

THESE

Présentée pour obtenir le titre de

**DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE**

Ecole doctorale : Transferts, Dynamique des Fluides, Energétique et Procédés

Spécialité : Génie des Procédés et de l'Environnement

Par

**Sofiane HOCINE**

*Ingénieur Génie Chimique (USTHB, Alger)*  
*DEA Génie des Procédés et de l'Environnement de l'INPT*

---

**IDENTIFICATION DE MODELES DE PROCEDES PAR  
PROGRAMMATION MIXTE DETERMINISTE**

---

Soutenue le 08 Décembre 2006 devant le Jury composé de :

M. Guy DEFAYE	Rapporteur
M. Jean-Michel RENAUME	Rapporteur
M. Serge DOMENECH	Président
M. Joseph NOAILLES	Membre
M. Luc PIBOULEAU	Directeur de thèse
Mme. Anne-Marie WILHELM	Membre
Mme. Catherine AZZARO-PANTEL	Membre (invitée)



A la mémoire de ma grand mère

A ma mère

A mon jumeau

A Jéééééééééééééééé

A ceux qui me sont chers...



“Se donner du mal pour les petites choses, c’est  
parvenir aux grandes, avec le temps”

Samuel Beckett



*Je tiens à remercier Monsieur Guy DEFAYE Professeur à l'ENSCPB de Bordeaux de m'avoir fait l'honneur d'être rapporteur de cette thèse. Je remercie Monsieur Jean-Michel RENEAUME, Maître de conférences à l'ENSGTI de Pau d'avoir également accepté d'être rapporteur de ce mémoire.*

*Je remercie Madame Anne-Marie WILHELM et Monsieur Joseph NOAILLES pour leurs remarques et conseils.*

*Ma vive reconnaissance à Luc PIBOULEAU pour m'avoir proposé ce sujet de recherche, pour toute sa présence, ses précieux conseils (surtout dans les moments de désespoir) et ses compétences scientifiques qui m'ont permis de mener à bien cette étude.*

*Je tiens aussi à adresser ma gratitude à tout ceux qui m'ont aidé tout au long de la thèse, en commençant par Serge DOMENECH pour ses précieuses remarques et conseils qui ont contribué à orienter mes travaux, en particulier dans la phase la plus importante : « l'étude du régime dynamique ».*

*Je souhaite également remercier Catherine AZZARO-PANTEL, pour sa disponibilité et ses précieuses remarques. Sans oublier André DAVIN, pour son attention, d'autant plus profitable au moment de la rédaction du manuscrit.*

*Je voudrais également saluer l'ensemble des doctorants, en particulier ceux de l'équipe que j'ai eu la chance de connaître dans une ambiance multiculturelle : mon grand fils Alberto, Antonin le retardataire, Firooz l'intelligent, Oscar le sage, Jose Luis le sympa, Ludovic le bûcheur, Adrien le thermodynamicien du second principe et Nadir le fromager. Je remercie l'ensemble des stagiaires de l'équipe, et en particulier ceux que j'ai encadrés : Julien DEBRUYNE et Laurent THUILLEAUX à qui je souhaite une grande réussite. Merci à tous mes collègues et amis de longue date du laboratoire : Alicia, Denis, Fahima, Flavie, Frédéric, Hakima, Ilyes, Iréa, Krime, Micheline, Mohammed (×2), Wassila,... J'ai grandement apprécié les discussions variées que l'on a pu avoir ensemble tout au long de ces trois années. Je leur exprime ma profonde sympathie et leur souhaite beaucoup de bien.*

*J'aimerais enfin saluer les quelques personnes avec lesquelles j'ai passé de nombreuses heures en enseignement à l'ENSIACET : un grand merci à Yolande LUCCHESI qui m'a considéré comme son fils, Jean-François BLANCO pour sa disponibilité, Jérôme dit « le tortionnaire » qui m'a appris à faire du bon café, sans oublier Olivier, Stéphanie et David pour leur gentillesse.*

*Cette période à Toulouse m'a permis de connaître des personnes d'une valeur morale irréprochable, qui m'ont entouré et ont pris soin de moi mieux que je n'aurais pu le faire.*

*C'est avec beaucoup d'émotion que je remercie ma seconde famille « LANGLADE » et en particulier Jessica de m'avoir fait l'honneur du meilleur Paris-brest le jour de mon anniversaire, appris à skier, fait découvrir Avignon,...et tant de bonnes choses en France.*

*Je voudrais saluer aussi et exprimer ma sympathie à tous ceux et celles qui m'ont soutenu et qui ont rendu ces trois années de thèse pleines de souvenirs inoubliables : Fayçal avec son caractère de béton, Stéphane pour ses soirées vin et fromage –surtout-, Mallorie pour son aide à tout moment, Amel pour ses appels du fin fond du Sahara, la famille Julien, Reda et son ventre, le jijilien...*

*Et finalement, c'est avec beaucoup de tendresse et d'affection que mon salut s'adresse à toute ma famille, qui a tout fait pour contribuer à ma réussite, en commençant par mon père, qui m'a initialement poussé à continuer mes études avec tout le soutien nécessaire et inconditionnel. Sans oublier mon grand frère 'Manène'.*

*Je remercie 'SUPER' Salim (mon jumeau) avec qui j'ai dû partager 27 ans de vie plutôt 'commune' : études communes, vêtements communs, amis communs,... quelle galère !!! Je*

*dois avouer que sa naïveté dissimulée me surprend toujours, tout autant que son caractère, qui ne cache finalement qu'un grand cœur plein d'affection...merci encore.*

*Je tiens à remercier Nassima, son amour, sa générosité, son soutien et ses encouragements n'ont fait qu'éclairer mon cœur et mon esprit, et m'ont toujours permis de voir plus clair aux moments les plus sombres.*

*J'ai une grande pensée pour ma grand-mère qui m'avait promis d'assister à ma soutenance... mais le destin en a décidé autrement.*

*Enfin, mes derniers mots sont adressés à ma chère mère, pour tous ses efforts, ses souffrances et son sacrifice irréfutable, je reste certain que sans elle, je ne serais arrivé à ce point. J'espère que sa fierté ne sera pas que celle de ce titre obtenu, mais surtout d'avoir fait de moi ce que je suis.*



## **TITRE : Identification de modèles de procédés par programmation mixte déterministe**

### **RESUME :**

Les problèmes d'optimisation sont classés en grandes catégories, linéaire, non linéaire, programmation linéaire entiers-réels, en fonction de leurs caractéristiques mathématiques. La formulation la plus complexe, rencontrée fréquemment en Génie des Procédés, relève des problèmes non linéaires entiers-réels (MINLP pour Mixed-Integer NonLinear Programming), dont les techniques de résolution sont les plus récentes et les plus lourdes, puisque ce type de problème combine toutes les difficultés des autres. La résolution d'un problème MINLP peut être envisagée selon deux approches, stochastique et déterministe. La voie stochastique qui repose sur des algorithmes tels que le recuit simulé ou les procédures génétiques, connaît actuellement un véritable engouement, dû au fait que les propriétés mathématiques des problèmes n'ont pas à être connues. Toutefois, elle présente deux inconvénients majeurs, l'un lié à la nature même de ces méthodes qui ne peuvent garantir l'obtention d'un optimum, et l'autre au nombre important de paramètres déterminants qu'il faut fixer a priori. Ainsi, les méthodes déterministes, plus précisément celles implantées dans l'environnement de modélisation GAMS, qui ont fait leur preuve sur de très nombreux exemples, ont été retenues dans cette étude, dédiée à l'identification de modèles de procédés. Ces méthodes garantissent, sous des hypothèses classiques, l'obtention d'un optimum, et s'avèrent beaucoup moins dépendantes de l'initialisation des variables et des valeurs de leurs paramètres de contrôle, que les procédures stochastiques.

L'identification d'un modèle pour un procédé consiste à déterminer simultanément le choix, le nombre et l'agencement d'opérations élémentaires le composant, qui donnent lieu à des variables entières, ainsi que les conditions opérations de ces unités, représentées par des variables continues. La fonction objectif à minimiser est l'écart entre la sortie expérimentale et celle calculée par le modèle, qui est recherché dans un ensemble de solutions potentielles nommé superstructure. On peut ajouter à cette fonction évaluant la performance d'un modèle, un terme traduisant sa complexité. Les contraintes du problème traduisent les divers bilans qui doivent être satisfaits au sein du procédé étudié.

Les applications traitées consistent en l'étude d'écoulements en régime stationnaire ou dynamique. Les écoulements sont représentés par des agencements de réacteurs agités continus, de réacteurs piston, de by-pass, de recyclages et de zones mortes.

Dans le cas stationnaire, après quelques exemples didactiques servant à valider l'approche, un bassin de décantation et un réacteur de déphosphatation d'effluents aqueux sont modélisés.

Dans la dernière partie du mémoire, l'étude de la modélisation des procédés en régime dynamique est présentée. Dans ce cas, il s'agit de retrouver au mieux une courbe de distribution de temps de séjour, obtenue expérimentalement après une injection d'un traceur sous la forme d'un échelon ou d'une impulsion de Dirac. Comme dans le cas statique, des exemples simples sont présentés pour valider la procédure de résolution, puis la modélisation d'un local ventilé de l'industrie nucléaire est traitée.

**MOTS-CLES :**

Identification de Modèles, Conception de Procédés, Approche Systémique, Procédés de décantation, Optimisation mixte non-linéaire, Déphosphatation d'effluents aqueux, Ventilation industrielle.

## **TITLE : Process model identification via deterministic mixed-integer programming**

### **ABSTRACT:**

Optimization problems can be classified into categories such as, linear, nonlinear, mixed-integer linear programming, according to their mathematical characteristics. The most complex formulation, frequently encountered in Process Engineering is the Mixed-Integer NonLinear Programming (MINLP), whose solution techniques are the most recent ones, and the heaviest insofar as they present all the difficulties of the other methods. The solution of a MINLP problem can be tackled according to two approaches, stochastic and deterministic. When the mathematical properties of the problem under consideration are ignored, the stochastic solution procedures, based on evolutionary methods such as simulated annealing or genetic algorithms, are now in fashion. However, this type of method suffers of two major inconveniences. First, an optimal solution cannot be guaranteed, and secondly a consequent number of control parameters, having a strong influence on the path leading to the solution, have to be fixed. So deterministic methods, namely the ones implemented in the GAMS software, which have been successfully used in a lot of engineering problems, have been retained in this study, devoted to model identification of processes. Under classical assumptions, these deterministic methods are able to give a local optimum, and are proved to be less dependent on the values of their control parameters, than the stochastic procedures.

Identifying the mathematical model of a process consists in simultaneously determining the choice, the number and arrangement of elementary units of this process, which give birth to integer variables, and the operating conditions of these units which are represented by continuous variables. The objective function to be minimized is the square deviation between the experimental output of the process, and the one obtained from the model, which is searched into a superstructure. To this function evaluating the model efficiency, a term linked to the model complexity, can be added. The constraints of the problem represent the various balances which have to be satisfied within the process under consideration.

The methodology is implemented for modelling steady-state or dynamic processes. The elementary units involved in the processes are well-stirred tank reactors, plug-flow reactors, by-passes, recycles and dead zones.

In the steady-state case, after some examples used to validate the solution approach, two examples involving a wastewater treatment tank and a fluidized-bed process for phosphate precipitation and removal from wastewater, are modelled.

In the last part on the study, the modelling of dynamic processes is presented. In this case, the goal is to fit as well as possible a residence time distribution curve, experimentally obtained after injection of stimuli with two types of tracing, Dirac impulsion or unit step disturbance. As in the steady-state case, simple examples validate the solution procedure, and then the modelling of a safety study of a ventilated nuclear enclosure is detailed.

**KEYWORDS** : Model Identification , Process Design, Systemic Approach, Settling Tank, Mixed integer non-linear optimisation (MINLP), Phosphorus recovery from wastewater, Industrial Ventilation.

# **SOMMAIRE**



<i>Sommaire</i> .....	13
-----------------------	----

<i>Introduction générale</i> .....	21
------------------------------------	----

<b><u>Chapitre 1. PROBLEMATIQUE</u></b> .....	27
---	----

<b>1. OPTIMISATION ET GENIE DES PROCÉDES</b> .....	29
<b>2. DOMAINES CONCERNÉS PAR L’OPTIMISATION EN GENIE DES PROCÉDES</b> .	31
<b>3. PROBLEMATIQUE</b> .....	34
3.1. IDENTIFICATION STATIQUE .....	35
3.2. IDENTIFICATION DYNAMIQUE .....	35
<b>4. PROCÉDURES DE RÉSOLUTION</b> .....	36

<b><u>Chapitre 2. METHODES D’OPTIMISATION EN VARIABLES MIXTES</u></b> .....	39
---	----

<b>1. INTRODUCTION AUX PROBLÈMES MINLP (MIXED INTEGER NONLINEAR PROGRAMMING)</b> .....	41
<b>2. METHODES D’OPTIMISATION POUR LA RÉSOLUTION DE PROBLÈMES MINLP</b> .....	42
2.1. METHODES DETERMINISTES .....	44
2.1.1. Méthode Approximations Externes/Egalité Relaxation (AE/ER) .....	45
2.1.1.1. Démarche globale de la procédure AE/ER .....	46
2.1.1.2. Algorithme AE/ER adapté à la conception des procédés.....	49
2.1.1.2.1. Description de phase 1 :.....	51
2.1.1.2.2. Test local .....	53
2.1.1.2.3. Test global .....	55
2.1.1.2.4. Description de la phase 2.....	56
2.1.2. La méthode Branch and Bound .....	57
2.2. METHODES STOCHASTIQUES .....	58
2.2.1. Méthode de voisinage.....	59
2.2.2. La méthode du recuit simulé .....	60
2.2.3. Algorithmes évolutifs .....	62
2.2.4. Les algorithmes génétiques .....	62
2.2.4.1. Principe .....	63
2.2.4.2. Algorithme général d’un algorithme génétique .....	64
2.3. DEMARCHES HYBRIDES .....	65
2.3.1. Démarche de Résolution.....	66
2.3.1.1. Solution sans superstructure.....	67
2.3.1.2. Solution avec superstructure .....	67

<b>3. PROBLEMATIQUE GENERALE ET CHOIX DE LA METHODE.....</b>	<b>68</b>
<b>4. DEMARCHE ADOPTEE.....</b>	<b>70</b>

***Chapitre 3. METHODES D’OPTIMISATION EN VARIABLES MIXTES implantées dans le logiciel GAMS..... 71***

<b>1. PRESENTATION DE GAMS.....</b>	<b>73</b>
1.1. DEVELOPPEMENT DES OUTILS DE CALCULS INFORMATIQUES .....	73
1.2. PRESENTATION DU LOGICIEL GAMS.....	74
<b>2. TECHNIQUES DE PROGRAMMATION MATHEMATIQUE UTILISEES .....</b>	<b>76</b>
2.1. TENDANCES COMMUNES .....	76
2.2. DICOPT++.....	77
2.2.1. Principe des Approximations Externes.....	78
2.2.2. Evolution de l’algorithme initial.....	81
2.2.2.1. Sous-problèmes infaisables.....	81
2.2.2.2. Contraintes égalité non linéaires .....	82
2.2.2.3. Traitement de fonctions non-convexes .....	83
2.2.3. Algorithme OA/ER/AP .....	86
2.2.4. Critère d’arrêt .....	87
2.3. SBB .....	88
2.3.1. Description de l’algorithme.....	88
2.3.1.1. Algorithme Branch & Bound.....	88
2.3.1.2. Algorithme de SBB.....	90
2.3.2. Options .....	92
2.3.3. Eléments de comparaison théoriques entre DICOPT++ et SBB .....	93
2.4. SOLVEURS COMPLEMENTAIRES .....	94
2.4.1. CONOPT3.....	95
2.4.2. CPLEX .....	97
<b>3. CONCLUSION.....</b>	<b>98</b>

***Chapitre 4. IDENTIFICATION DE PROCÉDÉS EN RÉGIME STATIONNAIRE -études préliminaires-..... 99***

<b>1. INTRODUCTION.....</b>	<b>101</b>
<b>2. CARACTERISATION DE MODELES D’ECOULEMENT POUR UNE STRUCTURE CONNUE .....</b>	<b>102</b>
2.1. FORMULATION DU PROBLEME.....	102
2.1.1. Cas de RAC en série.....	103
2.1.2. Cas des RAC en parallèle .....	104
2.1.3. Combinaison de RAC.....	105
2.2. RÉSULTATS ET ANALYSE.....	106



<b>3. ÉTUDE D'UN RÉSEAU DE TRANSPORT DE GAZ NATUREL .....</b>	<b>107</b>
3.1. DESCRIPTION DU PROBLÈME.....	107
3.2. VARIABLES DU PROBLEME .....	108
3.3. FONCTION OBJECTIF .....	108
3.4. CONTRAINTES DU PROBLEME .....	111
3.5. RÉSULTATS ET ANALYSE.....	113
<b>4. CONCLUSION.....</b>	<b>116</b>

***Chapitre 5. IDENTIFICATION DE MODÈLES EN RÉGIME STATIONNAIRE –étude d'un bassin de décantation et d'un réacteur de déphosphatation d'effluents aqueux-..... 119***

<b>1. ÉTUDE D'UN BASSIN DE DECANTATION .....</b>	<b>121</b>
1.1. DESCRIPTION DU PROBLEME.....	122
1.2. RESOLUTION DU MODELE .....	124
1.2.1. Stratégie de résolution .....	124
1.2.2. Mise en équations.....	124
1.3. EQUATIONS DES MODELES.....	126
1.3.1. Modèle à flux fixes.....	126
1.3.2. Modèle à flux variables .....	127
1.3.3. Bornes sur les variables continues.....	128
1.4. RESULTATS ET ANALYSE.....	128
1.4.1. Modèle à débits constants.....	129
1.4.2. Modèle à débits variables .....	130
<b>2. MODELISATION ET OPTIMISATION D'UN REACTEUR EN LIT FLUIDISE DE DEPHOSPHATATION D'EFFLUENTS AQUEUX .....</b>	<b>131</b>
2.1. TRAVAUX ANTERIEURS .....	131
2.1.1. Description du procédé de déphosphatation .....	133
2.1.2. Observations expérimentales.....	134
2.1.3. Méthode de résolution utilisée.....	135
2.2. MODELISATION DU LIT FLUIDISE.....	137
2.3. DONNÉES DU PROBLÈME ET RÉOLUTION .....	141
2.3.1. Initialisation des variables .....	141
2.3.2. Démarche 1.....	142
2.3.3. Démarche 2.....	143
2.3.4. Résultats numériques.....	144
2.3.4.1. Résultats cas 1 (débit faible).....	144
2.3.4.2. Résultats cas 2 débit fort .....	146
2.3.4.3. Résultats cas 3 deux débits simultanés.....	147
2.3.5. Analyse des résultats .....	149
2.4. INFLUENCE DU CHOIX DE LA SUPERSTRUCTURE .....	150
2.4.1. Structure 1 .....	150
2.4.2. Structure 2 .....	152
<b>3. CONCLUSION.....</b>	<b>153</b>

***Chapitre 6. IDENTIFICATION DE MODÈLES EN RÉGIME DYNAMIQUE –études  
préliminaires-..... 155***

<b>1. THÉORIE DES DISTRIBUTIONS DE TEMPS DE SÉJOUR .....</b>	<b>158</b>
1.1. TECHNIQUES DE TRAÇAGE.....	158
1.1.1. Généralités.....	158
1.1.2. Stimuli.....	159
1.1.3. Traceurs .....	160
1.2. HYPOTHÈSES RELATIVES À L'APPROCHE SYSTÉMIQUE .....	161
1.3. ÉLÉMENTS DE THÉORIE SUR LES DTS .....	163
1.3.1. Définition .....	163
1.3.2. Formules caractéristiques .....	164
1.3.3. DTS des modèles d'écoulements idéaux .....	166
1.3.4. DTS des écoulements réels.....	166
1.3.5. Extension de la notion de DTS .....	167
<b>2. ÉTAPES DE CARACTERISATION DU PROBLEME DYNAMIQUE .....</b>	<b>167</b>
2.1. PROCEDURE DE VALIDATION DE L'APPROCHE .....	167
2.2. MODELISATION DU PROBLEME SOUS GAMS .....	168
2.2.1. Modélisation du réacteur piston .....	171
2.2.1.1. Injection Echelon .....	171
2.2.1.2. Impulsion de Dirac.....	172
2.2.2. Modélisation du RAC.....	174
2.2.2.1. Purge Échelon.....	174
2.2.2.2. Impulsion de Dirac.....	175
2.2.3. Fonction objectif.....	176
2.2.4. Bornes des variables.....	176
2.3. RESULTATS OBTENUS.....	177
2.3.1. Purge échelon.....	177
2.3.2. Impulsion de Dirac .....	179
<b>3. CONCLUSION.....</b>	<b>182</b>

***Chapitre 7. IDENTIFICATION DE PROCÉDÉS EN RÉGIME DYNAMIQUE -étude de  
cas- ..... 183***

<b>1. INTRODUCTION.....</b>	<b>185</b>
<b>2. RAPPEL SUR LA VENTILATION INDUSTRIELLE.....</b>	<b>185</b>
2.1. RISQUES INDUSTRIELS ET ROLE DE LA VENTILATION .....	185
2.1.1. Risques industriels liés à la dissémination d'aérocontaminants .....	186
2.1.1.1. Nature du risque.....	186
2.1.1.2. Mesures de protection .....	186
2.1.2. Rôle du système de ventilation.....	187
2.1.2.1. Généralités sur la ventilation industrielle.....	187
2.1.2.2. Spécificité de la ventilation dans l'industrie nucléaire.....	189
2.1.2.2.1. Confinement des matières radioactives .....	189
2.1.2.2.2. Rôle de la ventilation dans l'industrie nucléaire.....	189
2.1.2.3. Evaluation du risque .....	191
2.2. Position du problème.....	193

2.2.1.	Nature des aérocontaminants traités .....	193
2.3.	Connaissances sur les écoulements dans les espaces ventilés .....	194
2.3.1.	Etudes expérimentales .....	195
2.3.1.1.	Premiers pas vers une modélisation des phénomènes .....	195
2.3.1.1.1.	Etablissement de corrélations .....	195
2.3.1.1.2.	Modèle à « 2 zones » .....	195
2.3.2.	Approches numériques .....	197
2.3.2.1.	Approche numérique prédictive.....	197
2.3.2.1.1.	Généralités sur les codes de mécanique des fluides.....	197
2.3.2.1.2.	Problème du maillage.....	198
2.3.2.1.3.	Choix des modèles physiques.....	199
2.3.2.1.4.	Analyse de la qualité des résultats .....	199
2.3.2.1.5.	Conclusions sur les CMF.....	200
2.3.2.2.	Modèles « multi-zones » .....	200
2.3.2.3.	Approche systémique.....	201
2.3.2.3.1.	Applications de l'approche systémique en ventilation industrielle.....	201
2.3.2.3.2.	Logiciels disponibles .....	202
2.3.2.3.3.	Conclusions .....	202
2.3.3.	Bilan des connaissances sur les écoulements dans les espaces ventilés .....	203
<b>3.</b>	<b>Validation de la méthode sur des exemples traités dans la littérature : .....</b>	<b>205</b>
3.1.	Exemple préliminaire .....	205
3.2.	Exemple d'AMEUR .....	210
3.3.	Exemple de référence .....	213
3.3.1.	Présentation du modèle.....	213
3.3.2.	Superstructures utilisées .....	214
3.3.2.1.	Purge échelon.....	216
3.3.2.2.	Impulsion de Dirac.....	217
<b>4.</b>	<b>Etude local Mélanie .....</b>	<b>220</b>
4.1.	Présentation de l'installation .....	220
4.2.	Réponse à une injection échelon .....	221
4.3.	Modélisation du local MELANIE .....	222
4.4.	Résultats suivant la superstructure globale.....	223
4.4.1.	Résultats avec 45 points .....	224
4.4.2.	Résultats avec 180 points .....	226
4.5.	Résultats obtenus suivant la superstructure 2.....	227
4.5.1.	Résultats avec 45 points .....	228
4.5.2.	Résultats suivant 180 points .....	229
4.6.	Résultats obtenus suivant la superstructure 3.....	230
4.6.1.	Résultats avec 45 points .....	231
4.6.2.	Résultats avec 180 points .....	232
<b>5.</b>	<b>Conclusion.....</b>	<b>234</b>
	<b><i>Conclusions et perspectives.....</i></b>	<b>235</b>
	<b><i>Références Bibliographiques .....</i></b>	<b>241</b>



# **INTRODUCTION GENERALE**



Optimisation et Génie des Procédés sont intimement liés depuis l'émergence de cette dernière discipline. Tout d'abord réalisée empiriquement par des expérimentateurs intuitifs et astucieux, l'optimisation a pris un aspect plus mathématique avec la mise en œuvre des techniques de planification expérimentale. Puis, au début des années 1960, l'apparition de codes de calcul développés dans des langages maîtrisables par tout scientifique a marqué un tournant dans l'optimisation des procédés, qui a pris une tournure de plus en plus numérique. C'est dans ce cadre très général que se positionne la présente étude.

L'optimisation en Génie des Procédés concerne d'une part la détermination des conditions opératoires d'un procédé plus ou moins complexe, d'autre part la définition de la structure d'une unité, et enfin dans le cas présentant le plus haut degré de sophistication, la détermination simultanée de la structure et des conditions opératoires d'un ensemble d'unités interconnectées. Il s'agit dans ce dernier cas d'un problème identifié par le vocable « mixte », dans la mesure où deux types de variables, entières et réelles, apparaissent dans la formulation mathématique du problème.

La présente étude relève des problèmes mixtes en Génie des Procédés, qui peuvent être exprimés sous la forme : étant donnée des entrées et des sorties parfaitement connues, déterminer le procédé qui puisse réaliser les sorties à partir des entrées, en optimisant un ou plusieurs objectifs. Le problème peut être de nature monocritère ou multicritère (lorsque le compromis le plus satisfaisant possible doit être déterminé entre les divers critères considérés). Il s'agit, soit de concevoir un procédé, soit de bâtir un modèle mathématique, permettant d'atteindre les sorties désirées en fonction des entrées. Le procédé ou le modèle recherché est construit par optimisation de la nature, de l'agencement et du nombre d'opérations unitaires ou de modèles mathématiques élémentaires (variables entières), ainsi que de leurs conditions opératoires (variables continues). Dans le premier cas, le problème est identifié par le terme « conception de procédés » et dans le second par le vocable « identification de modèles », problème auquel ce mémoire est consacré. Seul le cas monocritère sera traité.

La résolution de problèmes mixtes peut être abordée selon deux voies distinctes, qui trouvent leur justification propre dans la formulation et la connaissance des propriétés mathématiques du problème considéré. Lorsque le problème est très mal connu, dans le sens où la fonction objectif et/ou les contraintes n'ont pas d'expression

analytique, mais sont évaluées par utilisation de procédures de simulation, les méthodes stochastiques offrent un cadre de résolution attractif. Toutefois, bien que l'efficacité de certaines procédures stochastiques puisse être prouvée de façon asymptotique sous certaines conditions (par exemple, le recuit simulé), et qu'elle ait été constatée sur une multitude d'exemples, de nombreux paramètres, conditionnant la recherche, doivent être fixés. Par ailleurs, aucune considération théorique ne permet d'analyser la qualité de la ou des solutions obtenues. Une alternative à la résolution de problèmes mixtes, repose sur l'utilisation de méthodes, dites déterministes par opposition aux procédures stochastiques, fondées soit sur des algorithmes Branch and Bound, soit sur des méthodes de décomposition, où un problème en variables entières et un problème en variables continues sont résolus alternativement de façon itérative. La mise en œuvre de méthodes déterministes, comme c'est le cas dans ce travail, requiert une connaissance mathématique précise de la formulation du problème.

