MEC8211 – Hiver 2024
Devoir 3 – Validation – 8,33%
Vérification et Validation en Modélisation Numérique

Date de remise sur Moodle : 25/03 à midi

Directives :

- *À réaliser en équipe de 3 (même équipe que les devoirs précédents);*
- *Le script MATLAB LBM.m est à utiliser en boite noire. Vous n'avez pas besoin de le comprendre. Juste comprendre les paramètres passés en arguments.*
- *Les résultats aux diverses questions seront à rapporter au moyen d'une présentation de type PowerPoint (10 slides maximum). Faites des réponses courtes aux questions;*
- *Apporter une attention particulière à qualité de vos graphiques. Tracez vos analyses de convergence sur un graphique log-log tel que mentionné en classe;*
- *Remettre un fichier zip (Devoir3-Matricule1-Matricule2-Matricule3.zip) sur Moodle contenant la présentation PowerPoint des résultats et le code ou script que vous jugerez intéressant de joindre (facultatif). L'utilisation d'un script Bash sera considéré favorablement.*

Barème d'évaluation :

Item	État				
Programme	Non-fonctionnel	Fonctionnel	Fonctionnel	Fonctionnel	Fonctionnel
Résultats	Inexistant	La plupart des résultats manquants ou erronés	Environ la moitié des résultats corrects	Presque tous les résultats corrects	La totalité des résultats corrects
Note	0-30%	40-50%	60-70%	80-90%	100%

Enoncé :

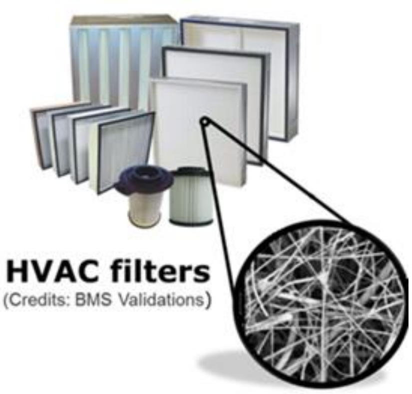

Figure 1- Gros plan sur un média fibreux d'un filtre HEPA.

Après une carrière pleine de succès chez DUPONT & Associées Inc., vous rejoignez la compagnie FiltAIR Inc., fabriquant de filtres HEPA en matériaux fibreux pour système HVAC[1]. Les filtres sont principalement caractérisés par leur efficacité de capture de particules aérosols (p.ex. poussières, bactéries, virus) et par leur perte de charge ΔP. Cette dernière est

1 HEPA : High-Efficiency Particulate Air filter; HVAC : Heating, Ventilation and Air-Conditioning.

reliée par la loi de Darcy à la perméabilité k du milieu filtrant qui s'écrit :

$$\Delta P = \frac{\mu U_i \epsilon h}{k} \tag{1}$$

où μ est la viscosité dynamique de l'air, U_i la vitesse interstitielle de l'air à travers le milieu filtrant, ϵ sa porosité et h son épaisseur ($= \Delta x \, N_x$). La perméabilité est donc une propriété matérielle du milieu filtrant très importante lorsque l'on conçoit un filtre. Le matériau filtrant est en général constitué de fibres (p.ex. naturelles, polymères, en verre) de quelques microns, voire quelques dizaines de microns, qui sont organisées en un matelas fibreux tridimensionnel très poreux (en général $90\% \leq \epsilon \leq 99\%$) dans lequel les fibres sont principalement orientées dans le plan du filtre (cf. Figure 1).

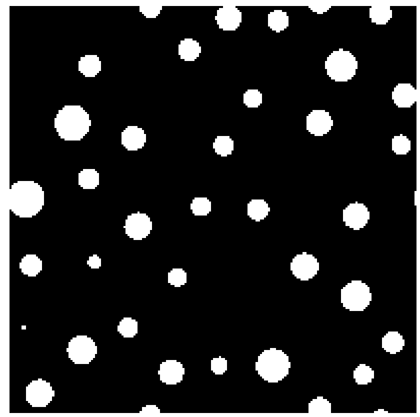

Figure 2 - Matériau filtrant simplifié en 2D. En blanc figurent les fibres en coupe et en noir l'espace poreux. La perte de charge est imposé par le code de gauche à droite et la vitesse U_i est calculée.

