

## GCH2535 – Modélisation numérique en génie chimique

Hiver 2019

### Devoir #3

**Date de remise : 10 avril 2019**

Régressions linéaires et non-linéaires pondérées et problème de mécanique des fluides  
sur COMSOL

---

#### Consignes :

- Travaillez obligatoirement en équipe de quatre.
  - Remettez un rapport répondant aux questions de façon concise et illustrée des graphiques demandés ou que vous jugerez intéressants de présenter. Tracez des graphiques ***beaux, clairs et lisibles***.
  - Portez une attention particulière à la présentation de vos résultats. **Vous serez fortement pénalisés pour un rapport que le correcteur jugera peu soigné (jusqu'à 20% de la note totale).**
  - Vos codes doivent générer automatiquement (sans modifications *a posteriori*) des graphiques de bonne qualité et de taille lisible (vous devez donc coder les légendes, les axes, etc).
  - En plus de votre rapport, déposez sur Moodle vos codes et vos fichiers en indiquant dans le nom du fichier vos matricules.
  - N'oubliez pas en MATLAB d'initialiser tous les vecteurs ou matrices pour des raisons de performance.
  - Posez vos questions par l'intermédiaire du forum sur Moodle. Nous vous encourageons aussi à répondre à vos collègues sur le forum. À la discrétion du correcteur, les équipes qui auront particulièrement aidé les autres sur le forum pourront se voir attribuer un bonus de 10% sur la note totale.
  - Des annexes sur l'utilisation de COMSOL seront rajoutées au besoin.
  - Lisez la totalité de l'énoncé avant de commencer.
-

## 1. Régressions de données sur la perméabilité de filtres fibreux

Vous travaillez dans une usine de filtres HEPA conçus pour filtrer les aérosols de l'air entrant dans les salles d'opération des hôpitaux. La perméabilité à l'air est une des caractéristiques les plus déterminantes de la performance d'un filtre. Vos collègues cherchent à développer des nouvelles méthodes de fabrication des filtres afin d'augmenter la perméabilité de ces filtres pour un efficacité de capture donnée. On vous donne le mandat de trouver un modèle pour calculer la perméabilité de différentes configurations de fibres.

En étudiant la physique d'un modèle bidimensionnel simplifié d'un filtre, vous venez à la conclusion que le modèle doit avoir la forme suivante :

$$K^* = \frac{1}{4\phi} \cdot (a \cdot \ln \phi + b + c \cdot \phi + d \cdot \phi^2) \quad (1)$$

Où  $K^*$  est la perméabilité adimensionnée du filtre et  $\phi$  est la porosité du filtre.

Après avoir fait une revue de la littérature, vous trouvez des résultats pour des filtres de différentes porosités [1]. (Ces données vous sont présentées dans le gabarit MATLAB.)

- a) Obtenez les paramètres de la régression au moyen d'une régression non-linéaire pondérée au sens des moindres carrés des données fournies et résolvez au moyen de la méthode de Gauss-Newton :
  - i. Manipulez l'équation (1) pour simplifier la régression non-linéaire;
  - ii. Précisez le système matriciel à résoudre;
  - iii. Trouvez une stratégie d'estimation initiale.
  - iv. Précisez l'algorithme de résolution et fournissez suffisamment de détails (estimés initiaux, dérivées, etc...)
  - v. Fournissez le graphique illustrant la convergence de l'algorithme;
  - vi. Évaluez la qualité de la régression.
  
- b) Comparez les résultats obtenus avec la fonction MATLAB correspondante (NonLinearModel.fit ou fitnlm selon la version de MATLAB utilisée). Expliquez éventuellement les différences obtenues. Fournissez un code qui fait toutes les régressions demandées.

## 2. Détermination de la perméabilité d'un modèle simplifié d'un filtre à l'aide de COMSOL MULTIPHYSICS

Votre équipe de travail prévoit faire la modélisation numérique de l'écoulement au sein d'un filtre pour calculer la perméabilité de différentes géométries. Vous proposez de réduire le filtre à un faisceau de cylindres arrangé périodiquement :

