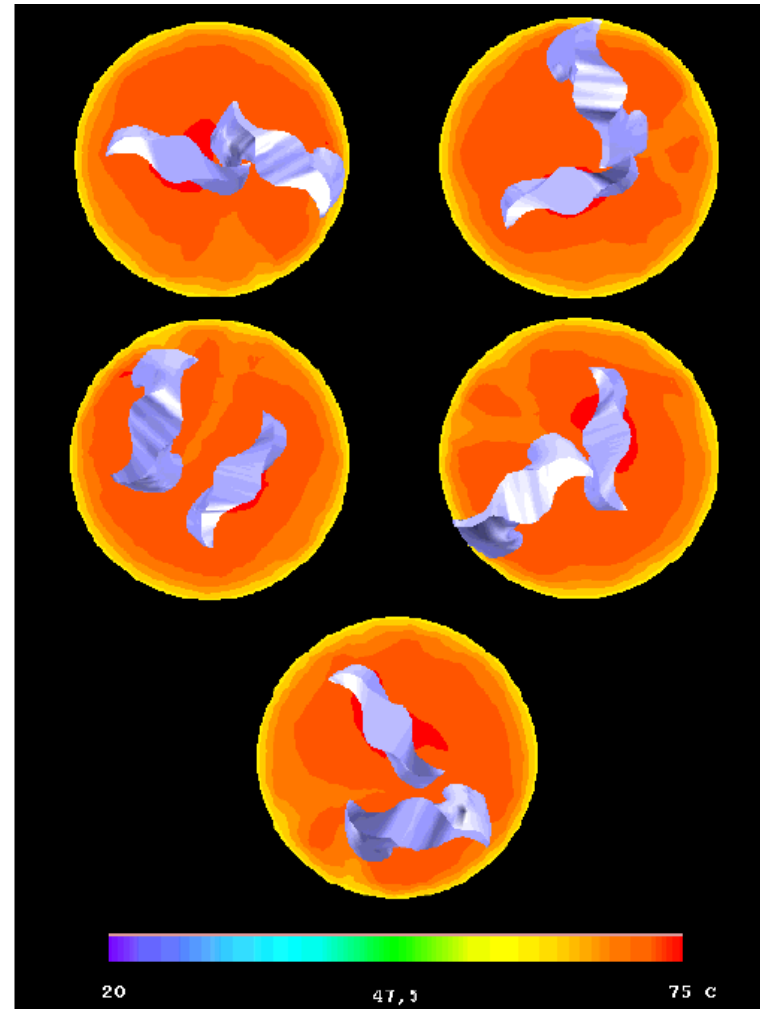
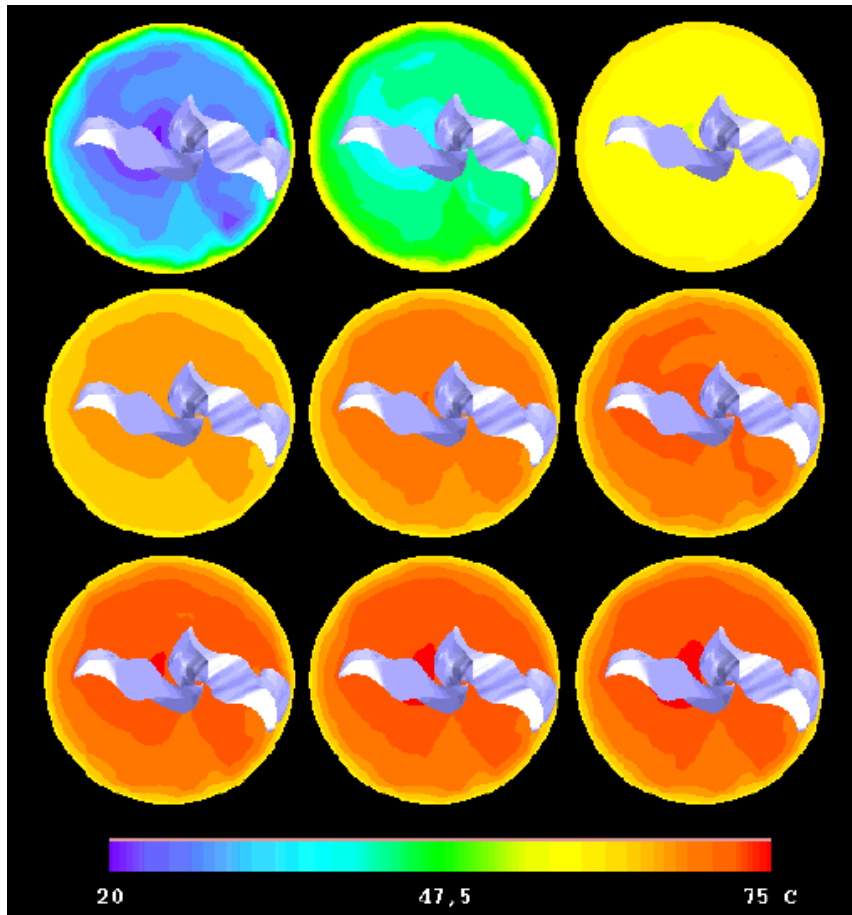
Simulation de l'écoulement dans un malaxeur à mouvement planétaire