Dans cette étude, dédiée à l'identification de modèles d'écoulement, tout d'abord dans le cas statique, puis ensuite en régime dynamique, la fonction objectif traduit soit (i) l'écart quadratique entre une sortie expérimentale (ou des sorties expérimentales dans le cas dynamique) et une sortie déterminée (ou des sorties déterminées) par le modèle identifié, soit (ii) le nombre d'unités élémentaires composant le modèle identifié, sous contrainte que la (ou les) sortie(s) fournie(s) par le modèle soi(en)t égale(s) à la (ou les) sortie(s) expérimentale(s), ou bien (iii) une combinaison du terme d'écart quadratique et du nombre d'unités. Les contraintes, qui représentent les équations de bilans et les sorties des modules élémentaires en fonction de leurs entrées, sont analytiques, tout comme la fonction objectif. Une telle expression du problème a conduit naturellement au choix de méthodes déterministes implantées dans l'environnement de modélisation *GAMS* (General Algebraic Modelling System). Un tel choix a été guidé par le fait que *GAMS* devient, malgré certaines imperfections, un standard en Génie des Procédés, et fait actuellement partie de nombreux cursus universitaires.

Dans le cas statique, l'approche est tout d'abord validée sur des exemples didactiques et sur un réseau de distribution de gaz naturel. Dans un deuxième temps, un bassin de décantation, puis un réacteur en lit fluidisé de déphosphatation d'effluents aqueux sont modélisés, en partant d'une superstructure comportant l'ensemble des solutions potentielles par agencements de modules élémentaires, qui sont des réacteurs agités continus idéaux, des réacteurs piston, des zones mortes, des recyclages et des by-pass. Dans cette partie, l'objectif consiste à déterminer le meilleur modèle permettant d'atteindre une sortie expérimentale.



Une étude similaire est menée dans le cas dynamique, où la validation est effectuée sur trois exemples issus de la bibliographie. Puis, la démarche est testée pour une enceinte de confinement, le local Mélanie, utilisée dans le secteur nucléaire. Ici, le but est d'identifier le modèle minimisant, à chaque pas de temps défini sur un horizon temporel donné, l'écart quadratique entre la sortie fournie par le modèle et le point expérimental situé sur une courbe expérimentale de distribution de temps de séjour (DTS).

Un examen particulier porte sur les limitations et les possibilités d'extension et de généralisation de l'étude effectuée.

Après un premier chapitre d'analyse bibliographique permettant de situer les enjeux scientifiques des problèmes de conception de procédés et d'identification de modèles, une revue des méthodes d'optimisation en variables mixtes est effectuée dans le deuxième chapitre. Les méthodes déterministes Branch and Bound, Décomposition Généralisée de Benders, Approximations Externes, sont discutées, ainsi que les méthodes stochastiques évolutives, avec en particulier les procédures de voisinage comme le recuit simulé, ou celles adaptatives telles que les algorithmes génétiques.

Le troisième chapitre est dédié à la présentation des outils de *GAMS* choisis, à savoir *DICOPT++* fondé sur la méthode des approximations externes, *SBB* qui met en œuvre un algorithme Branch and Bound, ainsi que le logiciel *CONOPT3* utilisé par les deux procédures précédentes pour résoudre les problèmes NLP générés.

Dans le chapitre quatre, le premier de la partie statique, l'approche de modélisation à partir d'une superstructure est validée sur des exemples didactiques, ainsi que sur un réseau de transport de gaz naturel.

Le chapitre cinq poursuit l'étude dans le cas statique, avec la modélisation d'un bassin de décantation et d'un réacteur en lit fluidisé de déphosphatation d'effluents aqueux. Les résultats sont comparés avec ceux publiés dans la littérature.

Les deux derniers chapitres concernent l'étude dans le cas dynamique. Ainsi dans le chapitre six, après un rappel de la notion de distribution de temps de séjour et de son utilisation en Génie des Procédés, des exemples simples servent à valider la procédure de modélisation.

Enfin, dans le septième et dernier chapitre, la ventilation industrielle, avec ses diverses utilisations et ses différentes approches de modélisation, est tout d'abord présentée. Le chapitre se termine par la modélisation du local Mélanie utilisé dans le secteur nucléaire. Les résultats sont comparés avec ceux de l'étude précédente de Laquerbe (1999), qui avait entrepris une étude similaire, mais avec une procédure stochastique.

Le mémoire se termine par une conclusion générale, où les avantages de l'approche déterministe sur les procédures stochastiques utilisées précédemment pour traiter certains des problèmes présentés, ressortent clairement. L'approche déterministe comporte toutefois des limitations, qui sont également reportées. Enfin les possibilités d'extension et de généralisation de l'étude sont évoquées.

# Chapitre 1

## **PROBLEMATIQUE**



## 1. OPTIMISATION ET GENIE DES PROCÉDES

L'optimisation constitue une part importante des activités de recherche en Génie des Procédés, plus particulièrement dans le domaine «Process Systems Engineering - PSE». On peut classer les problèmes rencontrés en fonction de leur expression mathématique, ce classement est général et s'étend à toutes les disciplines où l'optimisation est mise en œuvre. Le critère fondamental pour l'établir repose sur la nature des variables : discrètes ou continues. Historiquement, la classification se réduisait aux problèmes linéaires (LP) et non linéaires (NLP). Les différentes classes de problèmes recensées actuellement, ainsi que certaines procédures très classiques de résolution, sont indiquées sur la figure 1-1.

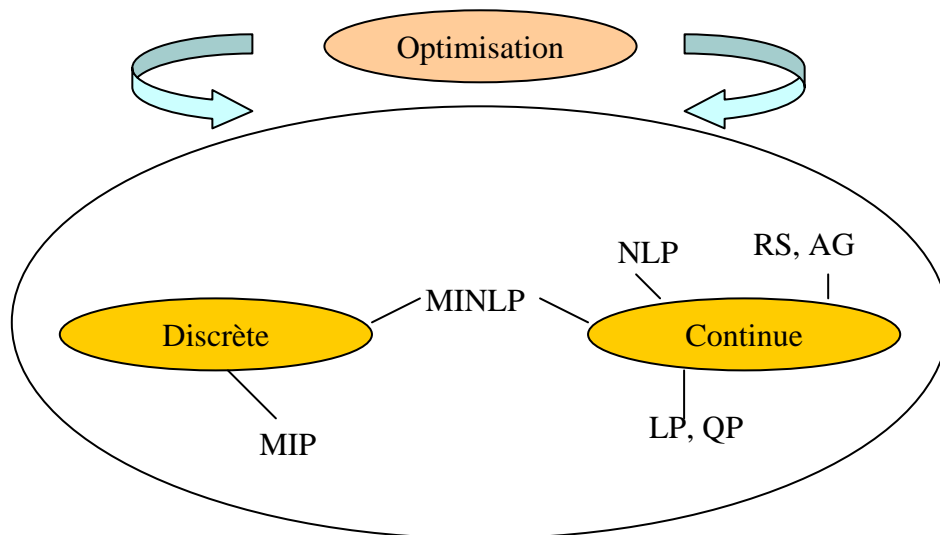


Figure 1-1. Classes des problèmes d'optimisation.

Nomenclature :

AG : algorithme génétique

LP: programmation linéaire

MINLP: programmation mixte entière non linéaire

MIP : programmation mixte entière

NLP : programmation non linéaire

PQ : programmation quadratique

RS : recuit simulé

Selon la nature de leur formulation, les propriétés mathématiques des problèmes, telles que la différentiabilité et la convexité, peuvent conduire à des techniques de résolution particulières.

Pour la classe qui relève de cette étude, celle des problèmes mixtes comportant simultanément des variables entières et réelles, on peut distinguer la programmation mixte-entière linéaire (MILP) et mixte entière non-linéaire (MINLP). Les problèmes MINLP, qui seront ceux abordés au cours de ce travail, peuvent bien sûr inclure des cas particuliers au niveau de leur formulation, mais la principale propriété utilisée pour les répertorier est la convexité.

La formulation générale d'un problème MINLP est donnée par :

$$\min Z = f(x, y) \text{ s.t. } \left\{ \begin{array}{l} h(x,y)=0 \\ g(x,y)\leq 0 \\ x \in X, \quad y \in N^m \end{array} \right.$$

où :

$f(x,y)$  : fonction objectif

$h(x,y)$  : ensemble des contraintes égalité

$g(x,y)$  : ensemble des contraintes inégalité

$X$  : sous-espace vectoriel de  $\mathbb{R}^n$ .

Le vecteur  $x$  représente l'ensemble des variables continues du problème, et correspond généralement aux variables physiques (débit, température, pression, etc.). Le vecteur d'entiers  $y$  est relié à la structure du procédé, et chacun de ses éléments peut traduire l'existence ou non d'une opération unitaire, le nombre d'unités d'un procédé, etc...

Le problème MINLP représente une formulation très complexe, englobant de façon évidente les classes NLP et MIP.

## 2. DOMAINES CONCERNES PAR L'OPTIMISATION EN GENIE DES PROCÉDES

Dans le domaine des procédés, l'optimisation s'avère maintenant être un outil majeur et vital, qui aide les compagnies industrielles à subsister et à se développer dans un contexte économique très perturbé et fluctuant. Historiquement les premiers critères considérés étaient rattachés aux performances économiques des procédés, mais les préoccupations récentes liées à l'environnement, au développement durable, à la sécurité... ont introduit d'autres critères pour l'étude des procédés.

Dans ce cadre, le tableau 1-1 résume les différentes applications des procédures numériques d'optimisation dans de grands secteurs du Génie des Procédés (Biegler et al., 2004).

Les problèmes de conception de procédés, qui se situent très en amont de la réalisation industrielle, s'écrivent souvent sous une forme NLP ou MINLP, alors que les problèmes d'ordonnement ou de planification s'expriment linéairement selon les types LP ou MILP. La raison est que les problèmes de conception se fondent fortement sur des modèles de processus, qui sont généralement non linéaires. En revanche, dans les problèmes d'ordonnement, les prédictions physiques tendent à être numériquement plus simples, puisque la plupart des opérations sont décrites uniquement à travers des temps de transfert. Le cas des problèmes de contrôle relève des deux formulations.

L'évolution de la résolution des problèmes dans le domaine PSE a été non seulement favorisée par le développement des algorithmes d'optimisation, mais aussi par celui des techniques de modélisation (Williams, 1993) ainsi que par celui des outils généraux tels que *GAMS* (Brooke et al., 1998) et *AMPL* (Fourer et al., 1992).

La plupart des problèmes mentionnés dans le tableau ont été traités dans le cas stationnaire, et des efforts importants ont été consentis au sein de nombreux établissements de recherche appartenant à la communauté du Génie des Procédés, tels que C. Floudas à l'université de Princeton (1995), I. E. Grossmann à l'université de Carnegie Mellon (1986, 1999), N. Shah à l'Imperial College (1999), et L. Pibouleau et S. Domenech au Laboratoire de Génie Chimique (1999).

Nature du problème	Formulations mathématiques					
	LP	MILP	QP	NLP	MINLP	RS/AG
<b>Conception et synthèse des procédés</b>						
Synthèse de réseaux d'échangeurs de chaleur	*	*		*	*	*
Synthèse de réseaux d'échangeurs de masse	*	*		*	*	*
Séparations		*			*	
Réacteurs	*			*	*	
Dimensionnement d'équipements				*	*	*
Synthèse de schémas de procédés				*	*	
<b>Opérations</b>						
Ordonnancement	*	*			*	*
Chaîne logistique	*	*			*	
Optimisation en temps réel	*		*	*		
<b>Contrôle</b>						
Modèles de contrôle prédictif linéaire	*		*			
Modèles de contrôle prédictif non linéaire				*		
Hybride		*		*	*	

Tableau 1-1. Applications de la programmation mathématique en Génie des Procédés.

Certains problèmes, souvent rencontrés dans la bibliographie, sont devenus des classiques de l'optimisation en Génie des Procédés. On peut citer par exemple les problèmes de mélanges multi-composés de carburants dans une raffinerie ou l'industrie pétrochimique, ce qui conduit à des problèmes nommés « pooling problems » (Greenberg(1995) ; Fielhouse (1993) , Kallrath et Wilson (1997)) dans la littérature.

A titre d'illustration des démarches communément utilisées pour aborder les problèmes d'optimisation en Génie des Procédés, le problème classique proposé par l'équipe de I. E. Grossmann est brièvement rappelé (Lee et Grossmann, 2003).

Cet exemple concerne la conception d'un réseau impliquant un ensemble donné de courants d'entrée, des bacs, et des produits. L'objectif est de déterminer l'ensemble des courants d'approvisionnement, les bacs, ainsi que les flux correspondants, de manière à minimiser le coût total du réseau tout en satisfaisant la demande en produits. C'est un



problème classique de conception de procédés, qui est abordé au moyen d'une superstructure, c'est-à-dire un schéma contenant l'ensemble des solutions potentielles (voir figure 1-2). Cette superstructure comporte 5 variables de flux d'entrée, 4 bacs et 3 produits (comportant chacun deux constituants dont les compositions sont indiquées dans la figure 1-2). Des variables discrètes sont utilisées pour représenter l'existence de chaque courant et de chaque bac. Les contraintes du problème concernent les bilans matière vérifiés au niveau de chaque nœud. Afin de montrer que même un problème simple comme celui présenté ici peut générer un problème de taille conséquente, les dimensions du problème sont rappelées dans le tableau 1-2. La solution extraite de la superstructure est montrée sur la figure 1-3.

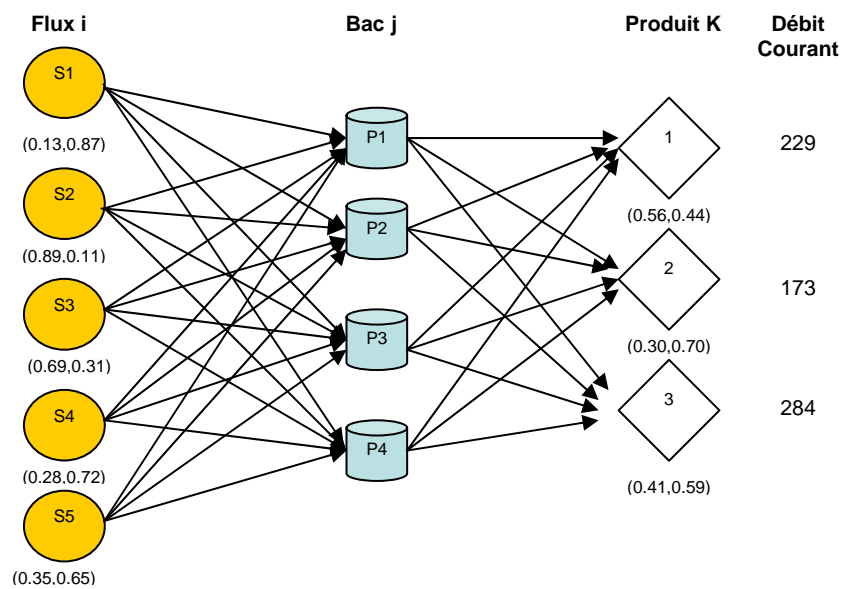


Figure 1-2. Superstructure du réseau de bacs.

variables discrètes	variables continues	Contraintes linéaires	contraintes bilinéaires
9	150	209	36

Tableau 1-2. Dimension du problème du réseau de bacs

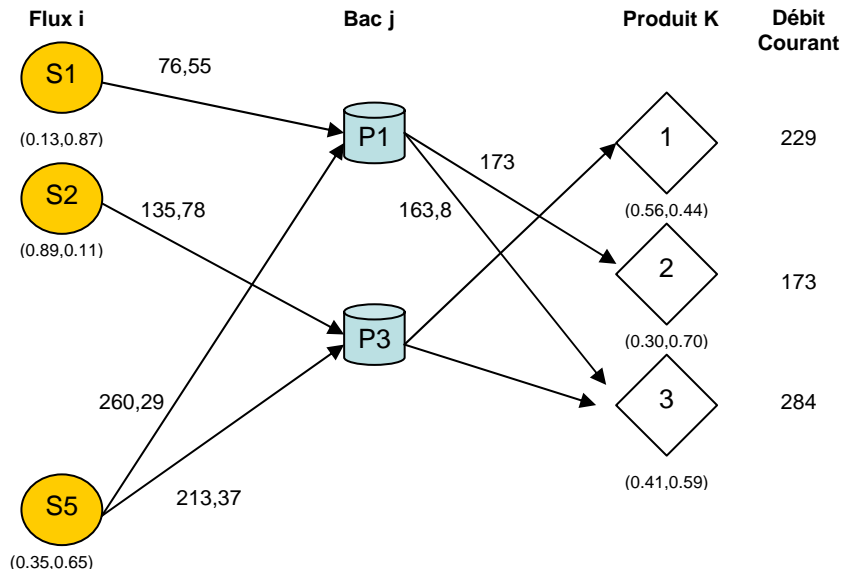


Figure 1-3. Solution optimale du réseau de bacs.

### 3. PROBLEMATIQUE

Dans le cadre de la présente étude, on s'intéressera à la résolution de problèmes d'identification paramétrique et structurelle de procédés fonctionnant en régime stationnaire ou dynamique. Ce type de problème, bien qu'il soit d'un intérêt évident pour la communauté du Génie des Procédés, a été très peu abordé dans la bibliographie et ne figure pas dans le tableau où sont présentés les domaines d'application de l'optimisation, ce qui a motivé la présente étude. L'objectif principal consiste à déterminer des modèles alliant simplicité et représentativité de la réalité physique pour des procédés relativement complexes, pour lesquels, d'une part, une modélisation simpliste est insuffisante vis-à-vis de leur utilisation potentielle et, d'autre part, une modélisation très détaillée, au moyen de codes de mécanique des fluides numériques par exemple, est beaucoup trop complexe à mettre en oeuvre. Il s'agit en fait de déterminer des modèles dont la complexité se situe entre ces deux tendances extrêmes.

### **3.1. IDENTIFICATION STATIQUE**

Chercher au sein d'une superstructure le meilleur modèle pour un procédé donné fonctionnant en régime stationnaire, consiste à déterminer l'agencement de modèles élémentaires permettant de se rapprocher le plus possible d'une valeur donnée, généralement une valeur expérimentale de sortie du procédé. Deux voies de formulation sont envisageables. La première consiste à minimiser l'écart quadratique entre la valeur de consigne et la valeur correspondante calculée par le modèle. Dans la seconde, on recherche le modèle comportant un nombre minimal de modèles élémentaires, sous contrainte que la sortie déterminée par le modèle soit égale à la valeur de consigne. Une voie hybride peut combiner les deux approches précédentes.

Ces différentes stratégies sont étudiées dans le mémoire, ainsi que l'influence de la définition de la superstructure, qui conditionne de façon évidente la nature de la solution obtenue.

### **3.2. IDENTIFICATION DYNAMIQUE**

Le problème devient plus complexe lorsque l'on s'intéresse à la modélisation d'un système évoluant en régime dynamique. Dans cette étude le terme dynamique caractérise le fonctionnement d'un procédé évoluant au cours du temps, et non les évolutions transitoires liées aux démarrages ou aux arrêts. Il ne s'agit plus, comme dans le cas statique de retrouver une valeur de consigne, mais une trajectoire.

Le traitement de problèmes d'optimisation dynamique a connu et connaît toujours un fort développement dans des domaines comme la balistique ou le secteur du spatial, avec en particulier le guidage d'engins et le suivi de trajectoires. Les méthodes mises en œuvre relèvent des méthodes variationnelles, de la programmation dynamique, du principe de maximum de Pontryagin, et sont lourdes à mettre en œuvre. Par contre, elles assurent l'obtention d'une fonctionnelle qui résout le problème avec un degré de précision très important, ce qui est fondamental dans les domaines mentionnés.

Les problèmes d'identification de modèles de procédés diffèrent de ceux qui viennent d'être explicités par deux aspects principaux. Tout d'abord, le degré de précision attendu n'est pas le même que celui requis dans les applications précédentes.

En effet, la précision n'a pas à être aussi stricte, car une erreur de quelques millièmes sur une concentration, indécélable expérimentalement, n'a aucun impact sur la représentativité globale du modèle, alors qu'une erreur de cet ordre sur une trajectoire de missile intercontinental peut avoir des conséquences désastreuses. Par ailleurs, le nombre de variables des problèmes d'identification de modèles en Génie des Procédés est nettement plus élevé qu'en balistique ou que dans les applications à l'industrie spatiale. Ces deux caractéristiques, degré de précision peu strict et problèmes de tailles importantes, rendent l'application des techniques développées spécifiquement pour l'optimisation dynamique, inutilisables dans le cadre de cette étude. La description de ces méthodes ne sera donc pas effectuée.

Le traitement de problèmes d'identification de modèles pour des procédés évoluant en régime dynamique est abordé en mettant en œuvre une technique de discrétisation de l'horizon de temps. C'est une démarche qui a déjà été utilisée en Génie des Procédés pour l'optimisation d'opérations unitaires, telles que la rectification discontinue (Farhat, 1990, 1991), ou les réacteurs discontinus ou semi continus (Garcia, 1995). La trajectoire de consigne est discrétisée en points, et le problème dynamique se formule comme un problème dans lequel on doit retrouver, non pas un point de consigne comme dans le cas statique, mais un ensemble de points. Les outils de résolution des deux types de problèmes peuvent être les mêmes, toutefois il faut avoir présent à l'esprit que l'aspect dynamique introduit un niveau de complexité bien supérieur à celui du cas statique. En effet, le nombre de variables peut croître considérablement, car certaines variables sont définies à chaque point de discrétisation. L'autre caractéristique, directement liée à la nature même d'une étude de modélisation dynamique, est que les modèles élémentaires de la superstructure évoluent de façon dynamique, et introduisent donc des équations différentielles, voire algébro-différentielles, au niveau des contraintes du problème.

#### **4. PROCEDURES DE RESOLUTION**

Le choix des procédures de résolution de problèmes MINLP issus de la recherche de modèles pour des procédés a été guidé par deux préoccupations majeures.

Tout d'abord les outils sélectionnés doivent permettre d'aborder des problèmes de grandes tailles, pouvant comporter plusieurs centaines de variables et de contraintes.

Ensuite, dans l'optique d'une généralisation de cette étude à beaucoup d'autres domaines du Génie des Procédés, les outils choisis se doivent d'être d'une utilisation aisée, de réduire au maximum l'effort de programmation, et d'être d'accès facile aux membres de cette communauté scientifique.

Ces considérations, ont abouti au choix de l'environnement *GAMS* (General Algebraic Modelling System), qui malgré quelques imperfections au niveau du fichier d'entrée et des options de sortie, n'en demeure pas moins un outil de référence dans le domaine scientifique concerné.



# Chapitre 2

## **METHODES D'OPTIMISATION EN VARIABLES MIXTES**





Ce chapitre est dédié dans un premier temps à la présentation générale des différentes approches utilisées pour la résolution des problèmes MINLP. Les techniques d'optimisation les plus employées dans le cadre des identifications de réseaux en général, tels que transferts de chaleur, de matière, de distribution ou de transport,...etc sont rapidement décrites.

Dans un deuxième temps, une synthèse bibliographique générale des différents travaux a permis d'identifier la méthodologie la plus intéressante pour l'identification paramétrique et structurelle pour ce genre de problème. Se basant sur l'approche dite 'systémique', elle permet une meilleure maîtrise de la résolution du problème.

Enfin, les objectifs principaux de l'étude sont posés ainsi que le choix de l'environnement d'optimisation retenu.

## 1. INTRODUCTION AUX PROBLEMES MINLP (MIXED INTEGER NONLINEAR PROGRAMMING)

La complexité croissante des procédés, donc des problèmes d'optimisation, a entraîné le développement d'un grand nombre de méthodes de résolution. Dans le cadre de cette étude, on s'intéressera à la résolution de problèmes de conception de procédés 'process design', et plus particulièrement aux problèmes d'identification paramétrique et structurelle des procédés statiques et dynamiques. De nature MINLP, ces problèmes représentent un challenge continu, car l'optimisation des procédés revêt une importance capitale dans le domaine industriel, en permettant la réduction des coûts, en améliorant les capacités de production et en accroissant la compétitivité.

Ainsi, soit un problème  $[P]$ , écrit sous la forme classique :

$$\begin{aligned} & \text{Min } Z = f(x,y) && (2-1) \\ \text{soumis à} & g_j(x,y) \leq 0, \quad \forall j = 1, \dots, J \\ & h_k(x,y) = 0, \quad \forall k = 1, \dots, K \\ & x \in X \subseteq \mathcal{R}^n \\ & y \in Y \subseteq \mathcal{N}^m && [P] \end{aligned}$$

où  $y$  = variables discrètes (existence potentielle d'une unité).

$x$  = variables continues (débits, pressions, températures, etc.).

$g, h$  = vecteurs des fonctions de contraintes (bilans de matière et d'énergie, équations d'équilibres, spécifications de conception, contraintes physiques et restrictions logiques).

Les diverses approches mises en œuvre pour la résolution des problèmes MINLP sont présentées ci-après avec leurs fondements ainsi que les bases de développement des différents algorithmes de résolution (solveurs) utilisés.

## 2. METHODES D'OPTIMISATION POUR LA RESOLUTION DE PROBLEMES MINLP

Cette partie fournit une vue d'ensemble des méthodes d'optimisation dédiées au traitement de problèmes non linéaires en variables mixtes. Comme l'indique la figure 2-1 (Collette et al., 2002), ce type de problème se situe dans la zone critique de l'optimisation « difficile », à la croisée de l'optimisation combinatoire et des programmes continus non linéaires. Par ailleurs, en considérant les méthodes de résolution, la figure illustre également sa position intermédiaire entre méthodes mathématiques et métaheuristiques.

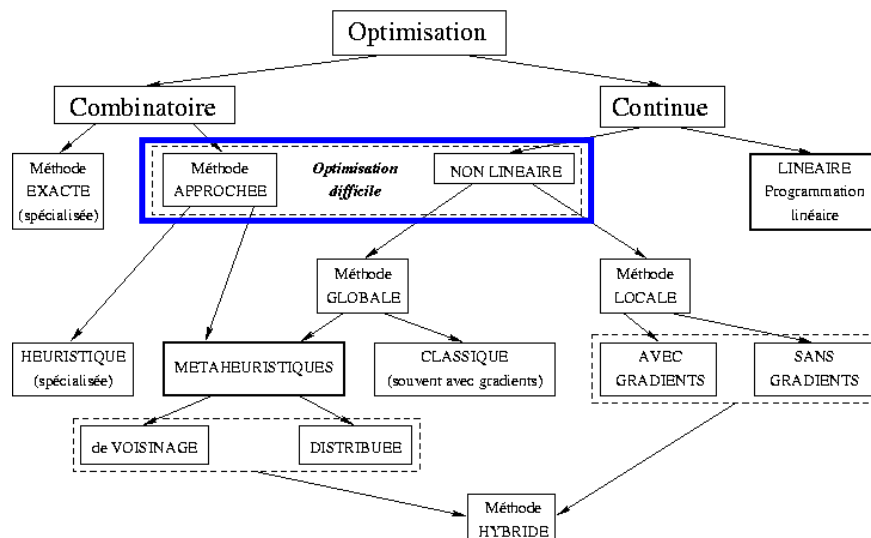


Figure 2-1. Vue d'ensemble des problèmes d'optimisation.

Il ne s'agit pas ici de fournir une revue détaillée de l'ensemble des méthodes et algorithmes existants, mais de donner une idée générale des tendances en terme d'optimisation mixte non linéaire. Il est conseillé de se reporter à Grossmann et al. (2002), Bussieck et al. (2003) et Floudas et al. (2005). Cependant, les algorithmes des méthodes les plus utilisées pour la résolution de problèmes MINLP seront présentés.