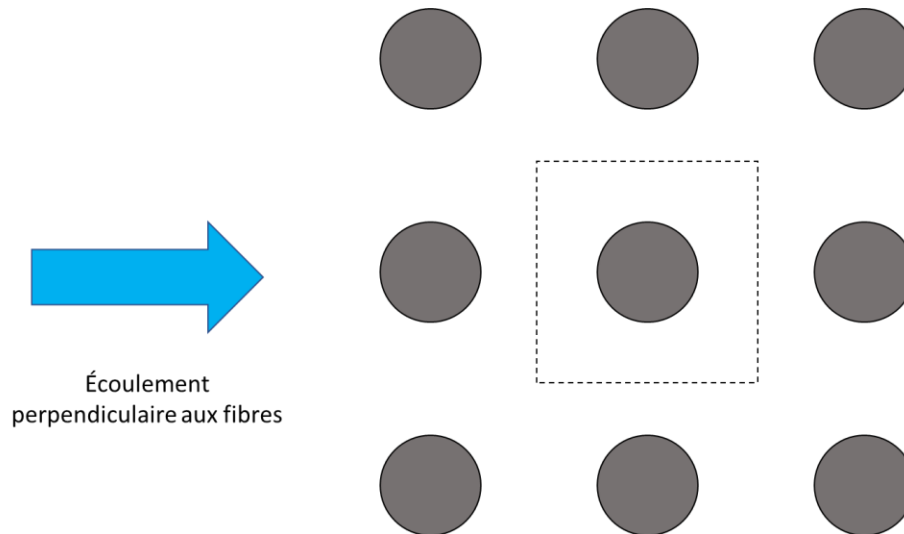


Figure 1 – Schéma d'un écoulement perpendiculaire à un arrangement bidimensionnel régulier et ordonné de cylindres. Le domaine à simuler est en pointillé.



Figure 2 – Schéma d'un écoulement parallèle à un arrangement bidimensionnel régulier et ordonné de cylindres. Le domaine à simuler est en pointillé.

En consultant un manuel sur les milieux poreux, vous trouvez que la loi de Darcy relie la vitesse superficielle à la perméabilité :

$$Q = \frac{AK\Delta P}{\mu h} \quad (2)$$

Où  $Q$  est le débit d'air en  $m^2/s$ ,  $A$  est la section du filtre en  $m$ ,  $K$  est la perméabilité en  $m^2$ ,  $\Delta P = P_{in} - P_{out}$  est la perte de charge en  $Pa$ ,  $\mu$  est la viscosité de l'air en  $Pa \cdot s$  et  $h$  est l'épaisseur du filtre en  $m$ . Deux possibilités s'offrent à vous : 1. vous fixez le débit à l'entrée ou à la sortie de votre filtre et vous mesurez la perte de charge, 2. vous fixez la perte de charge de votre filtre et vous mesurez le débit à l'entrée ou à la sortie de votre filtre.

On vous conseille de ne simuler que des écoulements en régime laminaire. Pour un écoulement autour d'un faisceau de cylindres, ceci veut dire que la condition suivante sur le nombre de Reynolds  $Re$  doit être respectée :

$$Re = \frac{\rho U_0 d_f}{\mu(1 - \phi)} < 1 \quad (3)$$

Où  $U_0 = Q/A$  est la vitesse superficielle du fluide en  $m/s$ ,  $d_f$  est le diamètre des fibres et  $\phi$  est la porosité du filtre.

- a) Utiliser COMSOL MULTIPHYSICS pour résoudre le profil de vitesse et trouvez la perméabilité des deux filtres simplifiés sur la gamme de porosité présentées dans l'exercice 1. Spécifiez la gamme de porosité que vous utilisez et utilisez un minimum de 5 porosités différentes. Énoncez les simplifications, les conditions limites employées, les valeurs des paramètres employés ainsi que les tailles de domaines que vous employez. Justifiez ces choix. Assurez-vous d'avoir un maillage suffisamment fin en comparant des résultats pour différentes tailles de maille.
- b) Sachant que la perméabilité adimensionnelle est reliée à la perméabilité réelle par la relation  $K^* = 4K/d_f^2$ , trouvez la perméabilité adimensionnelle pour vos filtres.
- c) Comparez vos résultats obtenus par COMSOL MULTIPHYSICS à votre corrélation obtenue à l'exercice 1. Que remarquez-vous ? Proposez une hypothèse sur les filtres utilisés dans l'expérience.

## Références

- [1] R. R. Sullivan, "Specific Surface Measurements on Compact Bundles of Parallel Fibers," *Journal of Applied Physics*, vol. 13, pp. 725-730, 1942.