Champ de vitesse (position 288°)



Simulation de l'écoulement dans un malaxeur à mouvement planétaire

Champ de température



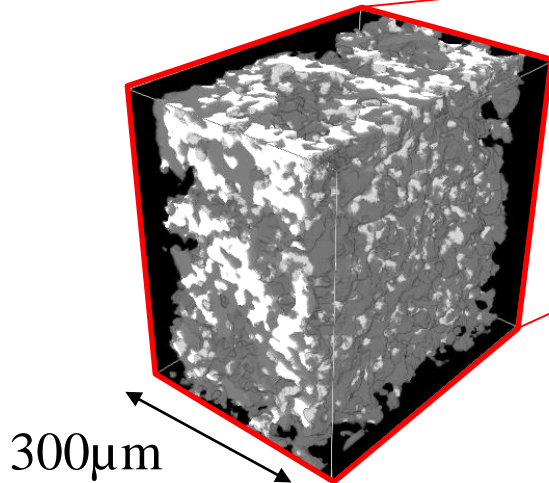
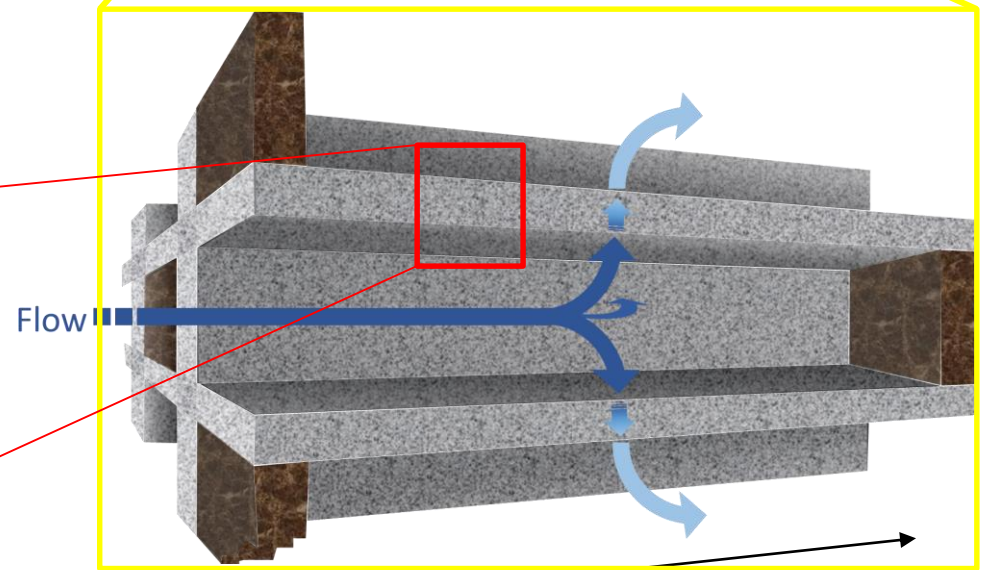
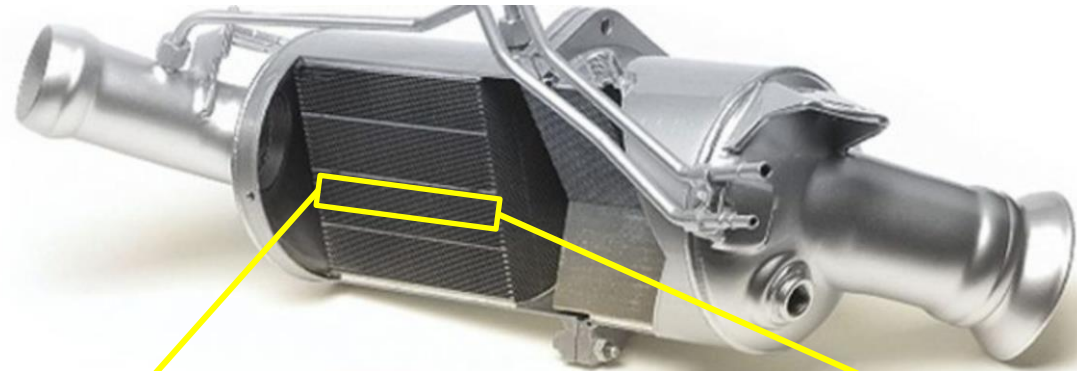
Catalyst-coated Particulate Filters (CPF)