La résolution numérique des problèmes MINLP est relativement récente vis-à-vis des autres méthodes de programmation mathématique. En effet, le développement de procédures de résolution pour des problèmes de type NLP (NonLinear Programming), MILP (Mixed Integer Linear Programming) et LP (Linear Programming), a fortement contribué à l'évolution de nouvelles procédures pour le traitement des problèmes MINLP.

Dans le cadre de l'optimisation des procédés, deux cas de figure peuvent se présenter : stationnaire (lorsque le problème est figé) et dynamique.

Signalons que la résolution des problèmes mixtes dynamiques est généralement abordée selon des méthodes dénommées MIDO (Mixed Integer Dynamic Optimization), ceci dans le cas où les équations dynamiques caractérisant le système sont résolues à partir de leur forme différentielle. Le choix, délibéré, de les caractériser sous la forme MINLP dynamique plutôt que sous la forme MIDO, est dû à la nature particulière du problème. En effet, le choix de l'environnement de modélisation utilisé par la suite et surtout, les points particuliers dépendant de la problématique abordée ici ne permettent pas de traiter les contraintes du problème sous forme différentielle, mais plutôt sous forme algébrique.

En ce qui concerne les procédures de résolution, on distinguera deux classes de méthodes pour le traitement de problèmes MINLP : la programmation stochastique et la programmation déterministe, comme cela est présenté sur la figure 2-2.

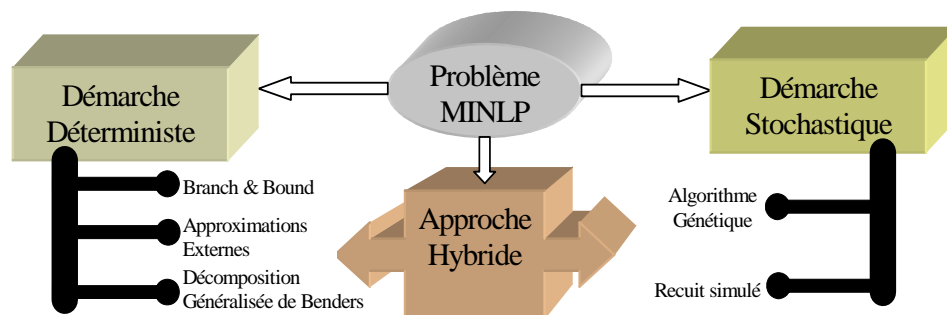


Figure 2-2. Méthodes classiques de résolution de problèmes MINLP.

L'approche stochastique est généralement basée sur une procédure reproduisant un phénomène naturel. Il en résulte des algorithmes évolutifs qui permettent, à partir d'un procédé initial acceptable vis-à-vis des contraintes, des modifications de structure à travers de règles d'évolution (Dietz, 2004). Ce sont généralement des procédures faciles à utiliser, qui présentent cependant l'inconvénient de ne pouvoir garantir un optimum. L'approche déterministe est fondée sur une résolution itérative qui permet de trouver un et un seul optimum global. Les procédures déterministes nécessitent généralement la mise en œuvre de méthodes adéquates à chaque type particulier de problème (Yuan et al., 1988). Des études récentes ont suggéré de développer des méthodes hybrides combinant une méthode stochastique (problème maître) et une méthode déterministe (problème esclave) (Hocine et al., 2003), (Montastruc, 2003), le but est de séparer le problème en deux : la partie au niveau hiérarchique le plus élevé (problème maître) permet de traiter les variables discrètes suivant une méthode stochastique pour définir l'existence ou non de certains éléments du procédé, alors que la seconde partie utilise une procédure déterministe pour calculer les variables continues caractérisant les conditions de fonctionnement du procédé défini dans de la première partie. Toutefois, ces méthodes ne garantissent pas l'obtention d'un optimum.

L'ensemble des classes de méthodes utilisées pour la résolution de problèmes MINLP sera présenté dans ce qui suit. La sélection d'une méthode d'optimisation particulière est effectuée selon la nature du problème abordé.

## **2.1. METHODES DETERMINISTES**

Dans le cadre des méthodes déterministes, on distinguera deux approches de résolution :

- L'approche dite constructive, principalement représentée par la méthode Branch & Bound (Leyffer, 1999), où les différentes variables sont considérées comme continues puis discrétisées en descendant dans l'arbre. Cette méthode est une extension du cas linéaire où à chaque sommet, on résout un sous problème continu non linéaire au moyen d'une méthode NLP.
- L'approche dite itérative, représentée par des méthodes telles que la décomposition généralisée de Benders (Benders, 1962 ; Geoffrion, 1972) ou la méthode des approximations externes (Duran & Grossmann, 1986 ; Fletcher & Leyffer, 1994 ;

Yuan et al., 1988). Le principe général de cette dernière approche est la résolution successive d'un sous problème NLP (où toutes les variables discrètes sont fixées) et d'un problème maître MILP afin de prédire les bornes inférieures ainsi que les valeurs des variables discrètes.

Deux méthodes de programmation mathématique efficaces largement utilisées pour la résolution de problèmes MINLP : Branch & Bound et approximations externes/égalité relaxation sont présentées ci-après.

### *2.1.1. Méthode Approximations Externes/Egalité Relaxation (AE/ER)*

La méthode initiale impliquant seulement les approximations externes ne prend pas en compte certains cas particuliers tels que la non convexité de la fonction objectif et des contraintes impliquant des variables continues, ainsi que la non linéarité des équations mettant en jeu les variables entières, sauf dans certains cas où l'on remplace ces variables entières  $y$  par des variables continues  $x$  et l'on ajoute une contrainte  $y = x$  ; d'autre part, la gestion des contraintes égalité impliquant des termes non linéaires n'est pas prise en compte. L'algorithme de résolution AE sera présenté en détail dans le chapitre suivant.

Outre les limitations mentionnées ci dessus, la méthode des approximations externes présente d'autres limites : en effet, elle n'est utilisable que si des égalités linéaires et des contraintes inégalités, linéaires ou non, sont manipulées. Or, dans la plupart des procédés, les équations décrivant les performances des unités sont généralement non linéaires. Il est possible, dans certains cas, de les éliminer algébriquement ou numériquement, mais cela conduit à des manipulations fastidieuses et très lourdes. L'algorithme implémenté dans cette étude permet de traiter les contraintes non linéaires rencontrées pendant la formulation des problèmes.

Dans le cadre de conception de procédés, et malgré son efficacité, l'algorithme AE/ER développé initialement par Kocis et Grossmann (1987), ne permettait pas dans certains cas d'atteindre une solution optimale du problème. Des améliorations efficaces ont été apportées par la suite à la procédure. La version initiale de la procédure et ses améliorations sont présentées ci-après.

### 2.1.1.1. Démarche globale de la procédure AE/ER

L'algorithme consiste à résoudre alternativement une série de sous problèmes de type NLP et de problèmes de type MILP. Le premier correspond à l'analyse détaillée de configurations de systèmes particuliers, tandis que le second correspond à la solution des approximations linéaires de la superstructure qui, soit, produira une nouvelle structure à résoudre, soit, identifiera le critère d'arrêt de la procédure de recherche.

La méthode des approximations externes est appliquée au problème [P]. Tout d'abord, une combinaison des variables binaires  $y^i$  est choisie. Un problème NLP est résolu à partir de ces valeurs fixées :

$$\left. \begin{array}{l} \text{soumis à} \\ z(y^i) = c^T y^i + \min_x f(x) \\ g(x) + B y^i \leq 0 \\ x \in X \end{array} \right\} [S(y^i)] \quad (2-2)$$

Le problème  $[S(y^i)]$  ainsi posé admet une solution optimale paramétrée par les valeurs fixées  $y^i$  et donnée par  $[z(y^i), x^i]$ . La valeur de la fonction objectif  $z(y^i)$  fournit une borne supérieure à la valeur optimale  $z$  de [P].

L'approximation externe qui intervient dans l'algorithme consiste à linéariser au point  $x^i$  les fonctions  $f(x)$  et  $g(x)$ , on obtient :

$$\begin{array}{l} (a^i)^T x - b^i \leq f(x) \\ D^i x - d^i \leq g(x) \\ \forall x \in X \end{array} \quad (2-3a)$$

où  $b^i$ ,  $a^i$ , sont respectivement un scalaire et un vecteur issus de la linéarisation de la fonction objectif, et  $d^i$  et  $D^i$  un vecteur et une matrice provenant de la linéarisation des contraintes.

Remarque : si les fonctions non linéaires sont continues et convexes, alors l'approximation en  $x^i$  peut être identifiée à :

$$\left. \begin{array}{l} (a^i)^T x - b^i \Leftrightarrow f(x^i) + \nabla f(x^i)^T (x - x^i) \\ D^i x - d^i \Leftrightarrow g(x^i) + \nabla g(x^i)^T (x - x^i) \\ \forall x \in X \end{array} \right\} \quad (2-3b)$$

où  $\nabla f(x^i)$  est l'opérateur gradient de la fonction  $f$  en  $x^i$ ,

$\nabla g(x^i)$  est la matrice jacobienne  $n \times p$  en  $x^i$  ( $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$ ).

Remarque : D'après la figure 2-3, l'application des approximations externes pour une fonction convexe apparaît comme une approximation tangentielle, ce qui semble la meilleure approximation possible. Toutefois, elle a pour effet de sous estimer la valeur de la fonction objectif. En revanche, elle surestime l'espace de recherche (figure 2-4).

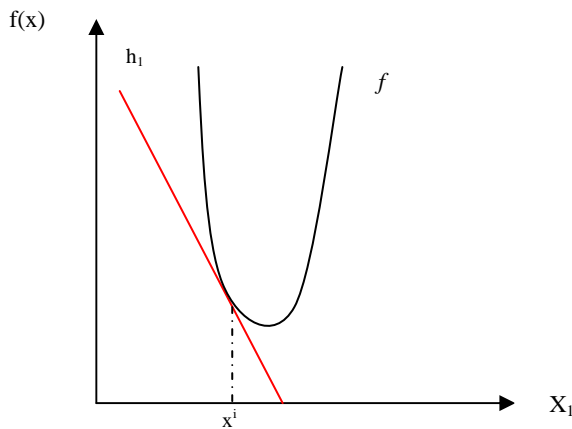


Figure 2-3. Approximation externe pour une fonction convexe

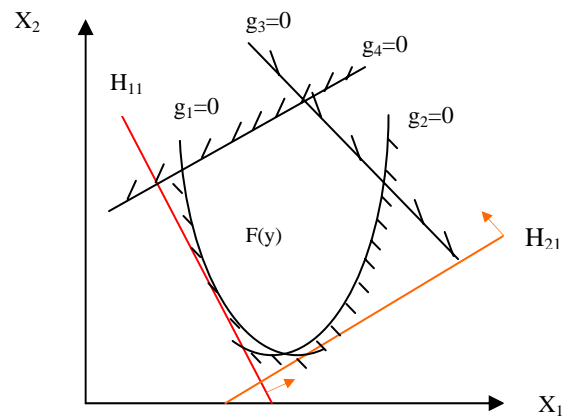


Figure 2-4. Approximation externe pour la fonction  $g$

Cette étape permet donc d'effectuer une estimation de la fonction objectif, qui correspond à une borne inférieure.

A l'itération  $k$ , les approximations externes sur les fonctions  $f$  et  $g$  au point  $x^i$ ,  $i=1, \dots, k$ , permettent l'écriture du problème maître MILP donnant la solution  $z^k$  selon :

$$\begin{aligned}
 & z^k = \min_{x,y,\mu} c^T y + \mu \\
 \text{soumis à} & \left. \begin{aligned} (a^i)^T x - \mu &\leq b^i \\ D^i x + B y^i &\leq d^i \end{aligned} \right\} i = 1, \dots, k \\
 & x \in X, y \in U, \mu \in R
 \end{aligned} \tag{2-4}$$

En conséquence, plus le nombre d'approximations externes augmente, plus la fonction objectif est décrite précisément ainsi que le domaine de la région 'faisable' et, de ce fait, les valeurs  $z^k$  du problème maître définissent une séquence croissante monotone de bornes inférieures de la solution optimale  $z$  du problème MINLP :

$$z^1 \leq \dots \leq z^{k-1} \leq z^k \leq z^{k+1} \leq \dots \leq z$$

Afin de limiter le nombre d'itérations et d'améliorer l'efficacité de la procédure de recherche, une procédure dite 'Integer cuts' est introduite et peut être définie comme un critère de convergence. Son principe est soit l'élimination d'une structure précédemment analysée, soit sa prise en compte comme une solution efficace du problème maître MILP. En d'autres termes, la condition d'infaisabilité de la combinaison de certaines variables binaires est exprimée sous la forme d'une nouvelle contrainte ajoutée au problème MILP.

Ainsi, toutes les solutions  $y^m$ , pour  $m \leq k$ , deviennent inacceptables et la propriété de monotonie de  $z$  exprimée précédemment est maintenue, ce qui devient alors un critère d'arrêt de la procédure. En effet, si  $z^*$  est la meilleure borne supérieure choisie comme étant le coût optimal (le plus faible), alors  $z^* = \min\{z(y^i) : i=1, \dots, k\}$ . Cela signifie qu'en obtenant  $z^k > z^*$ , il n'y a pas d'autre configuration dans la superstructure qui puisse donner un coût optimal plus faible, ce qui permet d'arrêter la recherche. Le problème MILP prend alors la forme suivante :

$$\begin{array}{l}
 \text{soumis à} \quad z^k = \min_{x,y,\mu} c^T y + \mu \\
 \left. \begin{array}{l} (a^i)^T x - \mu \leq b^i \\ D^i x + B y^i \leq d^i \end{array} \right\} \quad i = 1, \dots, k \\
 z^{k-1} \leq c^T y + \mu \leq z^* \\
 y \in \{integer \ cuts\} \\
 x \in X, y \in U, \mu \in R
 \end{array} \tag{2-5}$$

[M<sup>k</sup>]

Cette méthode classique a révélé certaines limites pour l'analyse de la convexité des problèmes impliquant des termes non linéaires. Etant donné que la méthode initiale présentait déjà une bonne efficacité pour la résolution de problèmes MINLP, Kocis et Grossmann (1988) ont ajouté une stratégie d'analyse de la convexité, dite stratégie à deux phases, et impliquant des tests (locaux et globaux) pour vérifier la convexité. Cette procédure peut être d'une grande utilité dans le domaine de conception des procédés. Son principe est présenté dans le paragraphe suivant.



2.1.1.2. *Algorithme AE/ER adapté à la conception des procédés*

La structure de l'algorithme initial AE/ER est présentée dans la figure 2-5.

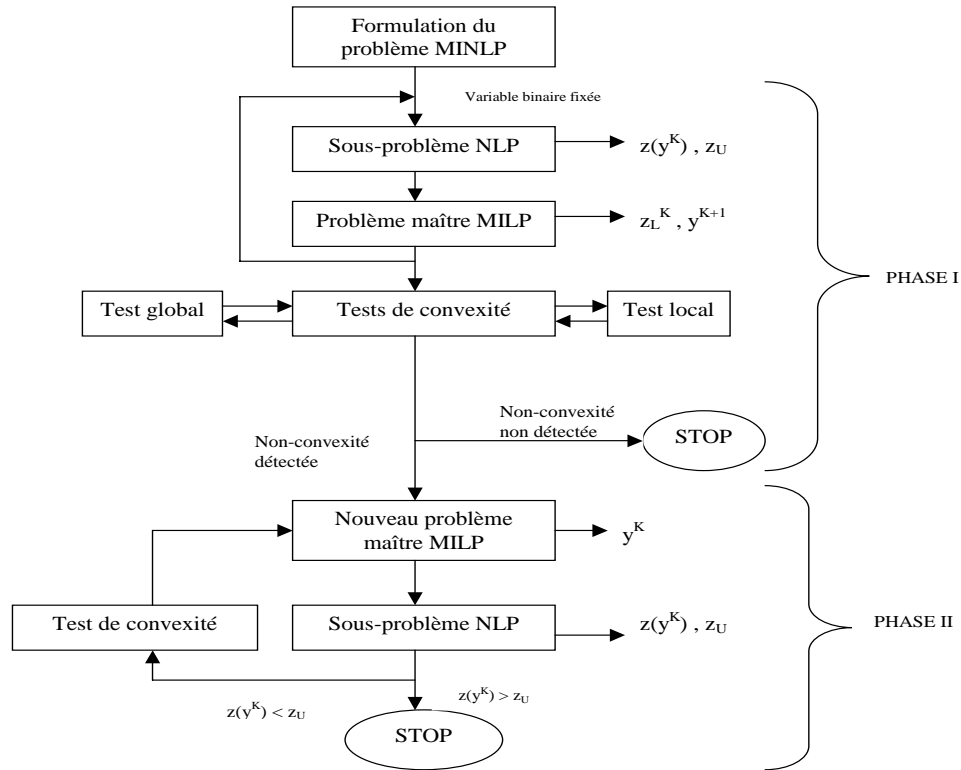


Figure 2-5. Organigramme de l'algorithme AE/ER

où

$Z_U$  = borne supérieure du sous-problème NLP.

$Z_L$  = borne inférieure du problème maître MILP.

$Z(y^k)$  = solution du problème à l'itération  $k$ .

L'idée repose sur une stratégie en deux phases pour trouver la solution optimale d'un problème MINLP non-convexe. L'algorithme AE/ER est utilisé tel qu'il est décrit par la suite, mais selon des dispositions spéciales, dans la mesure où il est relié à des tests local et global qui identifient la non-convexité du problème. Si aucune non-convexité n'est détectée lors de cette première phase, alors la recherche est terminée et on résout 'normalement' le problème, sinon, on procède à une seconde phase où les linéarisations sont systématiquement modifiées dans un nouveau problème maître pour tenter d'obtenir des approximations externes valides. La recherche est terminée quand aucune amélioration supplémentaire n'est trouvée dans le sous problème NLP.

L'algorithme AE/ER est utilisé au niveau de la phase 1. Cette étape est accompagnée d'une série de tests local et global. L'algorithme égalité relaxation est utilisé dans la phase 2. Les principes des deux méthodes sont maintenant présentés.

Rappelons que la forme générale d'un problème d'optimisation MINLP intervenant en conception de procédés, s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \text{soumis à} \quad & z = \min_{x,y} c^T y + f(x) \\
 & h(x) = 0 \\
 & g(x) \leq 0 \\
 & Ax = a \\
 & By + Cx \leq d \\
 & x \in X = \{x \mid x \in R^n, x^L \leq x \leq x^U\} \\
 & y \in Y = \{y \mid y \in \{0,1\}^m, Ey \leq e\}
 \end{aligned} \tag{2-6}$$

[P1]

où

$x$  = variables continues (débits, pressions, températures...)

$y$  = variables binaires (= 0 ou 1 → existence potentielle d'une unité)

$A$  = matrice des coefficients des équations linéaires en variables continues

$B$  = matrice des coefficients des variables binaires dans les contraintes mixtes

$C$  = matrice des coefficients des variables continues dans les contraintes mixtes

$E$  = matrice des coefficients des contraintes entières

$d$  = vecteur des contraintes mixtes

$e$  = vecteur des contraintes entières

$f$  = terme non linéaire de la fonction objectif

$g$  = vecteur des inégalités non-linéaires

$h$  = vecteur des équations non-linéaires

Les exposants  $L$  et  $U$  représentent les bornes inférieure et supérieure.

En fait, de manière plus concrète, les équations  $h(x) = 0$  et  $Ax = a$  correspondent aux bilans matières et énergie et au design des appareils. Les spécifications du procédé sont contenues dans les bornes  $x^L$  et  $x^U$  et dans les inégalités  $g(x) \leq 0$ . La configuration du procédé est représentée par  $By + Cx \leq d$  et  $Ey \leq e$ . Enfin, le terme  $c^T y$  définit le coût de conception et la fonction  $f(x)$  le coût opératoire.

La formulation du problème [P1] est un peu plus complète et plus adaptée que celle de [P] aux problèmes de génie des procédés. Rappelons qu'une procédure AE/ER seule présente des restrictions assez lourdes, qui peuvent conduire à des échecs en optimisation des procédés, où de nombreuses équations non linéaires peuvent apparaître.

### 2.1.1.2.1. Description de phase 1 :

Dans la phase 1, l'algorithme consiste à résoudre alternativement une série de sous problèmes de type NLP et problèmes de type MILP. Le premier correspond à l'analyse détaillée de configurations de systèmes particuliers, tandis que le second correspond à la solution des approximations linéaires de la superstructure qui, soit, produira une nouvelle structure à résoudre, soit, identifiera le critère d'arrêt de la procédure de recherche.

Le principe de l'algorithme reste similaire à celui employé pour les AE sauf que les égalités sont relaxées afin de permettre la résolution du problème. Le vecteur  $y$  du problème [P1] est fixé, on note  $y^k$  sa valeur et le sous-problème NLP suivant est obtenu :

$$\begin{aligned}
 \text{soumis à} \quad & z(y^k) = \min_x c^T y^k + f(x) \\
 & h(x) = 0 \\
 & g(x) \leq 0 \\
 & Ax = a \\
 & By^k + Cx \leq d \\
 & x \in X
 \end{aligned} \tag{2-7}$$

[NLP1]

[NLP1] possède une solution optimale  $x^k$  à laquelle sont associés des coefficients lagrangiens multiplicatifs  $\lambda_i^k$ , utilisés pour relaxer les équations non linéaires ( $h_i(x) = 0$  pour  $i = 1, 2, \dots, r$ ) sous forme d'inégalités. En effet, la valeur de ces coefficients permet l'écriture d'une matrice diagonale  $T^k$  de dimension  $r \times r$  ( $r =$  nombre d'équations non-linéaires) dont les éléments diagonaux sont notés  $t_{ii}^k$  :

$$t_{ii}^k = \begin{cases} -1 & \text{si } \lambda_i^k < 0 \\ +1 & \text{si } \lambda_i^k > 0 \\ 0 & \text{si } \lambda_i^k = 0 \end{cases} \quad i = 1, 2, \dots, r \tag{2-8}$$

Ainsi introduite, la matrice  $T^k$  permet la réécriture du problème [NLP1] en un problème [NLP2] qui est dit relaxé. Ces deux formulations sont équivalentes si certaines conditions sont respectées, appelées conditions de Kuhn-Tucker (Bazaraa et al., 1993) ; elles portent sur  $f(x)$ ,  $g(x)$  et  $T^k g(x)$ .

$$\begin{aligned}
 \text{soumis à} \quad & z(y^k) = \min_x c^T y^k + f(x) \\
 & T^k h(x) \leq 0 \\
 & g(x) \leq 0 \\
 & Ax = a \\
 & By^k + Cx \leq d \\
 & x \in X
 \end{aligned} \tag{2-9}$$

[NLP2]

En utilisant les notations suivantes :

$w^k$  = opérateur gradient de la fonction objectif

$w_0^k$  = terme constant de la linéarisation de  $f$

$R^k$  = matrice jacobienne des équations non-linéaires

$r^k$  = vecteur de constantes issu de la linéarisation des équations  $h$

$S^k$  = matrice jacobienne des inégalités non-linéaires

$s^k$  = vecteur de constantes issu de la linéarisation de  $g$ ,

On définit un problème maître par les AE au point  $x^k$  qui satisfait les conditions explicitées ci-après où les indices IN et A correspondent respectivement aux inégalités non-linéaires inactives et actives :

$$\begin{aligned}
 (w^k)^T x - w_0^k &\leq f(x) \\
 w^k &= \nabla f(x^k)^T \\
 w_0^k &= \nabla f(x^k)^T [x^k] - f(x^k) \\
 T^k h(x) \leq 0 &\Rightarrow T^k [R^k x - r^k] \leq 0 \\
 R^k &= \nabla h(x^k)^T \\
 r^k &= \nabla h(x^k)^T [x^k] \\
 S_{IN}^k x - s_{IN}^k &\leq g_{IN}(x) \\
 S^k &= \nabla g(x^k)^T \\
 s^k &= \nabla g(x^k)^T [x^k] - g(x^k) \\
 g_{EQ}(x) \leq 0 &\Rightarrow S_{EQ}^k x - s_{EQ}^k \leq 0
 \end{aligned} \tag{2-10}$$

A partir de là, il est possible de définir un problème MILP  $[M^K]$ , en considérant des approximations linéaires en  $K$  points,  $x^k$ ,  $k = 1, \dots, K$ . Le but de  $[M^K]$  est de fournir une valeur de  $z$  à l'itération  $K$ , qui va correspondre en fait à une borne inférieure. Le critère d'arrêt de la procédure est le même que précédemment : lorsque la meilleure borne supérieure  $z_U$  devient inférieure à  $z_L^k$ , alors l'itération s'arrête et la solution optimale est déterminée.

$$\begin{aligned}
 \text{soumis à} \quad & z_L^k = \min_{x, y, \mu} c^T y + \mu \\
 & (w^k)^T x - \mu \leq w_0^k \\
 & T^k R^k x \leq T^k r^k \quad k = 1, \dots, K \\
 & S^k x \leq s^k \\
 & Ax = a \\
 & By + Cx \leq d \\
 & Ey \leq e \\
 & z_L^{K-1} \leq c^T y + \mu \leq z_U \\
 & x \in X, \mu \in R \\
 & y \in \{0,1\}^m \cap \{\text{integer cuts}\}^{K-1} \quad [M^K]
 \end{aligned} \tag{2-11}$$

### 2.1.1.2.2. Test local

L'objectif de ce test est de fournir des informations concernant la convexité des contraintes non-linéaires. Le principe du test local est l'obtention d'un point  $\bar{x}^k$  proche de  $x^k$ , dont le choix est orienté par le fait que ce point produit une décroissance de la fonction objectif. Par exemple, si l'équation non-linéaire  $h_i(x) = 0$  est prise en considération, et si on appelle  $h_i^{LIN}$  la linéarisation de  $h_i$ , alors pour la solution  $x^k$  du sous-problème  $NLP^k$ , on obtient :  $h_i^{LIN}(x) = h_i(x^k) + \nabla h_i(x^k)^T [x - x^k]$

Or le point  $x^k$  doit satisfaire la condition suivante :

$$h_i(x^k) = 0 \Rightarrow h_i^{LIN}(x) = \nabla h_i(x^k)^T [x - x^k] \tag{2-12a}$$

Cette relation définit alors le critère de quasi-convexité :

$$\forall x \in X \quad h(x) \leq 0 \Rightarrow \nabla h(x_k)^T [x - x_k] \leq 0 \tag{2-12b}$$

La condition de quasi-convexité de  $h_i(x)$  est satisfaite dès lors que l'équation (2-12b) est satisfaite.

Le point  $\bar{x}^k$ , voisin de  $x^k$  peut être trouvé en résolvant le sous problème NLP<sup>k</sup> relaxé selon  $x_i^k$  et  $y_i^k$  (solutions à l'itération i). Dans ce cas, des bornes inférieures et supérieures pour  $x_i^k$  et  $y_i^k$  sont ajoutées comme suit :

Suivant les valeurs de  $x_i^k$  et  $y_i^k$  :

$$\begin{array}{ll} \text{si } & \begin{array}{l} x_i^k \neq 0 \\ y_i^k \neq 0 \end{array} & \text{alors} & \begin{array}{l} x_i^k (1 - \varepsilon) \leq x_i \leq x_i^k (1 + \varepsilon) \\ y_i^k (1 - \varepsilon) \leq y_i \leq y_i^k (1 + \varepsilon) \end{array} & (2-13a) \end{array}$$

$$\begin{array}{ll} \text{si } & \begin{array}{l} x_i^k = 0 \\ y_i^k = 0 \end{array} & \text{alors} & \begin{array}{l} -\varepsilon \leq x_i \leq \varepsilon \\ -\varepsilon \leq y_i \leq \varepsilon \end{array} & (2-13b) \end{array}$$

Les systèmes d'équations ci-dessus permettent de trouver le point  $\bar{x}^k$  rapidement, puisque le problème NLP donnant comme solution  $x^k$  a déjà été résolu. La valeur de  $\varepsilon$  est choisie très petite, de l'ordre de 0,05. En conséquence, on obtient  $h_i(\bar{x}^k) = 0$ , c'est-à-dire que le test local se réduit à vérifier si on a bien quasi-convexité  $\nabla h(x^k)^T [\bar{x}^k - x^k] \leq 0$ , ce qui revient donc à tester la faisabilité de la linéarisation en  $\bar{x}^k$ .