K

Votre collègue chercheur, Divad VALID[2], a écrit un code de calcul basé sur la méthode de Boltzmann sur réseau (LBM) pour calculer la perméabilité d'un milieu filtrant et souhaite que vous l'aidiez à le valider. Pour des raisons de temps calcul, le modèle mis au point par M. VALID suppose que le milieu filtrant peut être représenté par un ensemble de fibres toutes parallèles et que l'on peut donc <u>simplifier le problème en 2D</u> en considérant une section de coupe du réseau de fibres dans un plan perpendiculaire à l'axe des fibres tel que représenté à la Figure 2. Bien entendu, cette simplification est une vraie épée de Damoclès quant à la validité de son modèle ! Pour valider le modèle, M. VALID vous conseille de suivre le standard ASME V&V20-2009[3] que vous avez dans le temps étudié et qui détermine un intervalle de confiance à 95,4% dans lequel se situe l'erreur du modèle δ_{model} qui vous servira à déterminer si le modèle proposé est valide selon l'inégalité suivante tel que vu dans l'article sur le standard V&V20-2009:

$$E - k\, u_{val} \leq \delta_{model} \leq E + k\, u_{val} \tag{2}$$

k = 2

↳ Demande

où $u_{val} = \sqrt{u_{num}^2 + u_{input}^2 + u_D^2}$, $E = S - D$ et tous les variables sont définies à l'identique à la norme

---

[2] Toute ressemblance avec une personne existante ne serait que pure coïncidence…

[3] https://asmedigitalcollection.asme.org/VVS/proceedings/VVS2020/83594/Virtual,%20Online/1085872.

Version 1.1

a trouver : E, K, uval

S, D ↵ ↳ unum, uinput, uD

V&V20-2009.

Pour vous aider, il a déjà réalisé des expériences dont le Tableau 1 résume les informations nécessaires et le code contient des propriétés physiques du fluide déjà paramétrées pour vous. Le code génère déjà pour vous des structures fibreuses qui suivent la distribution gaussienne du diamètre de fibres et essaie de respecter au plus proche la porosité donnée en entrée (cf. la donnée de porosité effective rendue par le code – assurez-vous que la porosité effective est assez proche de celle que vous avez demandé. NB : le code ne génère pas d'échantillon aléatoire variant selon la distribution de porosité donné au Tableau 1. Il ne le fait que pour la distribution de tailles de fibres. Ce sera à vous à l'implanter, de façon interne en ajoutant une boucle en MATLAB ou de façon externe en utilisant un script Bash ou Python). —> et pour la permeabilité ?

$\hat{p}$ —> a verifier avant utilisation ?

On vous demande spécifiquement :

A. Sachant que la LBM converge supposément à l'ordre 2 en espace (mais aussi en temps mais ce n'est pas pertinent vu que l'on se préoccupe de l'état stationnaire seulement), évaluer l'incertitude $\frac{GCI}{2}$ ← numérique u_{num} au moyen d'une méthode appropriée vue en vérification de solution. Ici aussi, rapporter clairement ce que vous avez fait pour estimer cette incertitude (c-à-d donner la liste des paramètres, l'étendue de l'analyse effectuée et tous les graphiques pertinents). Pour faire une analyse de converge appropriée, il vous faudra fixer la géométrie du milieu fibreux en gardant le « seed » du générateur aléatoire constant.