How much gain in CPF overall performance can be achieved by a uniform catalyst coating distribution profile?

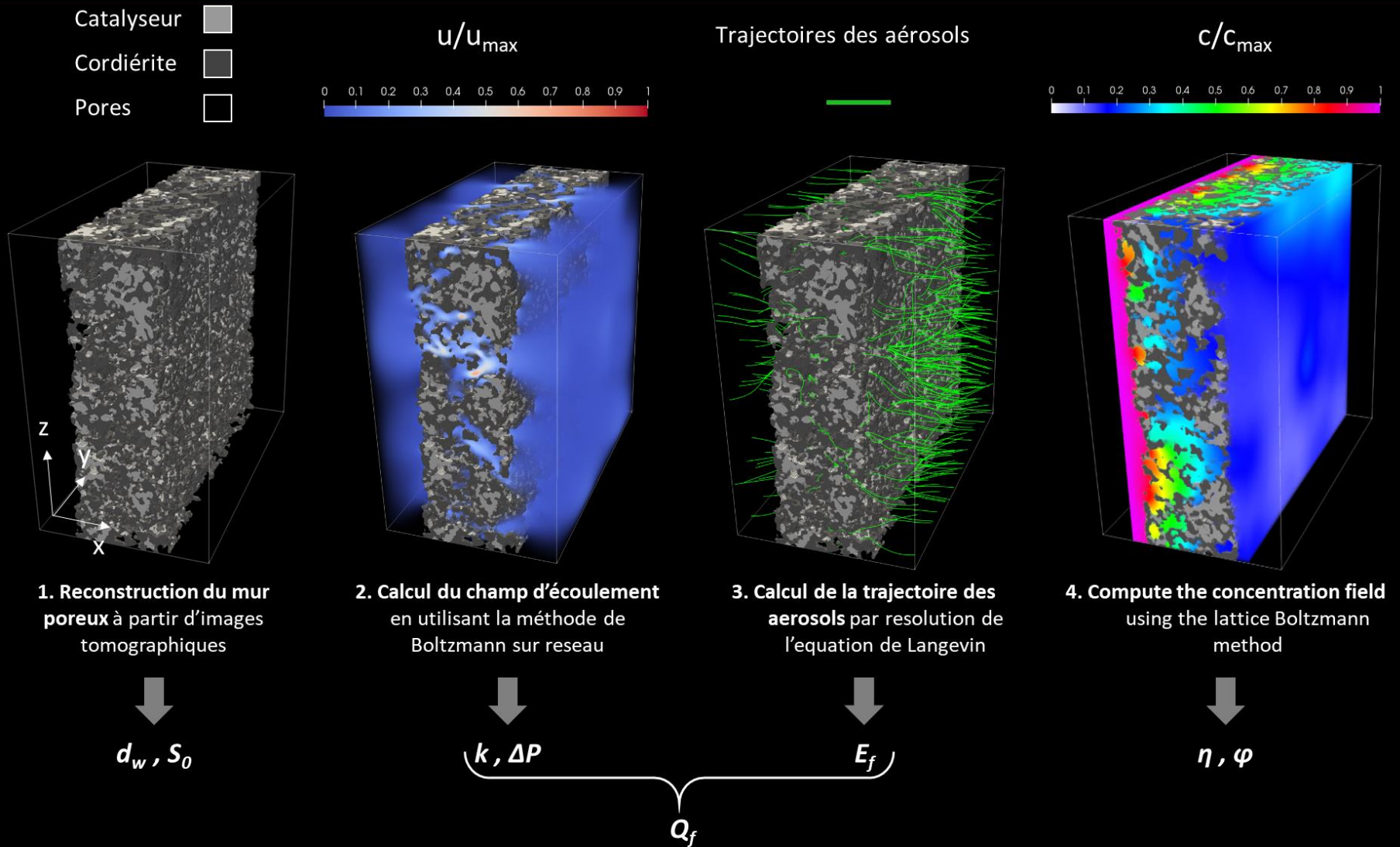
Catalyst

Substrate