Pour le problème maître [M<sup>k</sup>], le test local de quasi-convexité pour les équations non linéaires  $h(x) = 0$  et les inégalités actives  $g_A(x)$  revient à vérifier les conditions suivantes :

$$T^k R^k \bar{x}^k \leq T^k r^k \quad S_A^k \bar{x}^k \leq s_A^k \quad (2-14a)$$

Où

$R^k$  = matrice jacobienne des équations non linéaires

$r^k$  = vecteur de constantes issu de la linéarisation des équations h

$S_A^k$  = matrice jacobienne des inégalités non linéaires actives

$s_A^k$  = vecteur de constantes issu de la linéarisation des contraintes inégalités actives

$T^k$  = matrice de dimension r\*r utilisée pour relaxer les approximations linéaires des équations non linéaires r en inégalités

Si, pour chaque rang i, ces inégalités sont vérifiées, alors le test de quasi-convexité fonctionne et la linéarisation correspondante est acceptée, sinon il y a violation de cette condition, auquel cas le test local échoue.

De même, la vérification est effectuée sur les inégalités inactives  $g_{IN}(x) < 0$  et la fonction objectif  $f(x)$ . Afin de garantir que l'algorithme AE/ER converge vers une solution globale, les contraintes inégalités actives ainsi que le terme de la fonction objectif doivent être convexes. D'après Mangasarian (1969),  $g_{IN}(x)$  est dite fonction différentiable convexe si :

$$g_{IN}(x) \geq g_{IN}(x^k) + \nabla g_{IN}(x^k)^T [x - x^k]$$

Le terme de droite de l'équation précédente correspond à la linéarisation de  $g_{IN}(x)$  au point  $x^k$ . La condition de convexité correspond à :

$$g_{IN}(x) \geq g_{IN}^{LIN}(x)$$

Le test local pour les linéarisations des inégalités non linéaires inactives et de la fonction objectif  $f$  se réduit alors, à partir de la formule précédente, à vérifier les inégalités au point  $\bar{x}^k$  :

$$S_{IN}^k \bar{x}^k - s_{IN}^k \leq g_{IN}(\bar{x}^k), \quad (\nabla f(x^k)) \bar{x}^k - w_0^k \leq f(\bar{x}^k) \quad (2-14b)$$

où

$\nabla f(x^k)$  = opérateur gradient de la fonction objectif

$w_0^k$  = terme constant de la linéarisation de  $f$

$S_{IN}^k$  = matrice jacobienne des inégalités non linéaires inactives

$s_{IN}^k$  = vecteur de constantes issu de la linéarisation des contraintes inégalités inactives.

### 2.1.1.2.3. Test global

Le test précédent permet de vérifier des conditions de convexité et de quasi-convexité des fonctions du problème. Cependant, cette procédure ne détermine pas si les approximations externes sont valides pour les autres points de l'espace faisable du problème MINLP. En effet, l'algorithme AE/ER résout le sous-problème NLP<sup>k</sup> pour les différents points  $x^k$ ,  $k=1, \dots, K$ . L'idée de ce nouveau test global est similaire au test précédent sauf qu'il s'applique à une itération  $l \neq k$ , cela revient à vérifier les mêmes équations (représentées par la formule (2-12)) qu'au test local, mais à l'itération  $l$ .

$$\begin{aligned} T^l R^l x^k &\leq T^l r^l & S_A^l x^l &\leq s_A^l \\ (w^l) x^k - w_0^l &\leq f(x^k) & S_{IN}^l x^k - s_{IN}^l &\leq g_{IN}(x^k) \end{aligned} \quad (2-15)$$

$l, k = 1, 2, \dots, K \quad l \neq k$

Les notations sont les mêmes que celles utilisées précédemment.

Dans l'éventualité où ce test échouerait, le point  $x^m$  représentant le maximum de violation pour chaque linéarisation est choisi, on détermine alors de nouveaux coefficients qui fournissent des OA valides pour les points  $x^k$ ,  $k=1, \dots, K$ .

$$\begin{aligned} \hat{r}^l &= R^l x^m & \hat{s}_A^l &= S_A^l x^m \\ \hat{w}_0^l &\leq (w^l) x^m - f(x^m) & \hat{s}_{IN}^l &= S_{IN}^l x^k - g_{IN}(x^m) \end{aligned} \quad (2-16)$$

où  $\hat{r}^l, \hat{s}_A^l, \hat{s}_{IN}^l$  et  $\hat{w}_0^l$  sont les nouvelles valeurs des coefficients fournissant des approximations externes valides aux points  $x^k$ .

#### 2.1.1.2.4. Description de la phase 2

Rappelons que cette phase est appliquée dans le cas où les précédentes étapes échouent, c'est-à-dire si une non convexité est détectée au niveau des contraintes ou de la fonction objectif. Le problème implique alors des approximations externes invalides des fonctions non convexes. Ces fonctions sont systématiquement relaxées pour permettre au nouveau problème maître MILP de localiser une solution meilleure que celle de la phase I.

La formulation de ce problème est similaire à celui de la phase I avec l'addition d'une borne supérieure de la fonction objectif originelle, et l'introduction de variables d'écart dans le traitement des linéarisations qui ont échoué dans les tests précédents.

La linéarisation du problème maître pour chaque itération  $k$  sera divisée en trois ensembles :

$P^k \rightarrow$  réussite de tous les tests

$FG^k \rightarrow$  échec du test global

$FL^k \rightarrow$  échec du test local

Remarque : Le cas où la linéarisation échoue dans les deux tests, est inclus dans l'ensemble  $FG^k$ .

Le test local fournit des points  $\bar{x}^k$  à chaque itération  $k$ . Une linéarisation échoue si en ce point les conditions de convexité et quasi-convexité ne sont pas remplies. C'est pourquoi une variable d'écart  $\zeta_i^k$  est introduite à chaque linéarisation  $i$  de l'itération  $k$ , où le test a échoué, afin de pouvoir violer les contraintes. Cette variable est choisie relativement au poids du coefficient de droite des équations suivantes :



$$\left. \begin{array}{l} T^k R_i^k x - |T^k r_i^k| \zeta_i^k \leq T^k r_i^k \\ (w_i^{k,k})x - \mu - |w_{i0}^k| \zeta_i^k \leq w_{i0}^k \\ S_i^k x - |s_i^k| \zeta_i^k \leq s_i^k \end{array} \right\} i \in FL^k, k = 1, 2, \dots, K \quad (2-17)$$

L'utilisation de valeurs absolues est due à des considérations numériques et est définie par rapport au critère de tolérance  $\varepsilon$  tel que  $| \cdot | \leq \varepsilon$ .

Le test global permet donc de fournir des AE valides aux points  $x^k$  à l'aide des nouveaux coefficients définis ci-dessus de sorte que les linéarisations de l'ensemble  $FG^k$  sont données par :

$$\left. \begin{array}{l} T^k R_i^k x - |T^k r_i^k| \zeta_i^k \leq T^k r_i^k \\ (w_i^{k,k})x - \mu - |\hat{w}_{i0}^k| \zeta_i^k \leq \hat{w}_{i0}^k \\ S_i^k x - |\hat{s}_i^k| \zeta_i^k \leq \hat{s}_i^k \end{array} \right\} i \in FG^k, k = 1, 2, \dots, K \quad (2-18)$$

A partir de ces considérations, le problème maître peut être redéfini en ajoutant un coefficient positif important  $\rho$  afin de minimiser les violations des linéarisations modifiées.

### 2.1.2. Méthode Branch and Bound

Initialement développée par Gupta (1980) et Gupta et al. (1981), le principe général de la méthode d'énumération implicite est le suivant. Toutes les solutions possibles du problème peuvent être énumérées mais l'analyse des propriétés du problème permet d'éviter l'énumération de larges classes de mauvaises solutions. Dans un bon algorithme par séparation et évaluation successives, seules les solutions potentiellement intéressantes sont donc énumérées.

L'approche de type Branch-and-Bound communément appelée méthode de séparation et d'évaluation est une méthode générique de résolution de problèmes d'optimisation, et plus particulièrement d'optimisation combinatoire ou discrète. Dans ces méthodes, la séparation permet de pouvoir énumérer toutes les solutions, tandis que l'évaluation évite l'énumération systématique de toutes les solutions.

La phase de séparation consiste à diviser le problème en un certain nombre de sous-problèmes qui ont chacun leur ensemble de solutions réalisables de telle sorte que tous ces ensembles recouvrent le problème initial. Dans le cas d'un problème MINLP, les variables discrètes sont considérées continues, d'où des sommets où chacun implique un problème de programmation non linéaire en variables continues (NLP). Par la suite des contraintes de bornes sont ajoutées sur certaines de ces variables de façon à obtenir des valeurs entières situées sur les bornes.

En comparant les solutions des divers problèmes continus, on obtient une borne inférieure sur la valeur optimale du critère. On détermine également une borne supérieure sur cette valeur, qui correspond à une solution d'un problème NLP pour laquelle toutes les valeurs des variables discrètes du problème initial sont entières. L'exploration de toutes les branches conduisant à un critère (solution du problème NLP) plus grand que la borne supérieure peut être abandonnée (schéma du 'bounding'), ce qui permet de réduire la fraction explorée de l'arborescence. La valeur de la borne inférieure permet de définir la fonction d'évaluation de chaque sommet de l'arborescence, qui est utilisée pour définir la stratégie de déplacement dans l'arborescence (schéma de 'branching'). Par exemple, si l'on traite en premier lieu le sommet correspondant à la valeur minimale de la fonction d'évaluation, la méthode de Branch-and-Bound entre alors dans le cadre plus restreint des procédures par séparation et évaluation progressive, dont les propriétés de convergence ont été initialement établies par Gondran et al. (1979). L'avantage de cette technique est la réduction de la fraction explorée de l'arborescence. Cependant, elle nécessite souvent un volume important de calculs, car l'exploration de chaque sommet correspond à la résolution d'un problème NLP de dimension d'autant plus grande que le nombre de variables discrètes est élevé.

La méthode Branch-and-Bound a subi plusieurs modifications, dont certaines seront détaillées dans le chapitre suivant.

## **2.2. METHODES STOCHASTIQUES**

Principalement issues des concepts de l'intelligence artificielle, elles sont fondées sur des règles d'évolution probabilistes, contrairement aux méthodes déterministes qui s'appuient sur les propriétés mathématiques. Le plus souvent, elles utilisent uniquement la valeur même de la fonction objectif (critère à optimiser) et non ses propriétés, comme sa différentiabilité, à la base de la plupart des méthodes déterministes, qui permet de calculer une direction d'évolution.

Le principal attrait de ces techniques concerne le traitement de problèmes non convexes. En effet, la contrainte de convexité n'a pas une priorité majeure telle qu'elle est vis-à-vis des méthodes déterministes numériques, de plus, les méthodes stochastiques peuvent s'extraire des minima locaux pour se diriger vers une solution globale.

Il existe deux grandes classes d'adaptation de méthodes stochastiques, i.e. les méthodes de voisinage et les algorithmes évolutifs. Une revue exhaustive ne sera pas présentée ici, il est conseillé de se reporter à Hao et al. (1999) pour plus de détails.

Afin d'illustrer le principe général, deux méthodes appartenant respectivement aux deux tendances sont présentées, ce sont les méthodes les plus utilisées pour le traitement de problèmes à structure variable, comme c'est le cas pour les problèmes de synthèse de schémas de procédés ou d'identification de modèles, il s'agit du :

- recuit simulé (RS) ;
- et des algorithmes génétiques.

### 2.2.1. Méthode de voisinage

La notion de voisinage est définie comme suit :

Soient un ensemble  $X$  fermé et un vecteur  $x=[x_1, x_2, \dots, x_n] \in X$ . Soit également une fonction d'exploration  $f$  telle que  $f(x)=y$ , avec  $y=[y_1, y_2, \dots, y_n] \in X$ . Alors le voisinage de  $Y_x \subset X$  de  $x$  selon  $f$  est l'ensemble de toutes les images possibles  $y$  de  $x$  par l'application  $f$ .

Ainsi, une méthode de voisinage fonctionne typiquement en commençant par une configuration initiale, puis remplace de manière itérative la solution courante par l'une de ses voisines, de manière à faire évoluer correctement la fonction objectif. Les méthodes de voisinage diffèrent d'une part par la fonction définissant le voisinage d'une solution, et d'autre part par la stratégie utilisée pour actualiser la solution courante.

Une grande variété de méthodes de voisinage a été proposée, telles que le recuit simulé, la recherche tabou, les méthodes GRASP, les algorithmes de seuil, la méthode des colonies de fourmis, etc...(Hao et al., 1999). Seul l'exemple, le plus connu et le plus représentatif, est rapidement décrit : le recuit simulé.

### 2.2.2. Méthode du recuit simulé

Le recuit simulé est une procédure d'optimisation combinatoire multi-variables développée depuis plus d'une vingtaine d'années. C'est une méthode locale qui permet d'éviter de se bloquer dans des zones d'optimum local, en autorisant occasionnellement un accroissement du critère, contrairement aux méthodes déterministes.

Rappelons que la méthode du recuit simulé reproduit l'évolution physique d'un solide tendant vers l'équilibre thermodynamique, par un lent refroidissement le conduisant à son état d'énergie minimal. L'analogie entre ce processus et une procédure d'optimisation est étudiée dans Kirkpatrick et al. (1982) et Metropolis et al. (1953). Un nouvel état (ou solution) est accepté si la fonction objectif diminue ou, dans le cas contraire, selon une probabilité dépendant de l'augmentation de la fonction et de la température courante.

La méthode se fonde sur une analogie entre les problèmes d'optimisation à caractère combinatoire et ceux de la physique statistique représentant le comportement d'une opération thermodynamique, le recuit physique des solides ; cette technique est utilisée en métallurgie lors de la solidification des métaux pour obtenir un état cristallin bien ordonné.

A partir d'un arrangement moléculaire initial (dans ce cas, agencement de modèles d'écoulement idéaux initial  $M(.)$ ), d'états énergétiques  $E_i$  donnés (respectivement possédant un critère  $j(M)$ ), correspondant à une température  $T_i$  particulière, de nouveaux arrangements moléculaires possédant une énergie  $E_j$  (respectivement de nouvelles structures  $M'$  possédant un critère  $j(M')$ ) sont générés successivement de manière stochastique. Si la nouvelle configuration a pour effet d'abaisser l'énergie,  $E_j \leq E_i$ , (respectivement de diminuer le critère,  $j(M') \leq j(M)$ ) le changement s'opère (respectivement la nouvelle structure est acceptée) car l'état est plus stable. Si, au contraire, l'état énergétique est plus élevé,  $E_j \geq E_i$ , (respectivement le critère est dégradé,  $j(M') \geq j(M)$ ) la transition peut être acceptée ou non selon une loi de probabilité.

Un paramètre analogue à la constante de Boltzmann entre également en jeu pour le calcul de cette probabilité. Ainsi, une grande variété de schémas de refroidissement est proposée (Triki et al., 2005), certains d'entre eux garantissant même la convergence (sous des hypothèses cependant restrictives).

Les analogies entre la technique du Recuit Simulé en métallurgie et sa mise en oeuvre en tant que technique d'optimisation sont résumées sur le tableau 2-1.

Recuit physique		Recuit Simulé
Paramètre de contrôle : la température		
T	↔	$T_{RS}$
Position des molécules	↔	Arrangement des structures (M)
Niveau énergétique (E)	↔	Critère d'optimisation (j(M))

Tableau 2-1. Analogies recuit physique / recuit simulé.

### Algorithme général de la méthode du recuit simulé

L'algorithme général d'un recuit simulé peut être schématisé de la manière suivante :

Choix d'une température initiale :  $T_{RS}^{\circ}$

Choix d'une structure initiale :  $M=M^{\circ}$

Tant que critères d'arrêts non satisfaits, faire :

Répéter <b>longueur de palier</b> fois :	Génération d'une structure voisine de $M : M'$ Calcul de $\Delta j = j(M') - j(M)$ Si $\Delta j \leq 0$ alors $M = M'$ Sinon accepter $M'$ avec une probabilité $p=f(\Delta j, T_{RS})$
Fin	Réduire température
Fin Tant que	

Les différentes étapes de l'algorithme du recuit simulé pour la recherche de solutions sont les suivantes :

- choix d'une fonction objectif à minimiser ;
- adoption d'un schéma de recuit, dans lequel sont précisés la température initiale, le nombre de configurations générées à chaque palier température, et le schéma de décroissance de la température ;
- choix d'un critère d'acceptation de configurations dégradant le critère ;
- mécanismes du choix de la structure initiale et de génération stochastique de configurations « voisines » ;
- choix des conditions d'arrêts.

Ces différentes étapes ne seront pas développés dans cette étude, il est conseillé de se reporter à Pibouleau et al. (2005) et Hao et al. (1999) pour une présentation de l'état de l'art et des verrous scientifiques.

### *2.2.3. Algorithmes évolutifs d'adaptation*

La seconde classe de métaheuristiques est composée des algorithmes évolutifs d'adaptation, ils sont basés sur le principe de l'évolution naturelle et impliquent trois facteurs essentiels : (i) une population de solutions au problème abordé ; (ii) une technique d'évaluation comportant des opérateurs reproduisant l'élimination de certains individus et la création de nouveaux à partir des survivants (Back et al., 1997). Ce dernier point amène à une amélioration de la qualité moyenne des solutions.

Les techniques les plus utilisées sont les algorithmes génétiques (AG), les stratégies d'évolution (ES) et la programmation évolutive. Introduits par Holland (1975), les AG s'appuient essentiellement sur un codage numérique, de longueur fixe, et un ensemble d'opérateurs génétiques : croisement et mutation. Ces derniers sont définis de manière à opérer aléatoirement sur un ou deux individus. Pour des explications plus approfondies, il est conseillé de se reporter à Beasley et al. (1993) et Whitley (1993).

### *2.2.4. Algorithmes génétiques*

Un algorithme génétique s'appuie sur une transposition artificielle des concepts de la génétique de Mendel et des lois de l'évolution énoncées par Darwin. Selon ces principes, lorsqu'une population est soumise à l'action du milieu naturel, seuls les individus les mieux adaptés survivent et sont aptes à créer une descendance. Au cours des générations, cette sélection naturelle permet l'apparition d'individus de plus en plus adaptés au milieu naturel, assurant ainsi la pérennité de l'espèce.

Les premiers algorithmes de ce type ont été développés dans les années 1950 par des biologistes qui cherchaient à simuler l'évolution d'organismes vivants, bien avant la découverte des chromosomes par les biologistes Watson et Crick. Plus tard, la structure de l'ADN et son implication dans l'évolution étant connues, des numériciens tels que Holland (1975), puis Goldberg (1994) ont adapté ces méthodes à la résolution de problèmes d'optimisation fortement combinatoires. Ils se sont fondés sur l'analogie qui peut exister entre un individu dans une population et la solution d'un problème parmi un ensemble de solutions possibles.

Les algorithmes génétiques sont directement inspirés du concept de sélection naturelle élaboré par Charles Darwin en 1859. Le vocabulaire employé, calqué sur celui de la génétique, comporte des termes tels que : individus (solutions potentielles), population, gènes (variables), chromosomes, parents, enfants, sélection, survie, croisement, mutation. S'il n'existe pas de preuve générale de l'efficacité des algorithmes génétiques, il est par contre aisé de constater l'efficacité de la sélection naturelle dans le monde vivant. En effet, il est clair que l'évolution a permis l'émergence d'organismes étonnamment adaptés à leur environnement. Les algorithmes génétiques tirent leur puissance de ces mécanismes d'évolution naturelle, qui sont rappelés ci-après.

#### **2.2.4.1. Principe**

En génétique, un individu est représenté par un enchaînement de quatre bases nucléiques par module de triplets constituant un code ou « génotype ». Ce code contient un ensemble de données ou « gènes » traduisant les caractéristiques ou « phénotype » de l'individu, c'est-à-dire sa capacité à s'adapter plus ou moins bien au milieu. Ces gènes sont regroupés en « chromosomes ».

Ces chromosomes sont, soit issus de la recombinaison par croisement des gènes de deux individus « parents » de la génération précédente, soit obtenus par mutation d'un chromosome d'un individu. Le croisement correspond à la reproduction sexuée de deux individus en respectant les phénomènes d'hérédité. Lorsque deux individus forts s'accouplent, l'individu créé aura lui-même de grandes chances d'être fort et donc mieux armé pour résister à la sélection naturelle. La mutation représente la modification aléatoire du génotype d'un individu, favorisant l'apparition de nouvelles caractéristiques qui peuvent éventuellement rendre plus fort l'individu impliqué et sa descendance.

Par analogie avec l'évolution naturelle, dans un algorithme génétique, un individu représente une solution possible d'un problème d'optimisation. Il est caractérisé par un ensemble de paramètres, codé dans son génotype. Ces paramètres permettent d'évaluer une fonction objectif traduisant la « force » de l'individu. Un échantillon d'individus constitue la population d'une génération donnée. Cette population subit une phase de sélection des individus les mieux adaptés au problème, soit « les plus forts », simulant ainsi l'influence du milieu naturel sur la survie des individus, qui auront la plus grande probabilité de se reproduire. Lors des phases de reproduction et de mutation, des opérateurs de croisement et de mutation adéquats agissent sur la structure de données des individus sélectionnés dans une population pour les transformer, afin de créer la

génération suivante. Le but de cette étape est de permettre d'une part d'explorer de nouvelles zones de l'espace des solutions et d'autre part de diminuer le risque de figer la recherche sur un minimum local. En effet, en ce qui concerne ce dernier point, et contrairement aux procédures de programmation mathématique classiques, des dégradations de la fonction objectif sont tolérées lors de la mise en œuvre d'un algorithme génétique, permettant ainsi de s'extraire des pièges constituées par des optima locaux.

Les analogies entre la génétique et les algorithmes génétiques sont résumées dans le tableau suivant :

<b>Génétique</b>		<b>Algorithmes génétiques</b>
Individu (représenté par ses chromosomes)	↔	Codage des solutions
Gènes	↔	Blocs élémentaires constitutifs du codage
Population	↔	Ensemble de structures solutions potentielles
Adaptation de l'individu à son milieu	↔	Critère à optimiser
Génération	↔	Itérations de la procédure

*Tableau 2-2. Analogie génétique biologique/algorithme génétiques.*

Le renouvellement des populations d'une génération à l'autre est alors assuré itérativement par l'algorithme génétique en créant, à chaque génération, de nouveaux individus, en conservant certains d'entre eux et en faisant disparaître d'autres individus selon le mécanisme de la sélection naturelle.

A partir d'une population de départ généralement relativement peu adaptée au milieu, mais représentant une large diversité dans l'espace de recherche si elle est générée judicieusement, la mise en œuvre d'un algorithme génétique doit permettre d'obtenir, en fin de recherche, une population finale d'individus très forts, c'est-à-dire un ensemble de bonnes solutions au problème posé.

#### **2.2.4.2. Algorithme général d'un algorithme génétique**

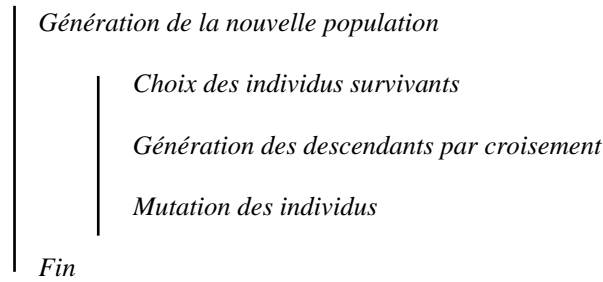
L'algorithme a la structure classique suivante :

*Génération de la population initiale*

*Calcul de l'adaptation de la population initiale*



Tant que **numéro population** inférieur à **nombre maximum de générations**, faire :



Fin Tant que

Les divers éléments retenus et nécessaires à la mise en œuvre de l'algorithme génétique sont :

- un codage des individus ;
- une procédure de génération de la population initiale ;
- une fonction d'adaptation qui permet d'évaluer l'adéquation d'un individu ;
- des mécanismes de sélection, de croisement et de mutation.

Pour une présentation complète de cette approche et des techniques développées dans le but d'améliorer ses performances, on peut se référer aux ouvrages suivants : Holland (1975), Goldberg (1989), Davis (1991), Alliot et Scheix (1993), Koza (1993), Goldberg (1994).

Afin d'améliorer l'efficacité des méthodes stochastiques, certaines études ont proposé une démarche combinant les deux classes de méthodes citées précédemment. Un résumé des démarches les plus pertinentes est présenté dans le paragraphe suivant.

### 2.3. DEMARCHES HYBRIDES

Cette méthodologie combinant les démarches déterministes et stochastiques permet d'améliorer dans un certain sens les résultats obtenus, en s'affranchissant des contraintes présentes dans une méthode par l'utilisation de l'autre. Généralement, au niveau le plus élevé, les méthodes stochastiques jouent le rôle de problème maître, et à un niveau plus bas, les méthodes déterministes, de problème esclave. Des orientations similaires ont été trouvées dans la littérature dans d'autres domaines que celui du génie des procédés (Wang, 1991 ; Attaviriyanupap et Eua-Arporn ; 1998 ; Poloni, 1999).

Généralement dans les problèmes de conception ou de synthèse de procédés, la problématique, se traduit par des modèles assez complexes multi-objectifs. L'idée initialement proposée consiste à la mise en œuvre des méthodes de résolution NLP ayant démontré leurs performances tel que SQP (Successive Quadratic Programming) (Gill et al., 1981 ; Schittkowski, 1986). Seulement, l'efficacité de ces méthodes nécessite une bonne initialisation d'où l'application d'une procédure robuste permettant ainsi une bonne initialisation. Le choix le plus pertinent est l'utilisation de méthodes stochastiques telles que recuit simulé ou algorithmes génétiques qui ont prouvé leur efficacité pour l'obtention de bonnes solutions. La méthodologie utilisée est présentée dans la figure suivante.

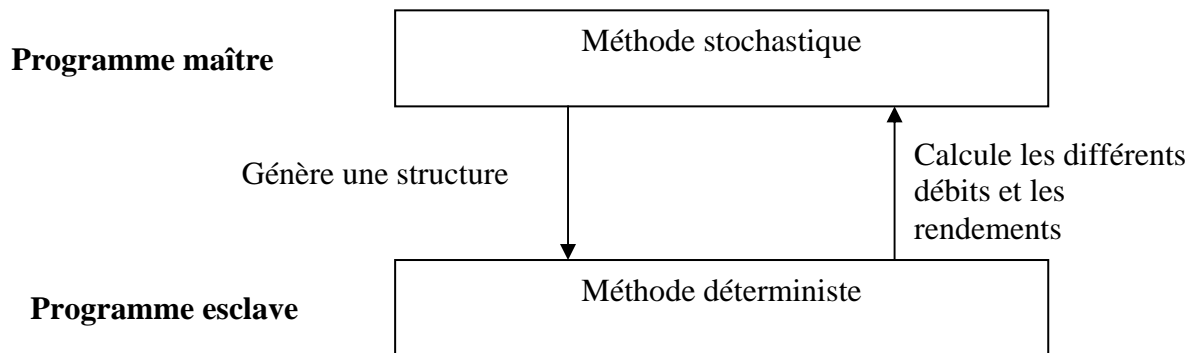


Figure 2-6. Méthodologie hybride.