B. Évaluer l'incertitude u_{input} résultante de la propagation de l'incertitude des données d'entrée à l'aide d'un maillage suffisamment fin. Pour ce faire, il vous faudra, p.ex., calculer la perméabilité pour diverses structures générées dont la porosité suit la distribution gaussienne sur la porosité (approche Monte-Carlo). Rapporter clairement ce que vous avez fait pour estimer cette incertitude (c-à-d donner la liste des paramètres, l'étendue de l'analyse effectuée et tous les graphiques que vous jugerez pertinents, en particulier la PDF des perméabilités générées par le code).

C. Évaluer l'incertitude u_D des données expérimentales en n'oubliant pas de tenir en compte l'incertitude du perméamètre.

D. Obtenir l'erreur de la simulation E en prenant la solution numérique S et la valeur expérimentale D comme étant les médianes des valeurs de perméabilités obtenues numériquement et expérimentalement.

E. Déterminer l'erreur du modèle δ_{model} suivant le standard ASME V&V20 et conclure sur l'adéquation du modèle numérique et des pistes d'amélioration éventuelles, si nécessaire.

taille = diamètre ?

?

Tableau 1 – Données expérimentales fournies par M. VALID	
Diamètre moyen des fibres (µm)	12.5
Écart-type de la distribution gaussienne[4] sur la taille des fibres (µm)	2.85
Porosité moyenne (-)	0.900
Écart-type de la distribution gaussienne[4] sur la porosité (-)	7.50×10^{-3}
Perméabilité médiane mesurée (µm²) ($= e^{\mu} = \boldsymbol{D}$)	80.6
Écart-type de la distribution log-normale[5] des mesures de perméabilité (µm²) (test de reproductibilité) ($= e^{\sigma}$)	14.7
Incertitude sur les mesures du perméamétre donnée par le manufacturier (µm²) (écart-type)	±10

[4] Normalement, les distributions pour des tailles de fibres et des porosités suivent les distributions log-normales. Pour simplifier ici, nous supposerons ces deux distributions comme gaussienne (c-à-d normale).
[5] Voir note sur l'incertitude des distributions log-normales page suivante.

Note sur l'incertitude des distributions log-normales

Pour la perméabilité, nous allons toutefois considérer une distribution log-normale. Pour une distribution log-normale, la moyenne (ou espérance mathématique) n'est pas le même concept que le mode ou la médiane, en raison de la nature asymétrique de cette distribution, au contraire d'une distribution gaussienne ou normale. Pour capturer 68,3% des valeurs autour d'une certaine mesure centrale dans une distribution log-normale, on se réfère souvent à l'intervalle de confiance basé sur l'écart-type log-normal.

Dans le contexte d'une distribution normale, 68,3% des valeurs se situent à ±1 écart-types de la moyenne. Cependant, pour une distribution log-normale, cette règle s'applique au logarithme des valeurs plutôt qu'aux valeurs elles-mêmes. Ainsi, pour représenter 68,3% des valeurs dans une distribution log-normale, on calcule l'intervalle $\left[e^{\{\mu-\sigma\}}, e^{\{\mu+\sigma\}}\right]$, où μ est la moyenne et σ est l'écart-type des logarithmes des valeurs de la distribution.

Cela signifie que pour couvrir 68,3% des valeurs dans une distribution log-normale, vous devriez regarder les valeurs qui se situent entre l'exponentielle de la moyenne moins une fois l'écart-type et l'exponentielle de la moyenne plus une fois l'écart-type des logarithmes des valeurs.

Lorsque vous travaillez avec des données qui suivent une distribution log-normale et que vous voulez rapporter une incertitude à un écart type, il est important de se rappeler que les mesures de tendance centrale et de dispersion (comme la moyenne et l'écart type) ne sont pas interprétées de la même manière que pour une distribution normale.