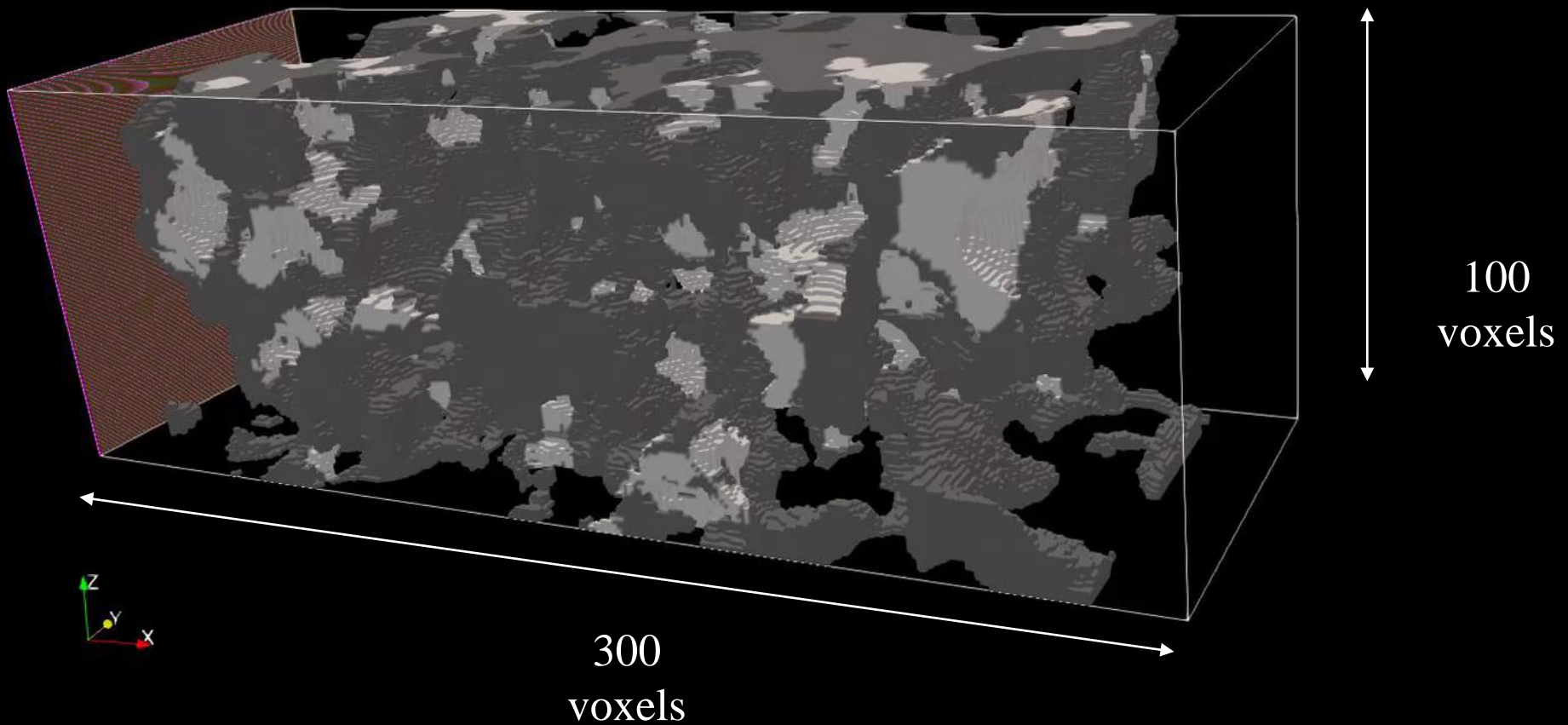
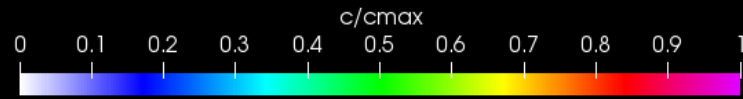
Pores



A Four-step Numerical Model



LBM: A Transient Solver



Catalyst

Substrate

Pores