### 2.3.1. Démarche de Résolution

La démarche de résolution de la méthode hybride repose sur une combinaison de deux méthodes appartenant chacune à une des classes de méthodes citée précédemment, stochastique et déterministe. Selon l'ensemble des méthodes choisies initialement, leurs stratégies de résolution sont les mêmes suivant leur définition initiale, seule une combinaison des deux est effectuée pour améliorer les résultats.

Dans le cas particulier de l'identification de modèles, la mise en œuvre de méthodes hybrides peut se faire selon deux voies différentes.

### **2.3.1.1. Solution sans superstructure**

Pour identifier le réseau, plusieurs études utilisent des méthodes stochastiques sans décrire l'ensemble des solutions possibles. Dans ce cas la stratégie de résolution est basée sur un programme maître qui propose une structure (ou un réseau) au programme esclave. Le programme maître implique une méthode stochastique, tandis que le programme esclave est basé sur une méthode d'optimisation classique pour optimiser les variables opératoires continues (débit, volume,...) en fonction de chaque réseau proposé. Cette stratégie nécessite une méthode pour détecter les solutions infaisables de la structure proposée par la méthode stochastique. Cette détection basée, le plus souvent, sur les concepts physiques est fortement liée au problème et pénalisée par son manque de généralité. Dans ce cas, des données expérimentales sont nécessaires.

### **2.3.1.2. Solution avec superstructure**

Une autre méthode consiste à utiliser une procédure stochastique pour extraire des solutions potentielles de la superstructure. Le principal avantage est que la dimension du problème (en terme de nombre de variables et de contraintes) est constante et que toutes les solutions proposées par la méthode stochastique sont faisables. De plus, la superstructure est définie à partir de l'ensemble des solutions possibles correspondant au problème à modéliser. Rappelons que cette approche n'est pas universelle, dans la mesure où la qualité de la solution obtenue dépend de la formulation de la superstructure. Si des solutions particulières ne peuvent pas être générées à partir de la superstructure, elles ne peuvent pas être prises en compte par la méthode d'optimisation.

Ce point peut être prépondérant pour les problèmes comportant un grand nombre de modèles élémentaires, mais l'expérimentation de ces méthodes numériques a souvent révélé que pour des résultats expérimentaux même très complexes, on obtient une analogie numérique assez proche et plus simple (Claudel, 2002).

Un certain nombre de travaux mettant en œuvre des méthodes hybrides ont été effectués au sein du laboratoire de génie chimique (Montastruc, 2003 ; Laquerbe, 2001). Néanmoins, bien que ces méthodes aient prouvé une bonne efficacité avec l'obtention de résultats très corrects, l'optimum global n'est pas assuré. Dans les deux cas d'études, l'initialisation des variables qui s'effectue aléatoirement pose souvent problème pour l'obtention d'une solution de bonne qualité. Il n'existe pas de méthodologie générale permettant de s'affranchir de la contrainte due à l'initialisation des variables.

### 3. PROBLEMATIQUE GENERALE ET CHOIX DE LA METHODE

La synthèse bibliographique des différents travaux et méthodes de résolution des problèmes MINLP, en particulier pour l'optimisation des réseaux, a permis de constater que ceux-ci correspondent souvent à des problèmes de haute complexité dont la résolution demandait des démarches d'un niveau de sophistication assez élevé. La nature diverse des problèmes a induit un nombre conséquent de publications. Cette analyse a permis de mettre en évidence les points suivants :

- La résolution des problèmes MINLP peut être effectuée suivant un certain nombre d'approches. Parmi elles, l'approche systémique. Cette technique est souvent utilisée en génie des procédés pour la description de procédés complexes par un ensemble de structures simples.

- À noter qu'il n'existe pas actuellement de logiciel commercial d'aide à la conception de modèles pour des procédés complexes. Seuls quelques logiciels de simulation et d'identification paramétrique de tels modèles sont disponibles. En effet, aucun ne permet de guider l'utilisateur dans le choix d'une structure de modèles, c'est-à-dire un agencement de modèles d'écoulements idéaux qui le constituent. Ainsi, une partie de l'objectif est de pallier cette lacune en développant un code de conception assistée par ordinateur de structures de modèles construits sur le principe de l'approche systémique.

- Il existe deux classes de méthodes, pour la résolution du problème considéré. Illustrées par Pibouleau et al. (1999), durant les années 1992 et 1998, les communications dédiées à la résolution de problèmes d'optimisation en génie des procédés se sont résolument orientées vers les méthodes stochastiques telles que le recuit simulé ou l'algorithme génétique. Ce sont des méthodes séduisantes pour des problèmes impliquant des fonctions complexes, pour lesquels un traitement des propriétés mathématiques s'avèrerait difficile. Pour l'autre classe de méthodes, les procédures déterministes, l'essentiel des travaux est plutôt dédié à leur mise en œuvre. Leur mode de fonctionnement repose sur une étude mathématique rigoureuse des fonctions mises en jeu dans la formulation mathématique des problèmes d'optimisation. Cependant, le souci de l'initialisation est moins trivial.

- Depuis les années 1980, la résolution des problèmes MINLP suivant une approche déterministe a pris un essor remarquable. Une part importante de cette croissance s'est concrétisée par le développement de logiciels de modélisation, et parmi eux *GAMS* -General Algebraic Modelling System-(Brooke et al., 1998). Muni de son système intégré de solveurs performants, *GAMS* est capable de résoudre des modèles

aussi volumineux que complexes. Il peut être utilisé pour traiter une grande variété de problèmes (NLP, MILP, MINLP, ..., etc) et permet de rendre la formulation du problème relativement aisée. Deux logiciels ont été développés pour la résolution des problèmes MINLP : *SBB* (Simply Branch & Bound) et *DICOPT* (Discrete Continuous Optimization Package). Le premier est basé sur une procédure de résolution Branch & Bound (Gupta et Ravindram, 1985). Le second repose sur le principe de l'approximation externe, égalité relaxation et pénalité augmentée (Viswanathan et Grossmann, 1990). Utilisant des stratégies de résolution différentes, ils ont été appliqués à des cas d'exemples très complexes et se sont montrés très performants.

- Diverses études ont résolu des problèmes d'identifications de modèles, grâce à des méthodes d'optimisation variées. Certaines s'orientent plus particulièrement vers des méthodes exactes de programmation mathématique, qui présentent l'avantage de garantir l'obtention d'un optimum, mais dont l'application est restreinte par la taille du problème considéré. D'autres études se tournent vers des techniques stochastiques qui, bien que ne permettant pas de conclure sur la qualité de la solution, peuvent aussi demander un effort particulier lors de la phase d'initialisation de variables pour garantir un ensemble de bonnes solutions. Elles peuvent être facilement implémentées et adaptées à une grande classe de problèmes. Il est difficile de prédire les performances d'une méthode sur un problème donné. Les travaux de doctorat présentés ont donc été menés dans l'optique de mise en place d'un outil efficace permettant de trouver une solution optimale (si elle existe) tout en s'affranchissant de certaines phases de résolution pouvant altérer la qualité des résultats.

Ces quelques remarques conduisent à préciser les objectifs de la présente étude :

- Application d'une démarche reproductible pour une gamme de problèmes impliquant l'identification paramétrique et structurelle des procédés selon une méthode fiable n'ayant pas de singularité vis-à-vis de l'initialisation des variables.
- Mise en place d'un outil permettant de résoudre des problèmes d'identification statique et dynamique des procédés.
- Caractérisation d'un outil de conception assisté par ordinateur impliquant des modèles génériques représentés par des superstructures, pouvant potentiellement être applicables à un ensemble de domaines du génie des procédés.

#### **4. DEMARCHE ADOPTÉE**

Le choix de méthodes de résolution stochastique jusqu'à un passé récent paraissait inéluctable pour traiter la gamme de problèmes considérés. Vu l'évolution importante des méthodes de résolution déterministes, l'utilisation d'un logiciel d'optimisation déterministe s'est avéré être une alternative très intéressante, car elle engendre moins de contraintes pour l'initialisation des variables, d'où une motivation supplémentaire de cette étude pour l'utilisation d'une méthode déterministe pour la résolution des problèmes MINLP. Le choix s'est porté sur l'utilisation de l'environnement d'optimisation *GAMS* qui est présenté dans le chapitre suivant.

## Chapitre 3

# **METHODES D'OPTIMISATION EN VARIABLES MIXTES IMPLANTEES DANS LE LOGICIEL GAMS**





Ce chapitre présente en détail les méthodes d'optimisation utilisées. Les principales caractéristiques de l'environnement *GAMS* sont brièvement reprises, suivant la problématique de l'étude. Il s'articule autour de la description de deux techniques de Programmation Mathématique implémentées dans *GAMS* :

- Le solveur *DICOPT++* est une application de l'algorithme des Approximations Externes initié par Duran et Grossmann (1986), puis modifié plusieurs fois. L'idée directrice de la méthode sera exposée de manière à rendre compte du fonctionnement de l'algorithme. Les améliorations apportées pour surmonter certaines limitations, en particulier celles rencontrés dans l'algorithme AE/ER décrit dans le chapitre précédent, sont également mentionnées.
- Le solveur *SBB* met en oeuvre un algorithme Branch & Bound de forme classique mais adapté à la résolution de problèmes mixtes non linéaires. De même que pour *DICOPT++*, l'algorithme et ses points-clé seront explicités ainsi que certaines options de mise en oeuvre.

Le mode opératoire de *DICOPT++* repose sur des modules de résolution de problèmes continus non-linéaires (NLP) et linéaires en variables mixtes (MILP), respectivement *CONOPT3* et *CPLEX*. Le code *SBB* utilise uniquement le module *CONOPT3* pour la résolution des problèmes NLP.

## **1. PRESENTATION DE GAMS**

### **1.1. DEVELOPPEMENT DES OUTILS DE CALCULS INFORMATIQUES**

Les années 1950 ont vu un développement rapide d'algorithmes et de codes de calculs informatiques pour l'analyse et la résolution de problèmes de programmation mathématique avancés. L'effort le plus important était consacré au développement de modèles qui impliquaient la préparation des données et leurs transformations. Donc, chaque modèle demandait un grand nombre d'heures d'analyse et de programmation afin d'écrire le programme qui transformerait les données en une forme requise par l'optimiseur rendant difficile la détection et l'élimination des erreurs, car les programmes mis en place n'étant accessibles qu'aux seuls spécialistes. Afin de pallier ces difficultés, depuis les années 1980, une part importante de développement de logiciels s'est concrétisée par l'apparition d'outils de modélisation commerciaux, et parmi eux : *GAMS* -General Algebraic Modeling System-(Brooke et al 1998) ou *AMPL* (Fourer et al, 1992).

Le choix du traitement des problèmes MINLP à partir du logiciel *GAMS* est principalement motivé par l'ensemble des résultats obtenus sur des exemples de procédés industriels, en particulier ceux appliqués au sein de l'équipe de recherche, à savoir les travaux de conception de procédés (Ponsich, 2005) et d'optimisation de réseaux de transport de gaz (Tabkhi, 2006).

## **1.2. PRESENTATION DU LOGICIEL GAMS**

Initialement développé par un groupe d'économistes de la Banque Mondiale suite à la complexité des problèmes de modélisation économique, *GAMS* dispose d'un langage d'entrée qui permet d'écrire des modèles avec une formulation algébrique concise et facilement lisible. *GAMS* est capable de résoudre des problèmes aussi volumineux que complexes ; Il peut être utilisé pour traiter une grande variété de problèmes (NLP, MIP, MINLP, ..., etc). La simplicité du formalisme *GAMS* est un avantage pour la description des problèmes. La particularité de cet environnement d'optimisation réside aussi dans le fait qu'il permet une description des modèles indépendante des algorithmes de résolution, c'est-à-dire, que si le choix d'un changement au niveau de la méthode de résolution est effectué, aucune modification particulière de la formulation n'est nécessaire.

La conception de *GAMS* prend en considération des concepts issus des techniques de manipulation des données théoriques et de la programmation mathématique. La fusion des deux approches permet la mise en place d'une stratégie globale facilitant la formulation du problème pour l'utilisateur. Les principes généraux utilisés pour la définition du système *GAMS* sont les suivants:

- La syntaxe proposée à l'utilisateur pour définir un problème est générique, c'est-à-dire indépendante des méthodes de résolution. Cette syntaxe s'applique à tout type de problème, linéaire, non linéaire, mixte linéaire et mixte non linéaire.
- La description du problème d'optimisation est indépendante des données nécessaires. Cette description est effectuée par un ensemble de relations algébriques et de déclarations de types, l'introduction des données se faisant par des affectations, comme dans tous les langages évolués de programmation.
- L'allocation des ressources est effectuée automatiquement suivant la complexité du problème. L'utilisateur n'aura pas à se soucier de certains détails comme les tailles allouées et la conservation de mémoire.

Enfin, *GAMS* se base sur un système de ‘fichier orienté’, il n’existe pas d’éditeur spécial. L’architecture de *GAMS* est ouverte, ce qui veut dire que chaque utilisateur a le moyen d’utiliser un éditeur de commandes particulier. L’interface utilisateur facilite son intégration avec d’autres environnements de programmation.

Dans le cas de traitement de problèmes MINLP, on peut répartir l’ensemble des étapes du traitement du problème par *GAMS* en trois niveaux :

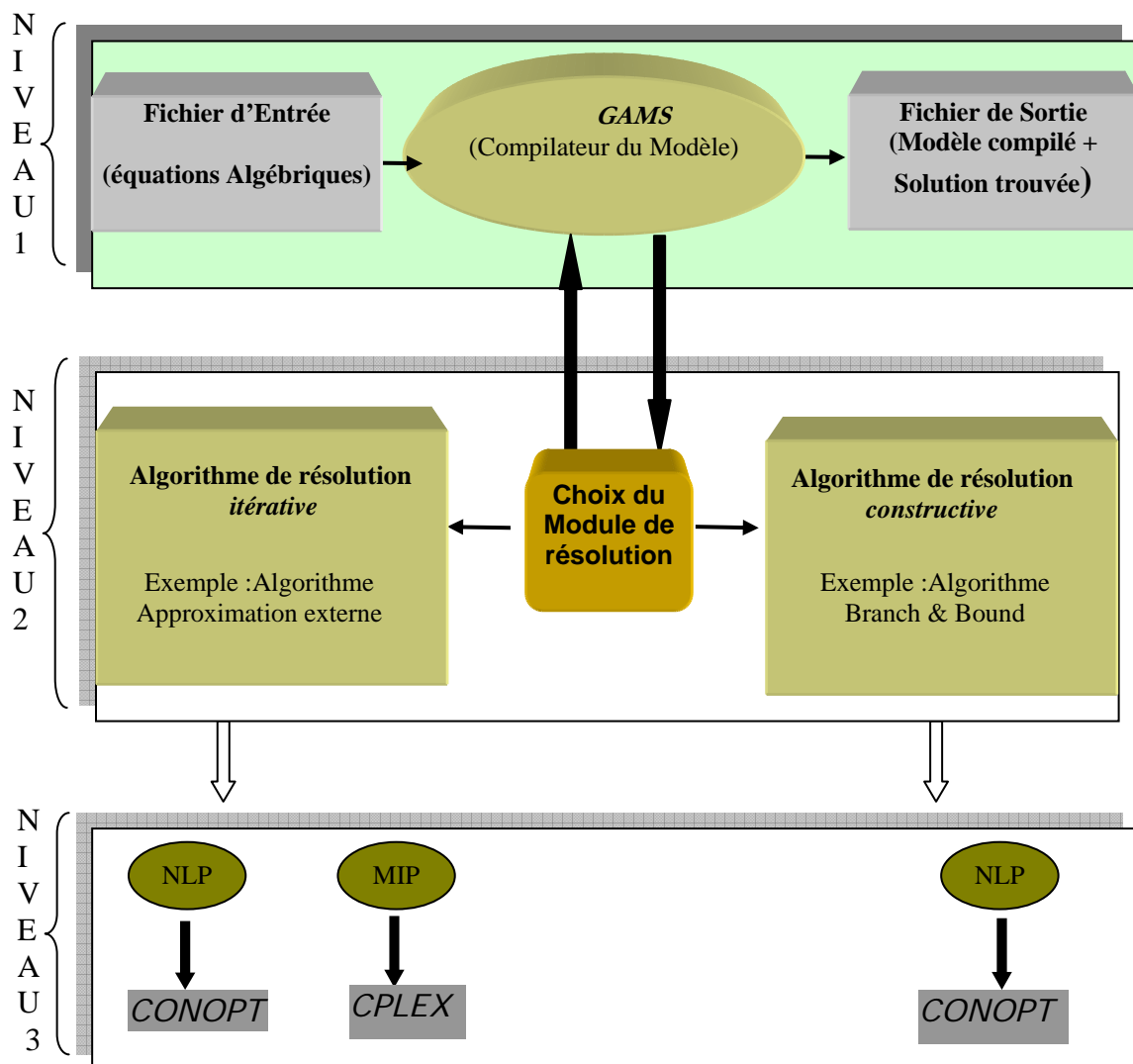


Figure 3-1. Structure de l'environnement GAMS pour la résolution d'un problème MINLP.

Les deux logiciels choisis dans cette étude, *SBB* et *DICOPT++* (*GAMS*, 2004), permettent de résoudre le problème de l'identification de modèles sans effectuer ni simplification ni approximation, mais en s'affranchissant partiellement ou totalement de

l'initialisation des variables. Lors de l'étude de Ponsich (2005), relative à une investigation et une discrimination des procédures d'optimisation en génie des procédés, il est ressorti que les logiciels *SBB* et *DICOPT++* permettaient de traiter efficacement des problèmes de conception de procédés.

## **2. PROGRAMMATION MATHÉMATIQUE UTILISÉES**

Les techniques de Programmation Mathématique utilisées sont implémentées dans des solveurs intégrés au sein de l'environnement de modélisation commercial *GAMS*. Par conséquent, l'accès au code des algorithmes et leur modification sont impossibles. Mais étant donné que les algorithmes mis en œuvre ont été développés par des organismes indépendants (Université de Carnegie Mellon, pour *DICOPT++* et ARKI Consulting & Development pour *SBB*), ils ont fait l'objet de publications scientifiques. Leurs principes généraux sont donc aisément disponibles et sont rappelés ci-après.

### **2.1. TENDANCES COMMUNES**

Les deux méthodes de Programmation Mathématique (MP) choisies sont basées sur des hypothèses, des modes d'opération et des philosophies différents. Les deux algorithmes de résolution de problèmes de type MINLP ont des caractéristiques communes, dont les principales sont la formulation du modèle, la décomposition du problème et, enfin, des tendances en termes de résolution.

Tout d'abord, concernant la formulation du problème, l'environnement *GAMS* offre un langage de modélisation convivial et relativement aisé à assimiler. Il est basé sur la création d'ensembles sur lesquels sont définies les variables. Si les équations s'écrivent pratiquement de façon naturelle, une attention toute particulière doit être accordée à la formulation du modèle, car les équations sont prises en compte par le solveur comme des contraintes. Il en résulte qu'une formulation bien ou peu adaptée aidera ou pénalisera la convergence. Par exemple, les contraintes de type égalité sont explicitement plus sévères que les contraintes inégalité et il est judicieux de tenter de remplacer les premières par les secondes chaque fois que cela est possible. Ainsi, un effort doit être apporté à la formulation du problème de manière à faciliter ensuite la mise en œuvre du module de résolution. De nombreuses techniques, telles que celle du *Grand M*, l'introduction de

variables d'écart, la formulation préférentielle par inégalités,... sont utilisées dans cette optique. A titre d'exemple, par rapport à ces techniques, la formulation *Grand M* pour une fonction non linéaire convexe  $h(x)$  fortement assujettie à l'existence d'une unité ou un module représenté par la variable binaire  $y$  et où  $x$  représente une variable continue bornée entre  $x^L$  et  $x^U$ , peut être écrite par :

$$\left. \begin{array}{l} h(x) \leq M (y) \\ \text{où} \\ M = \text{Max} \{h(x) / x^L \leq x \leq x^U \} \end{array} \right\} \text{Formulation Grand M}$$

Par ailleurs, quel que soit le mode d'opération de la méthode, il est basé sur la décomposition du problème. En effet, s'il est vrai que les deux obstacles que sont le traitement de variables mixtes et celui de fonctions non-linéaires peuvent être surmontés assez facilement séparément, leur prise en compte simultanée devient très complexe. Le fonctionnement des algorithmes MINLP passe ainsi toujours par la décomposition en un sous-problème continu NLP, séparé du traitement des variables entières. Cette dernière partie est alors traitée au moyen d'algorithmes spécifiques de résolution MILP. Cette approche peut être perçue comme un découplage des difficultés.

Enfin, des tendances propres à la résolution sont communes à toutes les méthodes mathématiques. Tout d'abord, la vérification de propriétés théoriques telles que différentiabilité et continuité sont nécessaires pour leur mise en oeuvre. Par ailleurs, une convergence efficace est conditionnée par la convexité des fonctions. En programmation non linéaire (mixte ou non), cette dernière propriété est très importante dans la mesure où, si elle n'est pas vérifiée, elle fausse la garantie de l'optimalité de la solution trouvée. En revanche, si toutes les fonctions mises en jeu dans le modèle sont convexes, l'optimum est garanti. Il devient un optimum global, si le problème est convexe au sens mathématique du terme.

## 2.2. *DICOPT++*

Le solveur *DICOPT++* (version de 1990) repose sur l'algorithme dit AE/ER/PA (Approximations Externes/ égalité Relaxation / Pénalité Augmentée) développé par Viswanathan et Grossmann (1990). Il n'est que la forme finale de l'algorithme dit des Approximations Externes.

La méthode décrivant l'algorithme implémenté dans *DICOPT++* comporte de grande similitude avec l'algorithme de base présenté dans le chapitre 2, au paragraphe 2.1 où la méthode AE/ER est décrite. L'organigramme des deux l'algorithmes, initial et *DICOPT++*, comportent certaines différences aux niveaux des étapes de résolution.

On s'attachera, ici, à exposer les améliorations successives de l'algorithme AE (Duran et Grossmann, 1986) ayant conduit à la version finale AE/ER/PA utilisée par le solveur. La description de l'algorithme implémenté se terminera par la présentation du test d'arrêt.

### 2.2.1. Principe des Approximations Externes

La méthode des Approximations Externes est une méthode dite à chemin irréalizable, dans la mesure où l'optimum est approché par l'extérieur de l'espace faisable. D'un point de vue conceptuel, elle repose sur l'hypothèse que l'espace faisable des solutions d'un problème d'optimisation peut être représenté comme une suite infinie d'ensembles. Dans le cas où cet ensemble des solutions faisables est convexe, il peut être défini comme l'intersection de demi-espaces. Ces demi-espaces reposent sur les hyperplans constitués par les linéarisations des contraintes en des points particuliers. Si ce nombre de points tend vers l'infini, l'espace faisable est décrit complètement. Ceci est illustré par la figure 3-2 pour un problème à deux variables, où les contraintes  $g_j$  délimitent l'espace faisable  $F$ . Leur linéarisation aux points  $x^i$  sont les hyperplans  $H_i$  (réduits ici à des droites) et représentent bien une approximation externe de  $F$ .

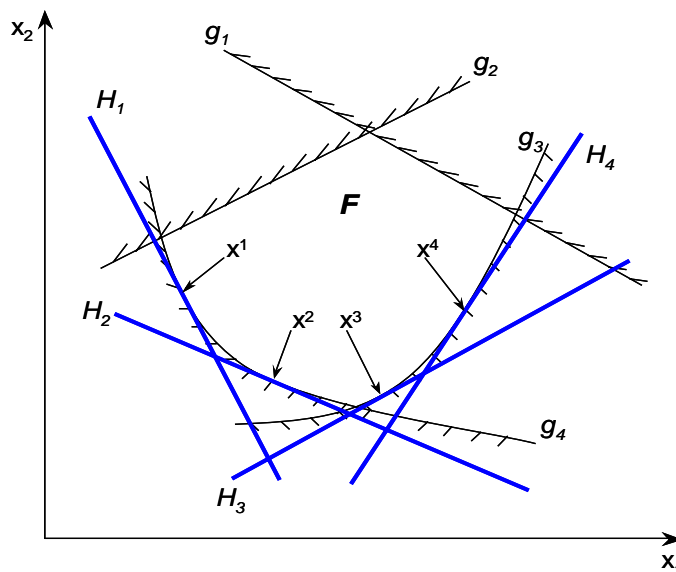


Figure 3-2. Approximations externes d'un ensemble convexe.

L'idée de base de la méthode des Approximations Externes repose sur l'hypothèse que la fonction objectif et les contraintes impliquant des variables continues sont des fonctions convexes. Par ailleurs, le problème étudié doit respecter le fait que les variables entières ne peuvent être impliquées que dans des fonctions linéaires. Cependant, si une variable entière  $y$  apparaît dans un terme non linéaire, il est parfois possible de la remplacer par une variable continue  $x$  et d'ajouter la contrainte, linéaire,  $y = x$ . La forme générale du problème d'optimisation  $[P]$ , de type MINLP, est donnée par la relation (2-1).

La méthode des approximations externes est appliquée au problème  $[P]$ , uniquement à l'espace faisable défini par les variables continues. Cette transformation concerne les contraintes et la fonction objectif, et équivaut compte tenu de l'hypothèse de convexité, à une *sur-estimation* de la région faisable et une *sous-estimation* linéaire de  $f$  (Floudas, 1995). On obtient donc le problème  $[P1]$  suivant, équivalent à  $[P]$  :

$$\begin{aligned}
 & \text{Min } Z = c^T y + \mu \\
 \text{soumis à} \quad & f(x^i) + \nabla f(x^i) \cdot (x - x^i) - \mu \leq 0, \quad \forall x^i \in X \\
 & g(x^i) + \nabla g(x^i) \cdot (x - x^i) + B y \leq 0, \quad \forall x^i \in X \\
 & x \in X \subseteq \mathcal{R}^n \\
 & y \in Y \subseteq \mathcal{N}^m \\
 & f_L \leq \mu \leq f_U
 \end{aligned} \tag{3-1}$$

$[P1]$

$f_L$  et  $f_U$  sont les solutions respectives des problèmes continus non contraints  $\{\text{Min } f(x), x \in X\}$  et  $\{\text{Max } f(x), x \in X\}$ . Il est important de noter que  $[P1]$  est un problème de type MILP.

En revanche,  $[P1]$  représente une infinité de sous-problèmes, puisqu'il est équivalent à  $[P]$  si et seulement si,  $x^i$  décrit tout son espace de définition  $X$ . Mais Duran et Grossmann (1986) prouvent que la projection de  $[P]$  sur l'espace des variables discrètes est équivalente à  $[P]$ , ce qui entraîne que le nombre de sous-problèmes mis en jeu dans  $[P1]$  est fini et égal à la combinatoire rapportée aux variables discrètes.

Ils montrent également que pour chaque variable entière  $y^i$  considéré, le point  $x^i$  sur lequel la linéarisation doit être effectuée est la solution optimale du sous-problème continu non linéaire suivant, paramétré par  $y^i$ , et donné par les relations (2-2)

Le problème maître [P1] ne doit donc être résolu que pour un nombre fini de linéarisations, qui peut cependant être très important. Pour contourner la difficulté due au fait qu'il faudrait déterminer par anticipation les approximations externes correspondant à chaque valeur possible de  $y$ , ce problème est relaxé en ne prenant en compte que les linéarisations déjà calculées lors des itérations précédentes.