Pour une distribution log-normale, il est plus informatif de rapporter la médiane (qui correspond à l'exponentielle de la moyenne de la distribution normale sous-jacente, c'est-à-dire la distribution des logarithmes de vos données) pour la tendance centrale, et de quantifier l'incertitude à l'aide du facteur de variation géométrique (FVG) ou du coefficient de variation géométrique (CVG) pour la dispersion. Ces mesures sont plus adaptées car elles tiennent compte de l'asymétrie et de l'échelle logarithmique de la distribution.

Le FVG est calculé comme l'exponentielle de l'écart type de la distribution normale sous-jacente. Pour un écart type, vous pourriez donc rapporter le FVG comme une mesure de l'incertitude. Le FVG vous donnera un facteur par lequel la valeur médiane peut être multipliée ou divisée pour obtenir une plage d'incertitude.

Pour être plus précis, si vous avez un ensemble de données log-normales et que vous connaissez les paramètres de la distribution normale sous-jacente (moyenne μ et écart type σ), la médiane de la distribution log-normale est e^{μ} , et le FVG est e^{σ}. Ainsi, pour une incertitude à un écart type, vous rapporteriez e^{σ} comme mesure de dispersion autour de la médiane e^{μ}.

Voici un exemple : supposons que vous ayez des données qui, une fois logarithmiquement transformées, ont une moyenne μ de 1 et un écart type σ de 0,5 dans l'espace log.

Pour la distribution log-normale originale (avant la transformation logarithmique), la médiane est donnée par e^{μ}. Dans cet exemple, la médiane est donc $e^{1} = e$.

Le Facteur de Variation Géométrique (FVG) est e^{σ}, qui est $e^{0,5}$ dans cet exemple. Cela signifie que le FVG est environ 1,6487.

Pour obtenir une plage d'incertitude autour de la médiane, on peut regarder, par exemple, l'intervalle qui va de la médiane divisée par le FVG à la médiane multipliée par le FVG. Cela donne un intervalle de :

$$\frac{e^{1}}{e^{0,5}} \text{ à } e^{1} \times e^{0,5}$$

$$\Longrightarrow e^{(1-0,5)} \text{ à } e^{(1+0,5)}$$

$\Longrightarrow$ $e^{0.5}$ à $e^{1.5}$

Donc, pour cet exemple, l'intervalle d'incertitude autour de la médiane (en utilisant le FVG comme multiplicateur et diviseur) irait de $e^{0,5} \approx 1{,}6487$ à $e^{1,5} \approx 4{,}4817$ autour de la médiane $e^{1} = 2{,}7183$.

Il est important de noter que cet intervalle n'est pas symétrique autour de la médiane à cause de la nature asymétrique de la distribution log-normale. On pourrait donc rapporter dans ce cas-ci comme valeur d'incertitude autour de la médiane $u^{-} = e^{1} - e^{0,5}$ et $u^{+} = e^{1,5} - e^{1}$. En conséquence vos valeurs de u_{val} seront différentes au-dessous et en-dessus de la médiane.

Si vous vous demandez comment obtenir les paramètres de la distribution log-normale que vous aurez éventuellement générés, n'oubliez pas de vous aider des outils modernes… soyez efficaces…. demandez par exemple à ChatGPT : « comment obtenir les paramètres d'un échantillon de données suivant une distribution lognormale en Python ? ». 😊

Pour aller plus loin :

- [Log-normal distribution - Wikipedia]
- [Journal of Statistics Education, v13n1: Ulf Olsson (amstat.org)]

M. VALID a laissé une note manuscrite à votre intention qui pourrait s'avérer utile…

Note à votre intention :

Pour lancer les simulations, exécuter sous MATLAB le script launch_simulationLBM.m. Vous pouvez aussi le lancer à la ligne de commande sur le serveur linux en tapant :

matlab -nodisplay -nosplash -nodesktop -r "run('~/devoir3/launch_simulationLBM.m');exit;"

Les paramètres de la simulation peuvent être changés à même ce script ou un script bash automatisé (mieux). Assurez-vous d'avoir placé tous les fichiers m du devoir dans le répertoire ~/devoir3