Finalement, le problème maître de type MILP à l'itération  $k$  est alors le problème suivant :

$$\begin{aligned}
 & \text{Min } Z = c^T y + \mu \\
 \text{soumis à } & f(x^i) + \nabla f(x^i).(x - x^i) - \mu \leq 0, \quad \forall i = 1, \dots, k \\
 & g(x^i) + \nabla g(x^i).(x - x^i) + B y \leq 0, \quad \forall i = 1, \dots, k \\
 & x \in X \subseteq \mathcal{R}^n \\
 & y \in Y \subseteq \mathcal{N}^m \\
 & f_L \leq \mu \leq f_U
 \end{aligned} \tag{3-2}$$

[M<sup>k</sup>]

Duran et Grossmann (1986) rapportent le théorème suivant :

«  $(x^*, y^*)$  est la solution optimale de [P] si et seulement si  $(x^*, y^*)$  est optimale pour le problème maître [M<sup>k</sup>], avec  $\mu^* = f(x^*)$  ».

Ceci signifie que la solution optimale de [P] est  $(x^k, y^k)$ , où  $y^k$  est la solution de [M<sup>k</sup>] à l'itération  $k$  et  $x^k$  la solution du sous-problème [S( $y^k$ )] correspondant. Il a été montré que, sous les hypothèses de convexité énoncées plus haut, ce nombre d'itérations  $k$  est fini.

Les grandes lignes du fonctionnement de l'algorithme découlent logiquement des propriétés mentionnées ci-dessus : elles consistent en une suite de séquences composées d'un problème de type NLP et d'un problème de type MILP, résolus à tour de rôle. Cependant, de par la sévérité des hypothèses formulées, l'algorithme AE se heurte à des difficultés de résolution l'empêchant de garantir l'obtention de l'optimum global dans de nombreux cas d'où les améliorations dont il a fait l'objet au cours de développements ultérieurs.



### 2.2.2. Evolution de l'algorithme initial

En première analyse, trois types d'inconvénients majeurs gênent la résolution d'un problème MINLP par l'algorithme des Approximations Externes tel qu'il a été défini précédemment. Le premier provient de la non-linéarité des sous-problèmes  $[S(y^i)]$ , qui peuvent se révéler donc infaisables.

Les deux autres, sont dus aux hypothèses émises dans l'établissement de la première version de l'algorithme de Duran et Grossmann (1986), et sont corrigés dans les versions suivantes : elles concernent, d'une part, la gestion de contraintes égalité impliquant des termes non-linéaires, et d'autre part, le traitement de problèmes non-convexes.

#### 2.2.2.1. Sous-problèmes infaisables

Soit le problème  $[M^k]$ , relaxation du problème maître initial à l'itération  $k$ , il est possible que le sous-problème continu qui lui est associé  $[S(y^k)]$  soit infaisable. Mais une pseudo-solution  $x^k$  au sous-problème  $[S(y^k)]$  peut néanmoins être obtenue en résolvant le problème continu non linéaire suivant :

$$\begin{aligned} & \text{Min } \sum_j a_j && (3-3) \\ \text{soumis à } & g(x) + By^k \leq a \\ & a \geq 0 && [NLP-FEAS] \end{aligned}$$

On peut donc calculer les approximations externes associées à cette solution :

$$f(x^k) + \nabla f(x^k).(x - x^k) - \mu \leq 0 \quad g(x^k) + \nabla g(x^k).(x - x^k) + By \leq 0 \quad (3-4)$$

Ces approximations sont tout de même valides pour éliminer une région de l'espace infaisable et il est possible de les ajouter à l'ensemble des linéarisations définissant le problème maître. Par contre, il est également nécessaire de mettre en œuvre une procédure 'integer cut' pour s'assurer que la variable entière  $y^k$  soit effectivement supprimée de l'ensemble faisable et ne pourra plus constituer une solution acceptable.

**2.2.2.2. Contraintes égalité non linéaires**

Compte tenu de la formulation de la méthode des approximations externes, il est clair qu'il est impossible de traiter le cas de contraintes égalité non linéaires. La correction de ce point a fait l'objet des travaux de Kocis et Grossmann (1987). Le nouveau problème s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}
 & \text{Min } Z = c^T y + f(x) \\
 \text{soumis à } & \quad h(x) + Ay = 0 \\
 & \quad g(x) + By \leq 0 \\
 & \quad x \in X \subseteq \mathcal{R}^n \\
 & \quad y \in Y \subseteq \mathcal{R}^m
 \end{aligned} \tag{3-5}$$

[P-ER]

Les hypothèses de convexité de  $f$  et  $g$  sont toujours admises, et en plus,  $h$  est supposée quasi-convexe, i.e.  $\forall (x, x') \in \mathcal{R}^n \times \mathcal{R}^n, \forall \lambda \in [0, 1], h[\lambda x + (1-\lambda)x'] \leq \max[h(x), h(x')]$ . En appliquant les conditions de Karush-Kuhn-Tucker au sous-problème NLP associé à une valeur  $y^k$ , on détermine les multiplicateurs de Lagrange  $\lambda_i$  (Floudas, 1995) et on peut construire une matrice diagonale  $T$  dont les éléments diagonaux  $t_{ii}$  sont tels que :

$$t_{ii} = \left\{ \begin{array}{ll} -I & \text{si } \lambda_i < 0 \\ +I & \text{si } \lambda_i > 0 \\ 0 & \text{si } \lambda_i = 0 \end{array} \right\} \tag{3-6}$$

Sous les hypothèses évoquées plus haut, Kocis et Grossmann (1988) montrent alors qu'il est possible de relaxer la contrainte égalité  $h(x) + Ay = 0$  en  $T[h(x) + Ay] \leq 0$ . Cette expression n'est rien d'autre qu'un nouvel ensemble d'inégalités non linéaires, traitées, on l'a vu, de manière efficace par l'algorithme des Approximations Externes initial. Le nouvel algorithme s'appelle alors l'algorithme des Approximations Externes / Relaxation des Egalités (AE/ER). Mais cette méthode reste fortement assujettie à des hypothèses de convexité ou quasi-convexité, qui sont peu fréquentes dans les formulations habituelles de problèmes d'optimisation réalistes en génie des procédés.

### 2.2.2.3. Traitement de fonctions non-convexes

Si les hypothèses de convexité sur lesquelles repose le mode d'opération de l'algorithme AE/ER ne sont pas vérifiées, ce dernier risque de se heurter à deux types de problèmes :

- le solveur NLP résolvant le sous-problème continu peut se trouver piégé dans un optimum local ;
- les linéarisations des contraintes pour la construction du problème maître MILP peuvent ne pas être valides. En effet, si l'espace faisable n'est pas convexe, l'approximation *a priori* externe peut en couper certaines parties et faire perdre l'optimum global. La figure 3-3 illustre ce comportement : la contrainte  $g_3$  est non-convexe sur  $X$  et la linéarisation  $H_2$  calculée en  $x^2$  empiète sur l'espace faisable  $F$ .

Kocis et Grossmann (1988 et 1989) ont développé une stratégie en deux phases pour pallier ces difficultés. Elle consiste à appliquer initialement l'algorithme AE/ER, puis, dans un deuxième temps, à effectuer des tests locaux et globaux pour tenter de détecter des non-convexités pouvant expliquer pourquoi certaines approximations externes ne sont pas valides. Les tests du premier type vérifient tout d'abord la convexité au voisinage des points  $x^k$  ( $k=1, \dots, K$  itérations) sur lesquels ont été effectuées les linéarisations des contraintes et de la fonction objectif : cela revient à s'assurer localement que les fonctions considérées sont bien au-dessus de leur linéarisation.

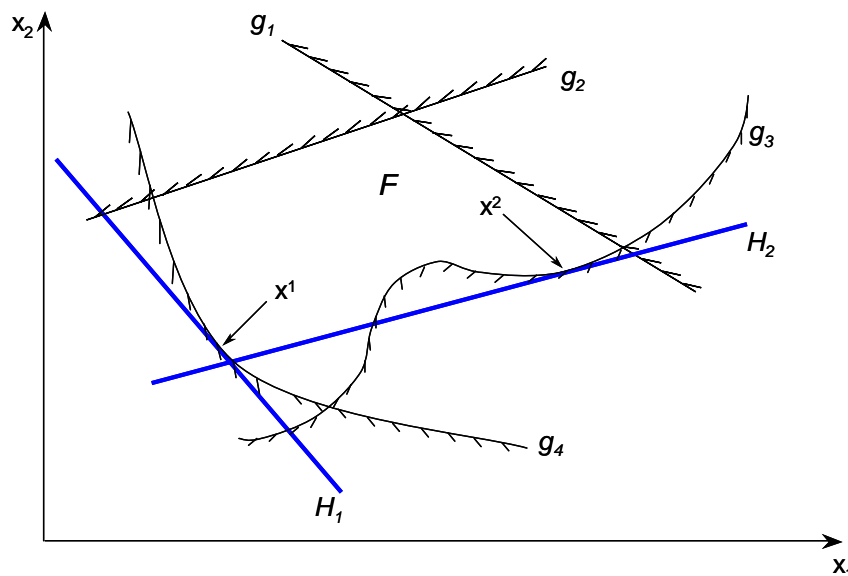


Figure 3-3. Approximations externes non valides.

Les tests globaux cherchent à déterminer, parmi les linéarisations ajoutées successivement au problème maître, celles qui coupent manifestement l'espace faisable. Les points  $x^k$  sur lesquels sont calculées les linéarisations sont des bornes supérieures du problème MINLP initial  $[P]$ . Cela signifie qu'ils appartiennent à l'espace faisable initial et respectent logiquement la relaxation linéaire des contraintes et de la fonction objectif si ces dernières sont bien externes. Par conséquent, il suffit de vérifier, pour chaque itération  $k \in \{1, \dots, K\}$ , que les approximations externes  $f^l_{LIN}$  et  $g^l_{LIN}$  calculées aux itérations  $l \neq k$  sont effectivement valides en  $x^k$ , ce qui s'écrit :

$$\forall (k,l) \in \{1, \dots, K\}^2, l \neq k, g(x^k) \geq g^l_{LIN}(x^k) \text{ et } f(x^k) \geq f^l_{LIN}(x^k) \quad (3-7)$$

Si l'un des tests est positif, un nouveau problème maître est formulé en modifiant les linéarisations ayant été identifiées comme non valides, puis l'algorithme est exécuté de nouveau. Cette méthode n'est pas implémentée dans *DICOPT++*. Mais, c'est la technique dite de la Pénalité Augmentée qui gère, avec plus de succès, les problèmes de non-convexité fréquemment rencontrés.

L'idée de Viswanathan et Grossmann (1990) est de permettre une certaine violation des contraintes lors de la recherche d'une nouvelle valeur de  $y$  par la résolution du problème MILP. La violation est permise par l'introduction de variables d'écart (*slack variables*)  $s^0$ ,  $p$  et  $q$ . Par ailleurs, un terme de pénalité est ajouté dans la fonction objectif du problème maître, représentant la violation de chaque contrainte. Cette violation est pondérée par des facteurs de pondération assez importants de manière à faire tendre prioritairement les variables d'écart  $s^0$ ,  $p$  et  $q$  vers zéro. Ainsi, ce mode de fonctionnement permet de retrouver les résultats du problème MILP initial lorsque la convexité est vérifiée. Le nouveau problème maître à l'itération  $k$  s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \text{Min } Z &= c^T y + \mu + w^0 s^0 + \sum_{jp} w_{jp} p_{jp} + \sum_{jq} w_{jq} q_{jq} \\ \text{soumis à } \quad & f(x^i) + \nabla f(x^i) \cdot (x - x^i) - \mu \leq s^0, \quad \forall i = 1, \dots, k \\ & T[h(x^i) + \nabla h(x^i) \cdot (x - x^i) + Ay] \leq p, \quad \forall i = 1, \dots, k \\ & g(x^i) + \nabla g(x^i) \cdot (x - x^i) + By \leq q, \quad \forall i = 1, \dots, k \\ & x \in X \subseteq \mathcal{R}^n \\ & y \in Y \subseteq \mathcal{N}^m \\ & s^0 \geq 0, p \geq 0, q \geq 0 \end{aligned} \quad (3-8)$$

$[M^k\text{-PA}]$

Cette méthode revient globalement à une extension de l'approximation de la région faisable, et réduit par conséquent les risques de couper une partie de la région faisable par des linéarisations non valides. La figure 3-4, reprenant l'exemple de la figure 3-3, met en évidence ce mode de fonctionnement : la linéarisation non valide  $H_2$  est repoussée pour devenir  $H_2'$  qui elle, par contre, réalise bien une approximation externe de  $F$ . La valeur  $\alpha$  représente la valeur de la variable d'écart  $q$ .

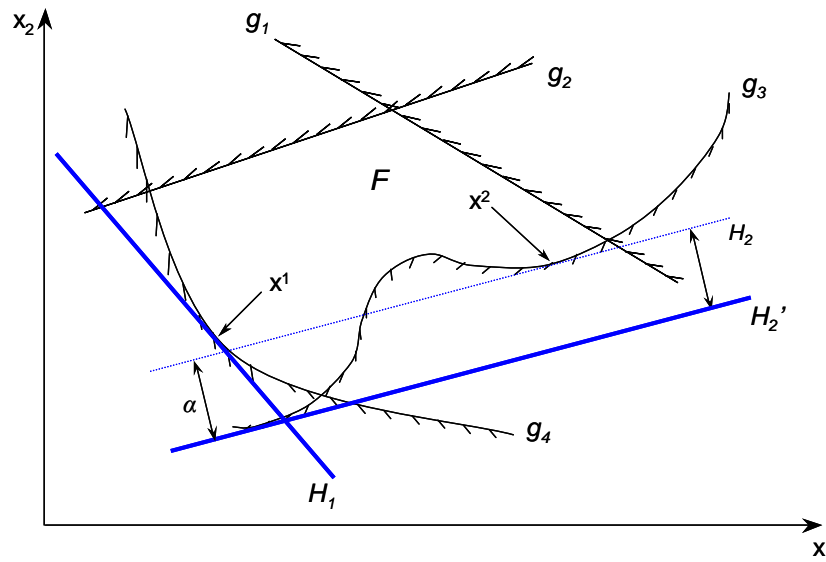


Figure 3-4. Approximations externes avec méthode de Pénalité Augmentée.

L'efficacité globale de la méthode proposée pour surmonter les difficultés posées par les non-convexités a été prouvée sur différents exemples-tests (Viswanathan et Grossmann, 1990). Malgré cela, l'algorithme ne peut pas toujours assurer l'obtention de l'optimum global. En effet, l'évidente faiblesse de la méthode de Pénalité Augmentée est le choix adéquat des valeurs initiales des variables d'écart  $s^0$ ,  $p$  et  $q$ . Si celui-ci est mal effectué, les relaxations linéaires des contraintes, même modifiées par la Pénalité Augmentée, peuvent amener à couper l'espace faisable et ainsi éventuellement perdre l'optimum global. Par ailleurs, si les sous-problèmes pour des variables entières fixées présentent plusieurs optima locaux, l'algorithme peut être piégé sur une solution locale. Les bornes calculées ne sont alors plus valides.

### 2.2.3. Algorithme AE/ER/PA

Comme cela a été explicité ci-avant, l'algorithme consiste à découpler le problème en un sous-problème de type NLP pour lequel les variables discrètes sont fixées et un problème maître MILP. Dans le cas du sous-problème continu, les valeurs des variables discrètes sont égales à celles de la solution optimale du problème maître précédemment traité. Sa résolution fournit une solution faisable, constituant une borne supérieure  $Z_U$ . Cette borne supérieure évolue de manière monotone décroissante (au sens large). Si le critère d'arrêt n'est pas vérifié, les contraintes sont alors linéarisées à la solution optimale du problème NLP. Le problème maître à l'itération  $k$  est donc défini par les linéarisations des contraintes construites à toutes les itérations  $i$  précédentes, i.e.  $i = 1, \dots, k$ . Puis le problème MILP est résolu. Dans cette phase, les valeurs d'initialisation des variables continues sont celles de la solution du NLP précédent. La solution du problème MILP est une borne inférieure  $Z_L$  et de nouvelles valeurs discrètes sont fournies pour paramétrer le sous-problème continu suivant. Puisqu'à chaque itération un nouvel ensemble de contraintes linéarisées est ajouté au problème maître, l'approximation linéaire de la région faisable s'améliore. La borne inférieure calculée croît ainsi de manière monotone avec le nombre d'itérations. Par ailleurs, des *integer cuts* sont imposés sur le jeu de variables discrètes de manière à éviter de retomber plusieurs fois sur le même au cours de la recherche.

Remarque : la résolution des problèmes NLP et MILP nécessite l'utilisation respective de solveurs, i.e. *CONOPT3* et *CPLEX* (Brooke et al., 1998), qui seront présentés plus loin. L'objectif ici est seulement de présenter en détail la méthode MINLP.

Concernant la première itération, l'algorithme débute en résolvant le problème MINLP relaxé (RMINLP). Celui-ci, défini comme étant la relaxation continue du problème initial, est donc de type NLP. Si une solution mixte  $(x^0, y^0)$  est trouvée (tous les  $y^0$  ont des valeurs entières) l'algorithme s'arrête, sinon il continue par la linéarisation des contraintes en  $x^0$  et la résolution du premier problème maître. Cette démarche présente l'avantage de ne pas nécessiter de valeurs d'initialisation pour les variables discrètes. En outre, l'expérience a montré que généralement, la solution du premier problème MILP fournit une bonne estimation des variables continues, et donc une première approximation externe du problème MINLP de bonne qualité.

La représentation finale de l'algorithme AE/ER/PA est donnée sur la figure 3-5.

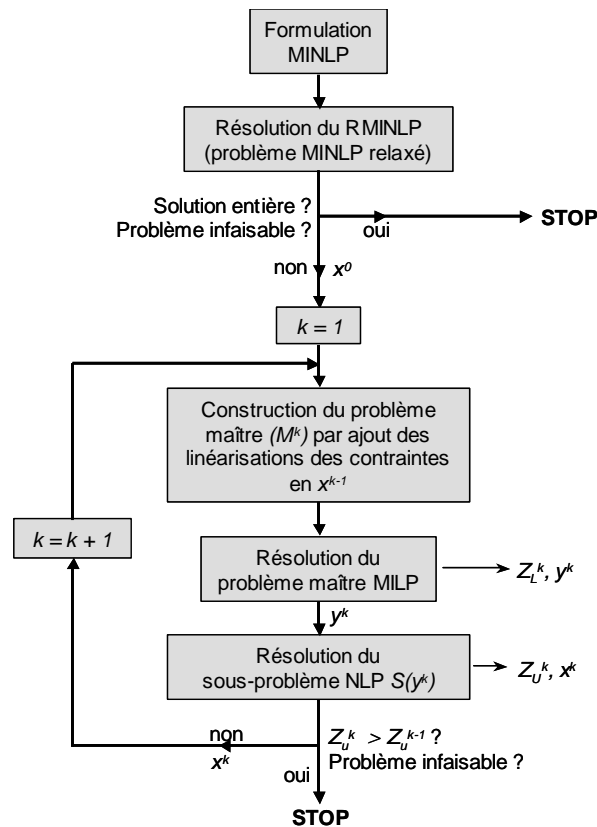


Figure 3-5. Organigramme de l'algorithme OA/ER/AP

#### 2.2.4. Critère d'arrêt

Duran et Grossmann (1986) tirent parti des propriétés des bornes calculées par le sous-problème continu et le problème maître discret, i.e. décroissance monotone de la borne supérieure  $Z_U$  et croissance monotone de la borne inférieure  $Z_L$  respectivement. Ils en déduisent que la convergence est atteinte lorsque ces deux bornes se rencontrent, au-delà d'une certaine précision, c'est-à-dire dès que  $|Z_L - Z_U| \leq \varepsilon$ .

Mais il a été montré qu'à cause des non-convexités, le problème MILP ne produira généralement pas des bornes inférieures valides. Le critère d'arrêt proposé par Viswanathan et Grossmann (1990) repose alors sur une heuristique fondée sur l'observation du comportement de l'algorithme sur des problèmes non-convexes et convexes, c'est-à-dire pour lesquels le critère de convergence théorique énoncé précédemment est applicable. Viswanathan et Grossmann (1990) remarquent en effet que la détérioration de la fonction objectif, i.e. de la borne supérieure, entre deux problèmes

NLP faisables consécutifs indique l'obtention de l'optimum global. Ainsi, le critère d'arrêt utilisé dans *DICOPT++* est :  $Z_U(y^k) > Z_U(y^{k-1})$ .

Le critère d'arrêt proposé dans Yuan (1988) repose sur le théorème affirmant que si une solution en variables entières  $y^k$  du problème maître discret est identique à une solution  $y^p$  rencontrée précédemment ( $1 \leq p < k$ ), alors la solution optimale du problème  $[P]$  est atteinte.

### **2.3. SBB**

Le module de résolution *SBB* (Simple Branch & Bound) est plus récent que *DICOPT++*, puisque sa première implémentation date d'octobre 2000. Son principe repose sur la combinaison d'un algorithme Branch & Bound classiquement utilisé pour la résolution de problèmes MILP et d'un solveur de type NLP.

Les principes généraux de l'algorithme seront explicités dans un premier temps. Les options offertes à l'utilisateur, permettant de jouer sur des paramètres guidant la recherche, seront ensuite présentées. Enfin, des éléments théoriques de comparaison entre *DICOPT++* et *SBB* seront rapidement développés.

#### *2.3.1. Description de l'algorithme*

L'idée directrice de l'algorithme de *SBB* est une reproduction du fonctionnement d'un algorithme Branch & Bound, habituellement dédié au traitement de problèmes de type MILP. La différence repose sur la résolution, à chaque sommet du Branch & Bound, d'un sous-problème continu non-linéaire au moyen d'un solveur NLP de *GAMS*.

##### **2.3.1.1. Algorithme Branch & Bound**

L'algorithme de Branch & Bound est une technique dite constructive dans la mesure où la solution est élaborée variable par variable, au fur et à mesure de l'avancée de la recherche. Son principe repose sur trois notions distinctes : séparation du problème principal, relaxation des sous-problèmes et troncature de l'arbre de recherche (Floudas, 1995).



- *Séparation :*

Considérons le problème  $[P]$  de type MILP dont l'espace faisable est noté  $FS[P]$ . L'ensemble de sous-problèmes  $[P_1], [P_2], \dots, [P_n]$  est une séparation de  $[P]$  si :

$$\bigcup_i FS(P_i) = FS(P) \text{ et } \forall i, j \text{ avec } i \neq j, FS(P_i) \cap FS(P_j) = \emptyset. \quad (3-9)$$

Ceci est le plus souvent réalisé en ajoutant des contraintes contradictoires sur des variables entières. Par exemple, pour une variable binaire  $y$  impliquée dans  $[P]$ , les sous-problèmes  $[P_1]$  et  $[P_2]$  sont respectivement définis par les contraintes supplémentaires  $y = 0$  et  $y = 1$ .

- *Relaxation*

La relaxation  $[RP]$  du problème  $[P]$  a un espace faisable contenant celui de  $[P]$ , ce qui implique que (i) si  $[RP]$  est infaisable, alors  $[P]$  l'est aussi ; (ii) la solution optimale de  $[RP]$  est une borne inférieure de la solution optimale de  $[P]$  ; (iii) une solution optimale de  $[RP]$  et faisable pour  $[P]$  est une solution optimale de  $[P]$ .

Le plus souvent la forme de relaxation considérée peut être : omettre une ou plusieurs contraintes du problème  $[P]$  ; ou générer des relaxations sur les variables entières, c'est à dire que la relaxation est effectuée en considérant la variable discrète comme une variable continue  $y$  par  $0 \leq y \leq 1$ . Ce type de relaxation est nommé Programmation linéaire relaxative. La relaxation de  $[P]$  est alors un problème de type Programmation linéaire.

- *Troncature*

Soit  $[P_k]$  un sous-problème de  $[P]$  susceptible de mener à la solution optimale de  $[P]$ .

Trois critères peuvent autoriser à tronquer  $[P_k]$  :

- la relaxation LP de  $[P_k]$  est infaisable ;
- la solution optimale de la relaxation de  $[P_k]$  est supérieure à la meilleure solution faisable trouvée antérieurement (borne supérieure) ;
- la solution optimale de la relaxation de  $[P_k]$  est faisable, donc optimale pour  $[P_k]$ . Si en plus elle est faisable pour  $[P]$  et inférieure à la borne supérieure, alors cette dernière peut être actualisée.

L'idée générale de l'algorithme de Branch & Bound est que chaque sommet représente un sous-problème MILP ayant des bornes propres sur les variables entières. Sa relaxation continue, si elle n'est pas infaisable, est résolue. Ceci fournit une borne inférieure du sous-problème, qui peut éventuellement être une borne inférieure du

problème initial. Si cette borne inférieure est plus grande que la meilleure solution faisable trouvée jusque là, le sommet est tronqué. Si la solution est faisable, i.e. respecte la contrainte d'intégralité pour le vecteur  $y$ , la borne supérieure de  $[P]$  est éventuellement actualisée. On obtient ainsi, au cours de la recherche, une borne inférieure croissante et une borne supérieure décroissante (au sens large dans les deux cas). Puis, une variable discrète pour laquelle la solution du sous-problème relaxé est non entière est choisie ou « séparée ». Les deux valeurs entières les plus proches de la solution réelle pour cette variable représentent alors de nouvelles bornes pour deux nouveaux sommets « enfants ». Ce fonctionnement est représenté sur la figure 3-6 où une variable entière  $y_k$  est séparée à partir du sommet racine pour former les sommets 1-1 et 1-2.

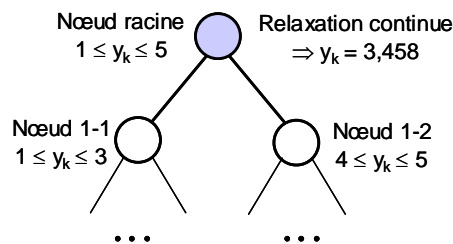


Figure 3-6. Exemple de séparation.

Les deux points-clé de l'implémentation de la méthode de Branch & Bound sont la sélection de la variable à séparer pour créer deux sommets enfants et du prochain sommet à résoudre. Il n'y a pas vraiment de méthode robuste et universelle pour répondre à la première de ces questions, c'est donc le plus souvent l'utilisateur qui établit une liste de priorités. Quelques alternatives existent cependant, comme la méthode des « pseudo-coûts » (disponible dans les options de *SBB*). En revanche, diverses techniques classiques sont utilisées pour le choix du prochain sommet à traiter : en profondeur d'abord, en largeur d'abord, etc... Certaines d'entre elles sont décrites dans la partie 2.3.2, traitant des options de *SBB*. Il n'existe cependant pas, parmi ces différentes stratégies de choix du sommet suivant, de méthode universelle. Un compromis est à faire pour profiter des avantages respectifs de chacune d'entre elles.

### 2.3.1.2. Algorithme de *SBB*

La méthode *SBB* fonctionne comme un algorithme Branch & Bound classique, à la différence que les problèmes relaxés à chaque sommet sont de type NLP. Leur résolution s'effectue au moyen d'un solveur NLP, *CONOPT3* dans le cas de cette étude. Le point négatif réside toujours dans le traitement de fonctions non-convexes. En effet, celles-ci peuvent, au niveau de la résolution du problème continu NLP, amener le module à rester

bloqué sur un optimum local. Par conséquent, la borne inférieure fournie n'est pas valide et une branche de l'arbre de recherche peut ainsi être tronquée par erreur, faisant perdre l'optimum global.

De la même manière que *DICOPT++*, *SBB* commence par résoudre la relaxation continue du problème initial (ou sommet racine). Si elle est infaisable, *SBB* s'arrête. Si toutes les variables discrètes prennent des valeurs entières, *SBB* retourne le résultat trouvé comme étant la solution optimale. Dans les autres cas, la mise en œuvre de la procédure arborescente est amorcée.

Pour chaque traitement de la relaxation continue d'un sommet, les sommets enfants sont placés dans une liste de sommets à traiter. Cette liste est actualisée à chaque itération. C'est le cas, par exemple, lorsqu'une nouvelle borne supérieure est générée : les sommets de la liste présentant une borne inférieure plus grande que cette nouvelle valeur sont éliminés. L'algorithme s'arrête alors lorsque la liste de sommets est vide. La représentation schématique de l'algorithme mis en œuvre dans *SBB* apparaît sur la figure 3-7.

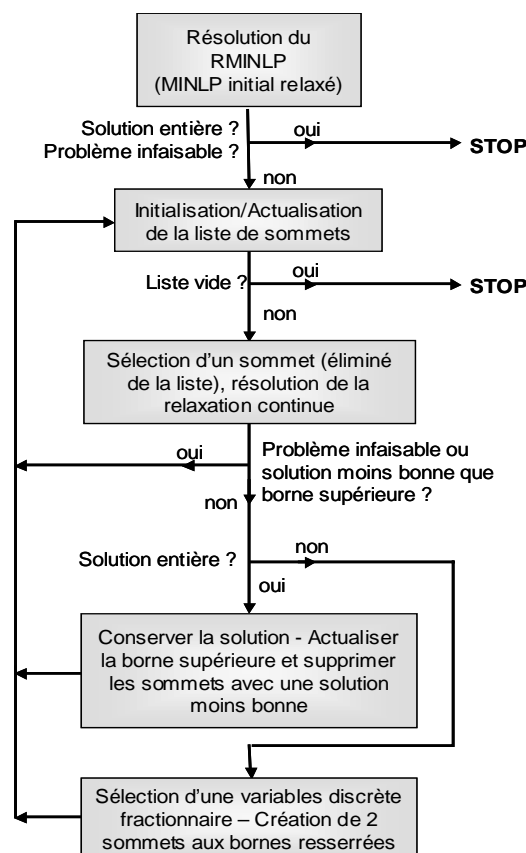


Figure 3-7. Organigramme de l'algorithme SBB.

### 2.3.2. Options

Les deux points clés évoqués pour l'implémentation d'un algorithme Branch & Bound classique, i.e. le choix de la variable à séparer et du prochain sommet à résoudre, valent aussi pour *SBB*. Concernant le choix de la prochaine variable à séparer, *SBB* propose comme stratégie, la méthode des « pseudo-coûts ». Elle consiste globalement à calculer, à un sommet donné, l'effet sur la fonction objectif si l'on modifie une variable discrète ayant une valeur réelle vers l'entier le plus proche. Cette démarche revient à affecter un pseudo-coût à l'infaisabilité (par rapport à la contrainte d'intégralité) due à chaque variable discrète. La variable à séparer est alors celle qui maximise ce coût, i.e. celle qui entraîne une augmentation plus importante de la borne inférieure : la convergence sera alors d'autant plus rapide.

Cette technique peut également être appliquée pour le choix du sommet suivant à calculer. En effet, il est possible de calculer le pseudo-coût d'un sommet comme la somme des pseudo-coûts de toutes les variables discrètes à valeurs réelles qui ne sont pas encore séparées. La valeur calculée équivaut à un « prix » de l'infaisabilité de la solution du problème relaxé, permettant de diriger le choix vers la branche la plus prometteuse. Cependant, cette stratégie est très lourde à cause du temps nécessaire au calcul du pseudo-coût (Brooke et al., 1998).

D'autres techniques plus classiques sont utilisées pour le choix du prochain sommet à traiter, et tout d'abord la recherche en profondeur, qui considère prioritairement les sommets enfants du sommet qui vient d'être traité. Si le sommet courant est tronqué, on remonte dans l'arborescence jusqu'à trouver un sommet qui n'a pas encore été traité (*backtracking*). L'avantage de cette méthode est la similarité des problèmes NLP successivement calculés, qui diffèrent seulement par les bornes sur les variables. En outre, les solutions faisables sont souvent situées profondément dans l'arborescence. Par contre, cette technique implique généralement le calcul d'un nombre important de sous-problèmes pour pouvoir prouver l'optimalité d'un résultat. Une deuxième méthode classique de choix du sommet consiste à traiter préférentiellement le sommet ayant fourni la borne inférieure la plus petite (il apparaît que c'est souvent celle qui conduit à une convergence plus efficace). Il en résulte un traitement d'un nombre moins élevé de sous-problèmes.

Il n'existe pas, parmi ces différentes stratégies proposées par *SBB*, de meilleure méthode. Un compromis est à faire pour profiter des avantages respectifs de chacune d'entre elles. *SBB* propose donc également des méthodes intermédiaires, mixant les différentes techniques citées.

### *2.3.3. Eléments de comparaison théoriques entre *DICOPT++* et *SBB**

Au vu des développements précédents, il est clair que *DICOPT++* et *SBB* ont des modes d'opération radicalement différents. Leur philosophie respective laisse en conséquence prévoir des comportements et performances différents sur un même problème (Brooke et al., 1998).

*DICOPT++* est basé sur l'hypothèse que, dans la décomposition NLP/MILP, le goulet d'étranglement est constitué par les sous-problèmes NLP, un nombre trop important de problèmes infaisables pouvant même empêcher la convergence. L'idéal serait alors la résolution d'un nombre réduit de problèmes continus. A l'opposé, les MILP sont généralement résolus plus facilement au moyen de stratégies linéaires simples. Mais, il peut arriver que la linéarisation des contraintes génère des problèmes maîtres mal conçus, dont la solution constitue une mauvaise initialisation pour des NLP difficiles à résoudre, voire infaisables.

Au contraire, pour *SBB* la plus grande partie du temps de calcul consiste à résoudre des NLP. Mais, faisant l'hypothèse que les NLP ne diffèrent les uns des autres que par quelques bornes, ceux-ci peuvent être traités grâce à une procédure de redémarrage efficace, en utilisant les valeurs optimales du NLP précédent comme initialisation.

Finalement, il semblerait logique, au vu de ces considérations, que *DICOPT++* soit plus performant sur des problèmes présentant un aspect combinatoire important, tandis que *SBB* sera plus efficace pour des problèmes impliquant moins de variables discrètes, mais des termes plus sévèrement non-linéaires.

## 2.4. SOLVEURS COMPLEMENTAIRES

Comme cela a été mis en évidence par le mode de fonctionnement des deux algorithmes explicités ci-dessus, les solveurs *DICOPT++* et *SBB* se situent à un niveau supérieur de la résolution : leur tâche est essentiellement d'analyser le modèle formulé pour créer des problèmes simplifiés, relaxés, aménagés, donc de moindre difficulté. Puis, la gestion des résultats leur permet de construire sur un schéma itératif, de nouveaux problèmes jusqu'à ce que les conditions assurant la convergence soient remplies.

Ainsi, à un niveau inférieur se situent les solveurs effectuant l'essentiel du travail numérique. Ils sont appelés une fois par le module MINLP à chaque itération « majeure » de l'algorithme. Vu leur fonctionnement respectif, *DICOPT++* nécessite un module de résolution de type NLP et un module de type MILP, tandis que *SBB* fait simplement appel à un module NLP.

La figure 3-8 illustre l'architecture du jeu de solveurs utilisés dans chaque cas. Ce sont les solveurs *CONOPT3* et *CPLEX* intégré à la bibliothèque de routines de *GAMS*. Ils sont décrits dans ce qui suit.

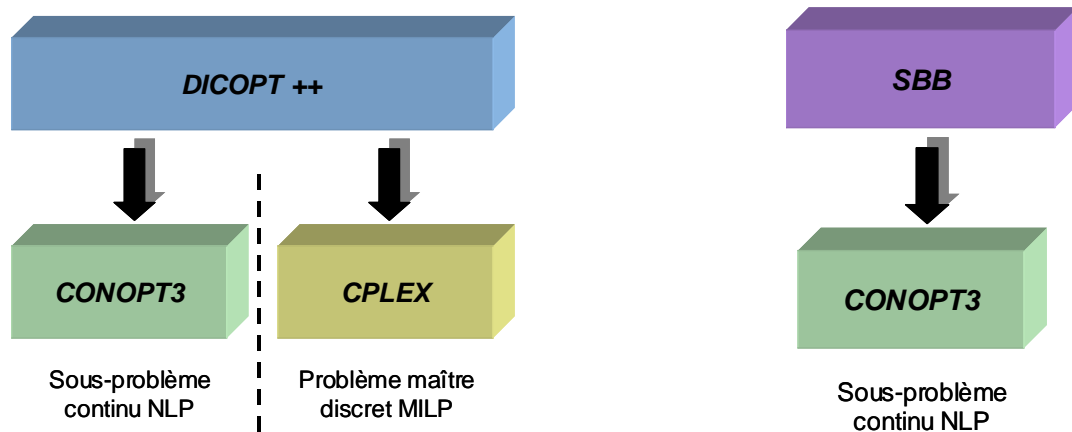


Figure 3-8. Hiérarchie des solveurs utilisés.

### 2.4.1. CONOPT3

Il existe une variété assez large de méthodes numériques pour la résolution de problèmes d'optimisation continue non-linéaire et sous contraintes. D'après Floudas (1995), les principales sont les méthodes de pénalité (extérieure ou intérieure), la méthode du gradient projetée proposée par Rosen (1960), la technique du gradient réduit généralisé (GRG) due à Abadie et al. (1969) et enfin, les techniques de programmation séquentielle linéaire (SLP) ou quadratique (SQP). La technique du GRG est implémentée dans le solveur *CONOPT3*, développé (comme *SBB*) par la société ARKI Consulting & Development. Elle a été jusqu'à récemment considérée comme l'une des plus performantes pour traiter le cas général où la fonction objectif comme les contraintes sont non-linéaires, bien que les techniques SQP soient actuellement très réputées pour leur efficacité. Il est nécessaire de rappeler que seul un optimum local peut être déterminé par ces méthodes, l'optimum global n'étant assuré que dans des conditions de convexité bien particulières.

La méthode du GRG repose sur une extrapolation de la méthode du gradient réduit, développée initialement pour des problèmes à contraintes linéaires, et adaptée pour la résolution de problèmes non-linéaires. La forme classique du problème résolu est :

$$\begin{aligned} \text{Min } f(x) & \qquad \qquad \qquad (3-10) \\ \text{soumis à } \quad Ax = b \\ x \in X \subseteq \mathcal{R}^n & \qquad \qquad \qquad [P-LP] \end{aligned}$$

Pour des problèmes à contraintes linéaires inégalité, il est possible de se ramener à la formulation précédente en introduisant une variable d'écart pour chaque inégalité. L'idée principale est alors de réduire la taille du problème en déterminant un sous-ensemble de variables indépendantes (dites hors base) à partir desquelles les autres variables du problème (basiques) peuvent être exprimées. Puis, le gradient réduit de la fonction objectif  $f$  est calculé seulement par rapport aux variables hors base. L'opposé du gradient réduit fournit une direction de recherche ; une technique de pas de descente optimal est en général adoptée pour déterminer le nouveau vecteur solution à l'itération suivante. Les gradients réduits suivants sont calculés relativement à la même base tant qu'aucune des variables n'atteint ses bornes. Lorsque cela arrive, si c'est une variable hors base, la phase précédente peut continuer. Si c'est une variable basique, alors un changement de base valide est nécessaire pour continuer la recherche. Les opérations sont répétées tant que le gradient réduit est non nul ; il est démontré que ce critère est bien équivalent aux conditions d'optimalité de Kuhn-Tucker.

La méthode explicitée ci-dessus est étendue à des problèmes à contraintes non linéaires en résolvant une séquence de problèmes, chacun d'entre eux constituant une itération majeure. A chaque itération majeure, un nouveau problème est construit en linéarisant les contraintes à la solution de l'itération majeure précédente et en pénalisant la fonction objectif. Ce problème est résolu au moyen de la méthode du gradient réduit, en un certain nombre d'itérations mineures. La séquence s'arrête lorsque les conditions de Kuhn-Tucker sont remplies, et les contraintes non linéaires vérifiées.

Il est à noter que si la méthode du gradient réduit est à chemin réalisable, la méthode du GRG classique est pour sa part à chemin irréalisable. Cependant, l'algorithme implémenté dans *CONOPT3* est particulier dans le sens où la faisabilité est maintenue au cours de la recherche. Les détails de l'algorithme implémenté dans *CONOPT3* sont disponibles dans Drud (1985), bien que de nombreuses modifications aient été apportées depuis lors pour en améliorer les performances.

En effet, *CONOPT3* se compose tout d'abord d'une partie de pré-traitement du modèle, visant à une réduction préliminaire de la dimension du problème. Ce mécanisme est réalisé en identifiant les contraintes où intervient une seule variable. La variable et la contrainte sont alors supprimées par des techniques de substitution, ce qui a par ailleurs un effet de propagation en créant de nouvelles contraintes monovariées (effet triangulaire). Ce cas est rencontré typiquement lorsque *CONOPT3* est imbriqué dans une procédure de résolution MINLP : une contrainte peut impliquer des variables entières et ces dernières êtres fixées par le module MINLP (après une étape de séparation par la méthode Branch & Bound par exemple). Si une variable continue intervenait aussi dans la contrainte, alors elle devient la seule variable de la contrainte. De la même manière, des contraintes et des variables intermédiaires peuvent être supprimées en intégrant les premières dans la fonction objectif, où elles sont généralement plus faciles à traiter.

Après une procédure de mise à l'échelle des ordres de grandeur de chaque contrainte (*scaling*), la recherche d'une première solution faisable débute. Celle-ci s'effectue en deux temps. Dans le premier, un nombre de variables égal au degré de liberté du problème est fixé et le système d'équations non-linéaires résultant des contraintes est résolu par une méthode de Newton. Cette technique fonctionne assez bien quand les non-linéarités ne sont pas trop fortes, mais l'intégralité du problème ne peut souvent pas être résolue aussi simplement.



Une deuxième phase consiste alors en une méthode plus systématique mais aussi plus coûteuse en temps de calcul, passant par la minimisation de la somme des variables résiduelles d'infaisabilité introduites dans toutes les contraintes non vérifiées. Ce problème de faisabilité est lui-même résolu par la méthode du GRG et trouve sa solution quand les variables résiduelles tendent vers zéro.

Finalement, une fois la première solution faisable trouvée, l'algorithme du GRG est appliqué. Le choix des variables basiques et les directions de descente sont orientés par des informations du second-order de manière à maintenir la faisabilité au cours de la recherche. Le critère d'arrêt est donc atteint quand le gradient réduit est nul (sous une certaine tolérance) ou quand il n'y a plus de variables hors base (la globalité de l'optimum peut alors parfois être prouvée). Il est proposé de se référer à Brooke et al. (1998) pour plus de détails sur la méthode et les options du module de résolution implémenté dans *GAMS*.

#### 2.4.2. *CPLEX*

Le module *CPLEX* est développé par la société ILOG pour un usage comprenant d'une part la résolution de problèmes continus : programmation linéaire (LP) et quadratique (QP) ; d'autre part, il est capable de résoudre des problèmes linéaires en variables mixtes (MILP) de grande taille. Etant donné que *DICOPT++* fait appel à un module de résolution MILP, c'est le second aspect qui intéresse le plus cette étude, même si la résolution de problèmes LP est bien entendu un passage obligé du traitement des problèmes MILP.

Suivant Floudas (1995), les algorithmes dédiés aux problèmes MILP peuvent être rangés dans les classes suivantes : (i) Branch & Bound ; (ii) Méthodes de plans de coupe ; (iii) Méthodes de décomposition ; (iv) Méthodes disjonctives. L'algorithme implémenté dans *CPLEX* est en fait la combinaison d'une technique classique de Branch & Bound et d'une méthode de plans de coupes. La méthode de Branch & Bound ne seront pas rappelés ici. La seule caractéristique est que la relaxation continue à chaque sommet de l'arbre de recherche est un problème de programmation linéaire.

La technique des plans de coupe, initiée dans Gomory (1958), consiste à générer de nouvelles contraintes (*coupes*) qui réduisent l'espace faisable des problèmes linéaires relaxés, mais pas celui du problème initial en variables mixtes. Ainsi, sa combinaison

avec la méthode de Branch & Bound s'appelle le Branch & Cut : à chaque sommet où une solution  $(x^*, y^*)$  non mixte au problème relaxé est trouvée, le problème de séparation suivant (à ne pas confondre avec la séparation de deux variables dans l'arbre de Branch & Bound) est posé : trouver une contrainte inégalité qui est valide pour le problème MILP, mais violée par  $(x^*, y^*)$ .

Ce problème de séparation est généralement compliqué à résoudre, mais des coupes particulières ont été proposées dans divers algorithmes, se basant sur la récurrence de certaines formulations en programmation mixte. *CPLEX* utilise plusieurs des méthodes de coupe existantes.

Il est suggéré de se reporter à Bixby et al. (2000) pour les techniques employées au sein de *CPLEX* et à ( Padberg et al., 1991 ; Letchford et al., 2003 et Johnson et al., 2000) pour plus de détails sur la méthode de Branch & Cut et ses variantes.

Enfin, concernant la résolution des relaxations continues linéaires, *CPLEX* propose différents algorithmes : simplex primal et dual, ainsi que les algorithmes de *barrier*, *sifting* et *network optimizer*. Le mode de fonctionnement consiste généralement à utiliser toutes ces méthodes parallèlement, la plus rapide fournissant la solution.

### 3. CONCLUSION

Dans ce chapitre, les méthodes d'optimisation représentant le fil rouge de ces travaux ont été présentées. Le choix s'est porté sur deux méthodes déterministes, les solveurs commerciaux *DICOPT++* et *SBB*. Ce choix implique l'utilisation d'un modèle général, analytique, auquel peuvent s'appliquer les deux types de méthodes. La formulation du problème d'identification de procédés ainsi que leur résolution seront présentée dans le chapitre suivant.

Signalons qu'il existe certaines zones d'ombres vis-à-vis des solveurs ou modules de résolution vu que l'accès au code des algorithmes est impossible. Toutefois, leurs applications ont fait l'objet de nombreuses publications scientifiques et les résultats obtenus ont démontré leur efficacité.

## Chapitre 4

# **IDENTIFICATION DE PROCÉDÉS EN RÉGIME STATIONNAIRE**

(Études préliminaires)



Dans ce chapitre, il est envisagé la résolution de problèmes MINLP dans le cas de régime stationnaire. Une application des principaux solveurs dans *GAMS* est utilisée pour la résolution des problèmes MINLP.

Ce premier chapitre de la partie statique permet de s'initier à l'utilisation de l'environnement *GAMS* et confirmer son efficacité en traitant des problèmes de petite taille, mis en place pour caractériser et valider par la suite des problèmes réels (voir chapitre suivant). Les solveurs *SBB* et *DICOPT++* sont utilisés pour la résolution. Il est à noter que le solveur *DICOPT++* nécessite une phase d'initialisation des variables plus délicate que *SBB*. L'intérêt de cette démarche est capital car elle permet de dégager une idée sur le solveur le plus adapté pour le traitement de ce type de problèmes dans le domaine de l'identification de modèles.

Ce chapitre 4 comporte deux parties. La première permet de se familiariser avec l'environnement *GAMS* et ses modules de résolution ; des essais d'identification de problèmes comportant des RAC (Réacteur Agité Continu) (soit en série, soit en parallèle, soit combinés) sont effectués. Dans la seconde partie, l'optimisation d'un réseau de transport de gaz naturel est traitée.

## **1. INTRODUCTION**

Si, dans le domaine de l'optimisation des procédés relativement simples, dont la formulation est aisée, il existe un nombre important de travaux, en revanche, peu de publications traitent de l'identification paramétrique et structurelle pour des procédés complexes. Rappelons que le terme 'procédé complexe' s'applique à un problème dont la formulation des contraintes peut induire des systèmes difficiles à résoudre mathématiquement.

De ce fait, on est conduit à mettre en place une démarche de résolution à valider en premier sur des cas relevant de la caractérisation pour des écoulements. Les exemples de complexité croissante sont traités par la suite.

## **2. CARACTERISATION DE MODELES D'ECOULEMENT POUR UNE STRUCTURE CONNUE**

Afin de vérifier l'aptitude de *GAMS* à traiter les problèmes d'identification structurelle et paramétrique, des exemples simples sont tout d'abord mis en place. Le principe consiste à retrouver la structure optimale à partir d'une superstructure. La structure optimale qui doit être retrouvée a été définie a priori. Elle est composée d'un seul RAC avec des valeurs attribuées aux différents paramètres du problème. Dans ces exemples de caractérisation, pour l'ensemble des superstructures utilisées, les données de départ sont déterminées à partir de cette solution composée par un seul RAC. Les paramètres du problème sont la constante d'équilibre, le volume total, le débit et la concentration initiale, l'ordre de la cinétique de la réaction est supposé égal à 1, ce qui permet de retrouver la valeur de la concentration de sortie du RAC.

Afin de tester la capacité de *GAMS* à retrouver une structure donnée, une superstructure de petite taille est utilisée de prime abord, puis une écriture globale est mise en place pour représenter une superstructure incluant un nombre  $j$  maximal de RAC suivant les données fournies par l'utilisateur.

Les superstructures initialement utilisées peuvent être classées en trois catégories suivant le positionnement des RAC:

- en série
- en parallèle
- une combinaison de RAC en série et en parallèle.

### **2.1. FORMULATION DU PROBLEME**

La formulation du problème dépend de la forme de la superstructure initiale utilisée. Afin de valider la méthode, la même démarche est mise en œuvre pour les trois cas, une structure initiale comportant un petit nombre de RAC est utilisée, puis croît progressivement jusqu'à atteindre un nombre plus important  $j$  de RAC. Les formulations des différents cas sont présentées par la suite. Les données des paramètres de la solution qui doit être retrouvée sont les suivantes :

$F_{tot}$  : débit initial  $35 \text{ m}^3/\text{h}$

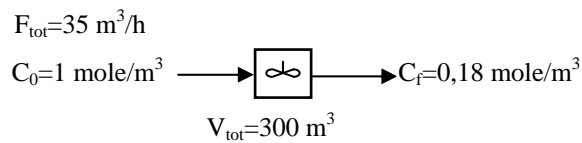
$k$  : constante de réaction  $0,5315 \text{ h}^{-1}$

$C_0$  : concentration initiale  $1 \text{ mole}/\text{m}^3$

$V_{tot}$  : volume total  $300 \text{ m}^3$

$C_f$  : concentration de sortie  $0,18 \text{ mole}/\text{m}^3$

La solution à déterminer est donnée sur la figure 4-1:



**Figure 4-1. Solution à retrouver.**

Pour l'ensemble des trois cas étudiés, les problèmes sont résolus avec la fonction objectif  $Z$  de la forme ci-dessous:

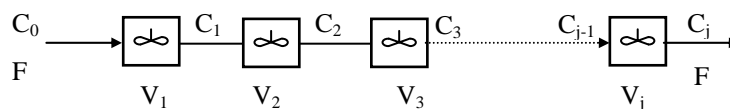
$$Z = \min \left( \sum_{i=1}^j y_i \right) \tag{4-1}$$

où la variable binaire  $y_i$  représente la présence ou l'absence du réacteur  $i$  et  $j$  le nombre maximal de réacteurs de la superstructure. L'objectif de cette formulation est de déterminer la solution comportant un nombre minimal de RAC.

L'intérêt dans cette étape préliminaire est de vérifier les capacités de *GAMS* à résoudre un problème simple monocritère. La formulation des différents cas ainsi que les superstructures utilisées sont présentées dans la partie suivante.

### 2.1.1. Cas de RAC en série

La superstructure utilisée est représentée sur la figure 4-2 :



**Figure 4-2. RAC en série.**

Cette structure initiale comporte  $j$  réacteurs en série, les variables discrètes binaires  $y_i$  traduisent l'existence ou non des opérations unitaires. Les variables continues sont les variables de volume  $V_i$  et de concentration  $C_i$ . Dans ce cas,  $F$  représente le débit d'entrée, fixé.

L'indice  $j$  représente le nombre maximal de réacteurs, plusieurs simulations ont été faites en faisant croître  $j$  de 2 à 50. Seul est présenté le cas qui comporte 50 RAC en série ( $j=50$ ). Dans ce cas, les équations intervenant dans le modèle sont les suivantes :

$$\text{Contrainte de volume : } \sum_{i=1}^{50} V_i = V_{tot} \quad (4-2)$$

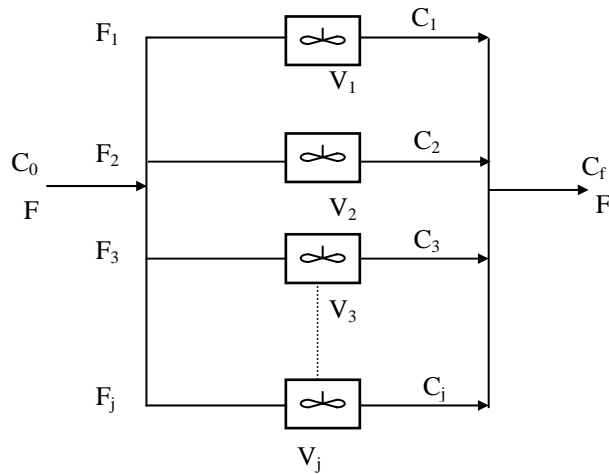
$$V_i \leq y_i \cdot V_{TOT} \quad 1 \leq i \leq 50 \quad (4-3)$$

**Bilan sur réacteurs parfaitement agités continus :**

$$C_{i-1}F = C_i F + k V_i C_i \quad 1 \leq i \leq 50 \quad (4-4)$$

### 2.1.2. Cas des RAC en parallèle

La superstructure utilisée est représentée dans la figure 4-3.



**Figure 4-3. RAC en parallèle.**

Les mêmes démarches que celles du paragraphe précédent ont été effectuées, c'est-à-dire, que plusieurs simulations ont été réalisées en augmentant le nombre de RAC en parallèle. Dans ce cas le paramètre de débit devient variable, ce qui engendre une taille de problème plus importante. En outre, des équations impliquant les contraintes de volumes, les équations structurelles conduisent à des contraintes linéaires. Ces équations de modélisation s'écrivent sous la forme suivante :



**Bilan sur réacteurs parfaitement agités continus :**

$$C_0 F_i = C_i F_i + k V_i C_i \quad 1 \leq i \leq 50 \quad (4-5)$$

**Équations structurelles :**

Bilan de matière global des nœuds

$$\sum_{i=1}^{50} F_i = F \quad (4-6)$$

Bilan de matière partiel du nœud en aval

$$C_f F = \sum_{i=1}^{50} C_i F_i \quad (4-7)$$

### 2.1.3. Combinaison de RAC

Une combinaison d'un ensemble de RAC en série et en parallèle est examinée. On retrouve combinées les mêmes contraintes que dans les deux cas précédents. La superstructure est donnée sur la figure 4-4.

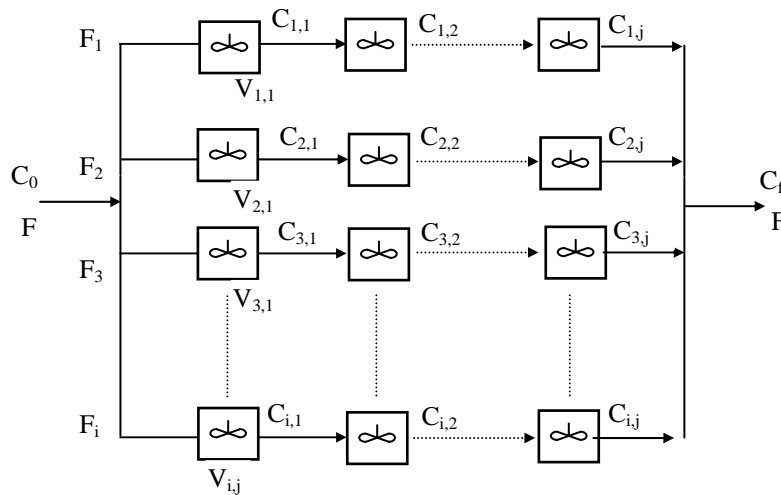


Figure 4-4. Combinaisons de RAC.

Les équations de modélisation sont présentées dans ce qui suit :

**Contrainte de volume :** 
$$\sum_{i=1}^{10} \sum_{j=1}^{50} V_{i,j} = V_{tot} \quad (4-8)$$

$$V_{i,j} \leq y_{i,j} \cdot V_{TOT} \quad 1 \leq j \leq 50, 1 \leq i \leq 10 \quad (4-9)$$

### **Bilan sur les réacteurs agités parfaitement continus**

Pour les premiers RACS de chaque série (j=1)

$$C_0 F_i = C_{i,1} F_i + k V_{i,1} C_{i,1} \quad 1 \leq i \leq 10 \quad (4-10)$$

Pour les autres RAC (exemple rac (2,2))

$$C_{2,1} F_2 = C_{2,2} F_2 + k V_{2,2} C_{2,2} \quad (4-11)$$

### **Équations structurelles**

Bilan de matière global des nœuds

$$\sum_{i=1}^{10} F_i = F \quad (4-12)$$

Bilan de matière partiel du nœud en aval

$$C_f F = \sum_{i=1}^{10} C_{i,50} F_i \quad (4-13)$$

La fonction objectif à minimiser est toujours la même, correspondant à la minimisation de la somme des variables discrètes représentant les RAC.

La taille du problème est dans ce cas assez importante. Par rapport aux variables continues, elle comporte : 10 variables de débits, 50 variables de volumes et 500 variables intermédiaires de concentrations. Les variables discrètes sont au nombre de 500 car elles représentent l'existence ou non des réacteurs. Au niveau des contraintes, le nombre de contraintes bilinéaires (4-10), (4-11) et (4-13) est égal à 501.

## **2.2. RÉSULTATS ET ANALYSE**

Malgré la taille du problème, avec l'application des deux solveurs, *GAMS* arrive toujours à retrouver la structure qui correspond à un seul RAC, donné sur la figure 4-1, avec un temps de calcul très réduit. Le traitement de cet exemple avec les trois cas de figure a conduit à une connaissance détaillée sur l'utilisation de l'environnement *GAMS*.

### 3. ÉTUDE D'UN RÉSEAU DE TRANSPORT DE GAZ NATUREL

#### 3.1. DESCRIPTION DU PROBLÈME

L'exemple traité dans cette partie est un problème formulé par Himmelblau (1986), de type MINLP. Il a été repris par Yuan et al. (1988) et Duran et Grossmann (1986) sous une forme différente. Le but de la résolution de ce problème est de déterminer le nombre de compresseurs nécessaires pour l'acheminement de gaz naturel à partir d'un site de production jusqu'à des sites de livraison, selon des considérations économiques. Les variables discrètes sont binaires et représentent la présence ou l'absence d'un compresseur dans le réseau. Les variables continues sont relatives d'une part aux conditions opératoires (pression d'aspiration et de refoulement, puissance des compresseurs) et d'autre part aux coordonnées géographiques des compresseurs (implantation sur le site). La superstructure définissant le problème est donnée par la figure 4-5, les notations sont définies par la suite.

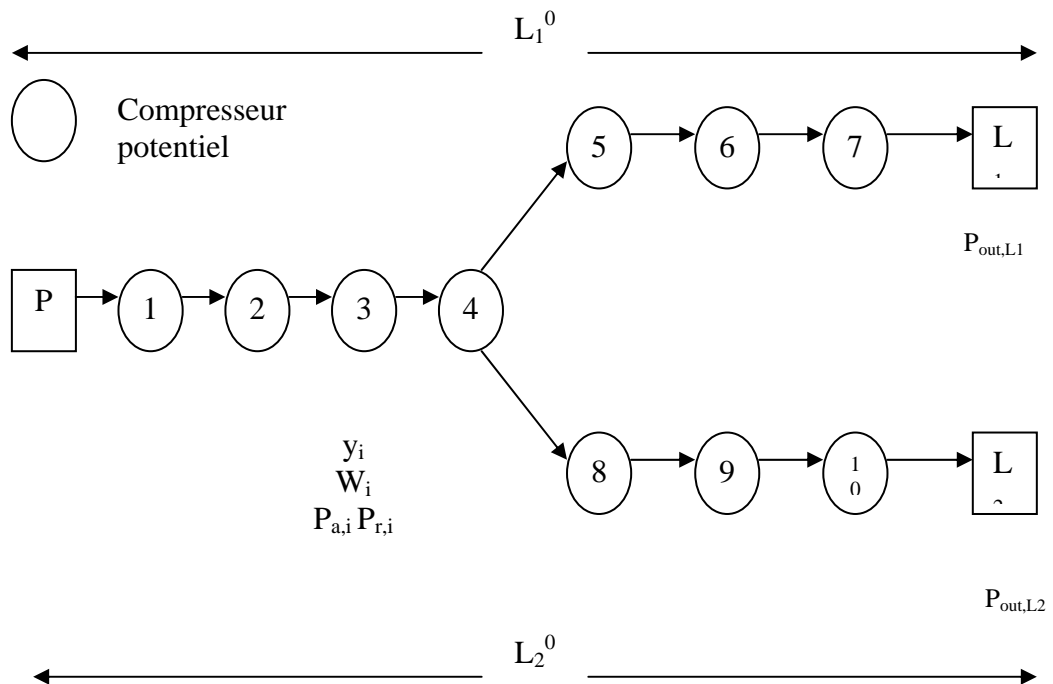


Figure 4-5. Superstructure du réseau de compresseurs.

### **3.2. VARIABLES DU PROBLEME**

Le nombre total de compresseurs n'est pas fixé et doit être déterminé dans le cadre de l'optimisation du coût total. Ainsi, les variables binaires  $y_i$  sont utilisées pour définir l'existence ou non d'un compresseur.

Chaque station de compression est représentée par un nœud et chaque segment de canalisation par un arc.  $N_1$ ,  $N_2$  et  $N_3$  représentent le nombre maximum de stations possibles dans chacune des trois branches. La pression augmente en sortie de compresseur et diminue le long du segment de la canalisation. Le système de transmission est supposé horizontal. Au total il y a :

- $n$  nombre maximal de compresseurs ( $n = \sum N_i$ )
- $n-1$  pressions d'aspiration (la pression d'entrée est connue)
- $n$  pressions de refoulement
- $n+1$  longueurs et diamètres de segments de canalisation (2 segments sont issus de la branche 1)

A chaque segment de canalisation  $j$  sont associées 5 variables :

- le débit volumique  $Q$
- la pression d'entrée  $P_r$  (pression de refoulement du compresseur précédent)
- la pression de sortie  $P_a$  (pression d'aspiration du compresseur suivant)
- le diamètre de conduite  $D$
- la longueur du segment de canalisation  $L$ .

De plus, comme le débit volumique est fixé et que l'on suppose que chaque compresseur consomme 0,5% du gaz qui lui est transmis, seules les 4 dernières variables doivent être déterminées pour chaque segment.

### **3.3. FONCTION OBJECTIF**

Le critère considéré est le coût total annuel représentant la somme des coûts opératoires et de maintenance ( $C_0$  et  $C_p$ ), des coûts d'investissement annualisés des

compresseurs ( $C_f$ ) et des lignes de canalisation. Les variables binaires traduisant la présence ou l'absence d'un compresseur dans le réseau apparaissent de façon multiplicative dans le coût d'investissement, créant ainsi des bilinéarités. On cherche le réseau optimal à l'intérieur d'une superstructure contenant un nombre minimal de branches et de compresseurs dans chacune d'elles. Chaque compresseur est supposé adiabatique avec une température d'entrée égale à la température ambiante. Les segments de canalisation sont supposés suffisamment longs pour que le gaz sortant d'un compresseur entre dans le suivant à la température ambiante.

La puissance nécessaire pour comprimer un gaz de façon adiabatique entre une pression d'aspiration  $P_a$  et une pression de refoulement  $P_r$  s'exprime par la relation ci-dessous :

$$W = \frac{\rho \cdot Q \cdot R \cdot T_a}{M} \cdot \frac{k}{k-1} \cdot \frac{1}{\eta_{adia} \cdot \eta_m} \left[ \left( \frac{P_r}{P_a} \right)^{z \cdot \frac{k-1}{k}} - 1 \right] \quad (4-14)$$

où

$W$  = travail (hp)

$\rho$  = masse volumique du gaz (lb/ft<sup>3</sup>)

$Q$  = débit volumique dans le compresseur (ft<sup>3</sup>/jour)

$R$  = constante des gaz parfaits (32,521.10<sup>-6</sup> hp.jour.lbmol<sup>-1</sup>.°R<sup>-1</sup>)

$T_a$  = température d'aspiration (°R)

$M$  = masse molaire du gaz (lb/lbmol)

$k$  = exposant adiabatique du gaz aux conditions d'aspiration (sans dimension)

$\eta_{adia}$  = rendement adiabatique, ici pris à 0,8

$\eta_m$  = rendement moteur 0,9

$P_r$  = pression de refoulement (psi)

$P_a$  = pression d'aspiration (psi)

$z$  = facteur de compressibilité du gaz aux conditions d'aspiration (sans dimension).

Dans cette formulation, les unités utilisées par les divers auteurs ayant publié des résultats sur ce problème ont été conservées (Himmelblau, 2001).

Le coût d'installation d'une canalisation dépend de sa longueur et de son diamètre et peut s'exprimer sous la forme.

$$CoutPipe = \sum_{j=1}^m g(D_j).L_j \quad (4-15)$$

où

m = nombre de segments de canalisation dans le système

g = coût annuel de la canalisation (\$/inch.mile.an)

Le coût annuel des compresseurs peut s'exprimer de deux façons suivantes

$$CoutComp = \sum_{i=1}^n C_{var}.W_i \quad (4-16)$$

$$CoutComp = \sum_{i=1}^n C_{var}.W_i + C_{fix}.b_i \quad (4-17)$$

Les coûts d'exploitation et de maintenance sont reliés directement à la puissance des compresseurs, ils sont donc une fonction linéaire de la puissance des compresseurs. En appelant  $C_0$  le coût d'exploitation pour un compresseur (i) par unité de puissance, le coût total d'exploitation du réseau est :

$$CoutExp = \sum_{i=1}^n C_0.W_i \quad (4-18)$$

La fonction objectif de ce problème est :

$$f = CoutPipe + CoutComp + CoutExp \quad (4-19)$$

Dans le cas où le coût des compresseurs est représenté par l'équation (4-16), la fonction objectif s'écrit :

$$f = \sum_{i=1}^n (C_{var} + C_0).W_i + \sum_{j=1}^m g(D_j).L_j \quad (4-20)$$

Dans le cas où le coût des compresseurs est représenté par l'équation (4-17), la fonction objectif s'écrit :

$$f = \sum_{i=1}^n (C_{var} + C_0).W_i + C_{fix}.b_i + \sum_{j=1}^m g(D_j).L_j \quad (4-21)$$

La fonction objectif retenue par la suite est donnée par la formulation (4-21) car elle semble plus réaliste.

### 3.4. CONTRAINTES DU PROBLEME

Deux classes de contraintes égalité existent pour le réseau de transmission. Suivant la longueur du réseau, qui est fixée, et l'existence de deux branches, deux contraintes peuvent être explicitées :

$$\sum_{j=1}^{N1-1} L_j + \sum_{j=N1}^{N1+N2} L_j = L_1^0 \quad (4-22)$$

où

$L_k^0$  est la longueur d'une branche

N1 est le nombre de compresseurs de la branche 1

N2 est le nombre de compresseurs de la branche 2

N3 est le nombre de compresseurs de la branche 3

La seconde contrainte s'écrit :

$$\sum_{j=1}^{N1-1} L_j + \sum_{j=N1}^{N1+N3} L_j = L_2^0 \quad (4-23)$$

Le débit de gaz est fonction du diamètre de la canalisation, et doit satisfaire l'équation de Weymouth (GPSA Handbook, 1972), qui est bien adaptée aux transmissions de gaz pour lesquelles le débit est important.

$$Q_j = C.E.D_j^{8/3} \cdot \frac{T_b}{P_b} \cdot \left( \frac{P_r^2 - P_a^2}{G.L_j.T.Z} \right)^{1/2} \quad (4-24)$$

$Q$  = débit volumique (ft<sup>3</sup>/jour)

$C$  = constante de l'équation de Weymouth 433,5

$E$  = efficacité de la ligne de canalisation (valeur usuelle 0,92)

$P_a$  = pression d'aspiration (psi)

$P_r$  = pression de refoulement (psi)

$T_b, P_b$  = température et pression aux conditions standards (520°R et 14,73 psia)

$D$  = diamètre de la canalisation (inches)

$L$  = longueur de la canalisation (miles)

$G$  = gravité spécifique (sans dimension)

$T$  = température moyenne (°R)

$Z$  = coefficient de compressibilité du gaz (sans dimension)

Des contraintes sur les pressions sont définies à savoir :

$$\frac{P_{r_i}}{P_{a_i}} \leq 1, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4-25)$$

Le taux de compression ne doit pas dépasser un taux de compression maximal  $K$  :

$$\frac{P_{r_i}}{P_{a_i}} \leq K_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (4-26)$$

De plus, des bornes supérieures et inférieures sont fixées pour chacune des 4 variables :

$$P_{r_i}^{\min} \leq P_{r_i} \leq P_{r_i}^{\max} \quad (4-27)$$

$$P_{a_i}^{\min} \leq P_{a_i} \leq P_{a_i}^{\max} \quad (4-28)$$

$$L_i^{\min} \leq L_i \leq L_i^{\max} \quad (4-29)$$

$$D_i^{\min} \leq D_i \leq D_i^{\max} \quad (4-30)$$

Ainsi, les tableaux 4-1, 4-2 et 4-3 définissent respectivement les constantes du problème, les différents coûts et les bornes des variables utilisées :

$N1$	<i>Nombre maximum de stations de compression possibles dans la branche 1</i>	4
$N2$	<i>Nombre maximum de stations de compression possibles dans la branche 2</i>	3
$N3$	<i>Nombre maximum de stations de compression possibles dans la branche 3</i>	3
$P1$	<i>Pression d'entrée de la branche 1</i>	500 psi
$Q$	<i>Débit volumique d'entrée de la branche 1</i>	600 MMCFD
$P2$	<i>Pression de sortie de la branche 2</i>	600 psi
$P3$	<i>Pression de sortie de la branche 3</i>	300 psi
$L_1^0$	<i>Longueur des branches 1+2</i>	175 miles
$L_2^0$	<i>Longueur des branches 1+3</i>	200 miles

**Tableau 4-1. Constantes caractérisant le réseau de transport de gaz.**



$C_{var}$	<i>Coût d'investissement variable</i>	70 \$/hp.an
$C_0$	<i>le coût d'exploitation d'un compresseur</i>	8 \$/hp.an
$C_{fix}$	<i>Capital initial fixe</i>	10000 \$/an
$g$	<i>Coût annuel de chaque segment du canalisation</i>	870 \$/in.mile.an

**Tableau 4-2. Différents coûts.**

$P_{r_i}^{min}$	<i>Pression de refoulement minimale</i>	200 psi
$P_{r_i}^{max}$	<i>Pression de refoulement maximale</i>	1000 psi
$P_{a_i}^{min}$	<i>Pression d'aspiration minimale</i>	200 psi
$P_{a_i}^{max}$	<i>Pression d'aspiration maximale</i>	1000 psi
$L_i^{min}$	<i>Longueur minimale des segments de canalisation</i>	2 miles
$L_i^{max}$	<i>Longueur maximale des segments de canalisation</i>	200 miles
$D_i^{min}$	<i>Diamètre minimal des segments de canalisation</i>	4 inches
$D_1^{max}$	<i>Diamètre maximal des segments de canalisation de la branche 1</i>	36 inches
$D_2^{max}$	<i>Diamètre maximal des segments de canalisation de la branche 2</i>	18 inches
$D_3^{max}$	<i>Diamètre maximal des segments de canalisation de la branche 3</i>	18 inches
$K_i$	<i>Taux de compression maximal</i>	2

**Tableau 4-3. Bornes des variables utilisées.**

### 3.5. **RÉSULTATS ET ANALYSE**

Rappelons que l'intérêt de cet exemple est de traiter le problème suivant les deux méthodes de résolutions MINLP implémentées dans *GAMS*, i.e *DICOPT++* et *SBB*, permettant ainsi de présélectionner la méthode la plus adéquate pour la résolution de problèmes MINLP. La méthode utilisée pour représenter ce problème s'appuie sur le modèle d'Himmelblau (2001), qui utilise la relation de Weymouth pour relier la longueur au débit via le diamètre, tandis que celui de Duran et Grossman (1986) prend en considération la norme euclidienne.

Afin d'obtenir des informations concernant l'influence de l'initialisation sur les deux procédures de résolution, plusieurs tests ont été effectués pour les deux solveurs, selon la

nature de la variable, continue ou discrète. Une initialisation des variables continues est effectuée pour le diamètre et la longueur pour l'ensemble des tests où les valeurs sont fixées au milieu de leurs bornes respectives, alors que pour les variables discrètes, trois types d'initialisations sont effectuées, sans initialisation, initialisation partielle  $y = (0,1,0,0,1,0,0,0,1,0)$ , et initialisation totale. La première consiste à donner une valeur nulle pour l'ensemble des variables  $y_i$  alors que dans la deuxième, une partie des variables discrètes est initialisée, et dans la troisième toutes les variables discrètes sont initialisées à 1.

Les résultats sont présentés dans les tableaux suivants.

	Sans initialisation des variables $y_i$
<i>SBB</i>	<p>Diagram for SBB: A process P with stages 1, 2, and 3. An arrow labeled 161,2 points from stage 3 to a junction. From this junction, an arrow labeled 13,8 points to L1, and another labeled 38,8 points to stage 8. Stage 8 then has an arrow labeled 38,8 pointing to L2. A box below the diagram states: <b>Coût = 8 214 712 \$</b></p>
<i>DICOPT++</i>	<p>Diagram for DICOPT++: A process P with stages 1, 2, and 3. An arrow labeled 160,8 points from stage 3 to a junction. From this junction, an arrow labeled 14,2 points to L1, and another labeled 160,8 points to stage 8. Stage 8 then has an arrow labeled 39,2 pointing to L2. A box below the diagram states: <b>Coût = 8 226 299 \$</b></p>

*Tableau 4-4. Résultats obtenus sans initialisation de  $y_i$ .*

	Initialisation partielle des variables $y_i$ (0,1,0,0,1,0,0,0,1,0)
<i>SBB</i>	<p>Coût = 7 247 224 \$</p>
<i>DICOPT++</i>	<p>Coût = 7 225 437 \$</p>

Tableau 4-5. Résultats obtenus avec initialisation partielle de  $y_i$ .

	Initialisation totale des variables $y_i$
<i>SBB</i> <i>DICOPT++</i>	<p>Coût = 6 989 961 \$</p>

Tableau 4-6. Résultats obtenus avec initialisation complète de  $y_i$ .

Bien que cet exemple constitue un test significatif pour une étude préliminaire de l'efficacité des solveurs, les résultats obtenus indiquent bien que l'initialisation peut entraver la recherche d'une solution optimale. Ici, seules les structures obtenues et les coûts correspondants sont présentés. L'ensemble des autres variables représentant les paramètres des différentes structures, pressions d'aspiration et de refoulement, diamètre longueur et débit de chaque canalisation, ainsi que le taux de compression et la puissance de chaque compresseur, est donnée en annexe 4-II.

Suivant l'initialisation utilisée pour les variables discrètes, les résultats obtenus montrent un écart au niveau du coût global assez important. De même, pour les

structures, on observe un nombre de compresseurs plus important dans le tableau 4-3 que dans le tableau 4-5 et le tableau 4-6.

Concernant l'application des solveurs, le tableau 4-4 permet de constater que les coûts obtenus suivant *SBB* et *DICOPT++* sont proches mais les structures sont différentes. Le nombre de compresseurs (=8) obtenu avec *DICOPT++* est nettement plus important que celui obtenu par *SBB* (=4). On peut dire que *DICOPT++* trouve une solution sous optimale, ce qui contraint l'utilisateur à une initialisation des variables discrètes pour améliorer la solution obtenue.

Dans le tableau 4-5, les structures obtenues sont encore différentes mais les coûts globaux restent très proches. A noter que si dans le cas précédent *SBB* fournissait le coût le plus faible, ici c'est l'inverse. Ce qui signifie qu'il existe un ensemble de bonnes solutions ou de solutions localement optimales.

Dans le tableau 4-6, *SBB* et *DICOPT++* trouvent le même résultat, ce qui indique dans ce cas qu'une initialisation totale des variables de structure est la mieux adaptée pour l'obtention d'une solution optimale. Néanmoins, il est délicat à ce niveau de l'étude de statuer définitivement sur l'efficacité des deux solveurs pour le traitement de problèmes d'optimisation de procédés.

Cette difficulté à conclure conduit donc à traiter d'autres problèmes d'identification de modèles de procédés, déjà abordés au sein de l'équipe de recherche, et qui ont posé des difficultés de résolution, en particulier en ce qui concerne l'initialisation des variables.

## **4. CONCLUSION**

Ce chapitre a permis de s'initier à la pratique de l'environnement *GAMS* dans le domaine du génie des procédés. Le traitement de problèmes d'identification de modèles a été abordé avec les deux solveurs *SBB* et *DICOPT++*.

Des exemples mis en place pour la caractérisation de modèles d'écoulement ont été testés. L'environnement *GAMS* a montré une grande simplicité d'utilisation et une aisance particulière lors de l'étape de formulation du critère et des contraintes. On peut toutefois signaler quelques restrictions ou contraintes dans l'utilisation de *GAMS*. Tout d'abord, il faut apporter une attention particulière à la déclaration des variables et des paramètres. Ensuite, la formulation d'une contrainte ne peut pas être liée à la valeur

particulière d'une variable. Pour être plus précis, on ne peut pas introduire de test pour la formulation des contraintes, c'est-à-dire lier la formulation d'une contrainte à celle d'une variable. De manière analogue, dans la mesure où la formulation est figée dès que le fichier d'entrée est donné, aucun changement de formulation n'est possible durant la phase de résolution. Ces remarques conduisent à apporter une attention toute particulière à la formulation d'un problème avant de lancer l'exécution de *GAMS*.

Les deux solveurs ont montré une bonne efficacité pendant cette étape de caractérisation, où différentes structures ont été testées.

L'application sur un exemple réel d'un réseau de transport de gaz naturel a permis de constater l'importance de l'initialisation et l'influence qu'elle peut avoir. Cependant, selon les deux solveurs utilisés, peu d'écarts au niveau des résultats ont été remarqués.

Le traitement de ces exemples préliminaires étant maintenant effectué, il est possible d'aborder la résolution de problèmes d'identification plus complexes, en particulier ceux déjà traités dans l'équipe de recherche par d'autres méthodes (généralement stochastique). Les résultats sont présentés dans le chapitre suivant.



**Annexe 4-I- . FORMULATION D'UN EXEMPLE AVEC L'ENVIRONNEMENT GAMS 3**

**Annexe 4-II- . RESULTATS DE L'ETUDE D'UN RESEAU DE TRANSPORT DE GAZ  
NATUREL ..... 9**

<b>1. RESULTATS SANS INITIALISATION DES VARIABLES <math>y_i</math>.....</b>	<b>11</b>
1.1. SBB .....	11
1.2. DICOPT++.....	12
<b>2. RESULTATS AVEC INITIALISATION PARTIELLE DES VARIABLES <math>y_i</math>.....</b>	<b>13</b>
2.1. SBB .....	13
2.2. DICOPT++.....	14
<b>3. RESULTATS AVEC INITIALISATION TOTALE DES VARIABLES <math>y_i</math>.....</b>	<b>15</b>





# Annexe 4-I-

## **FORMULATION D'UN EXEMPLE AVEC L'ENVIRONNEMENT *GAMS***



Dans cette annexe, la formulation du problème présenté dans le paragraphe 2.1.3 est effectuée. Rappelons que la structure du problème traité est la suivante.

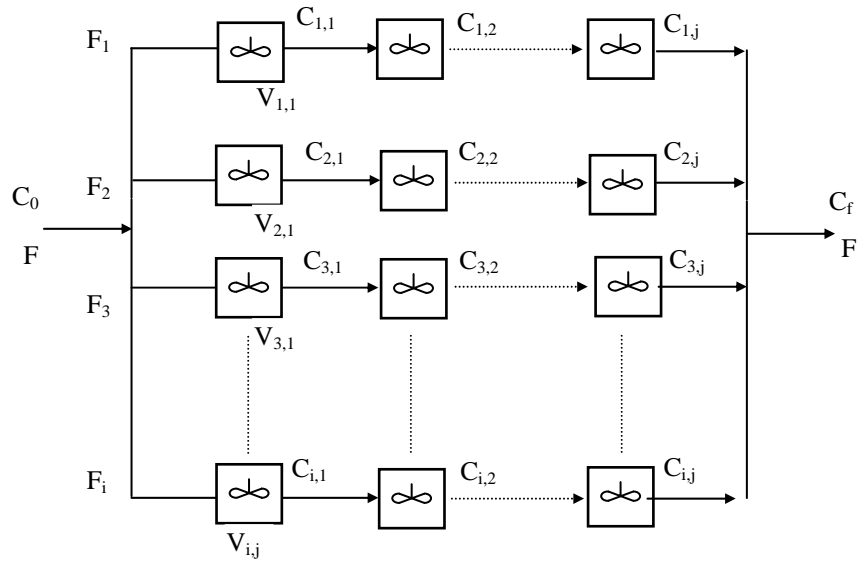


Figure A4-1. Combinaisons de RAC.

### Formulation du problème

\*\*\*\*\*Déclaration des ensembles\*\*\*\*\*

#### SET

i 'indice de numéro de ligne' /1\*11/  
j 'indice de numéro de colonne' /1\*3/  
l 'indice de numéro de concentration' /1\*4/

\*\*\*\*\*Déclaration des données\*\*\*\*\*

#### SCALAR

Qtot 'débit initial' / 35 /  
kk 'constante de réaction' /0.5315/  
C0 'concentration initiale' /1/  
Vtot 'volume total' /300/  
Cf / 0.18 /;

\*\*\*\*\*Déclaration des variables\*\*\*\*\*

**BINARY VARIABLE**

$y(i,j)$  'existence de chaque RAC sur la ligne  $i$  a la position  $j$ ';

**VARIABLE**

$Z$  'Fonction objectif' ;

**POSITIVE VARIABLE**

$V(i,j)$ . 'Volume de chaque rac sur la ligne  $i$  a la position  $j$ '

$C(i,l)$ . 'Concentration de la branche  $i$  suivant le RAC  $l$ '

$Q(i)$ . 'Débit de chaque branche';

\*\*\*\*\*Déclaration des paramètres\*\*\*\*\*

**PARAMETER**

reference( $l,i,j$ )

ptdepart( $i,l$ )

finconc;

\*\*\*\*\*Déclaration des contraintes sur les ensembles\*\*\*\*\*

loop( $i$ [\$ord( $i$ )>0],

loop( $l$ [\$ord( $l$ )=1],

ptdepart( $i,l$ )=ord( $i$ )

);

finconc=card( $l$ );

loop( $l$ [\$ord( $l$ )>0],

loop( $j$ [\$ord( $j$ )=ord( $l$ )\$(ord( $j$ )>1)],

loop( $i$ ,

reference( $l,i,j$ )= ord( $i$ )+ord( $j$ )

);

);

);

\*\*\*\*\*Déclaration des équations\*\*\*\*\*

## EQUATION

Cont\_dep

Bilan\_RAC

Bilan\_Mat\_Glo

Contr\_Vol

Bilan\_Mat\_Out

Contr\_Exis

Contr\_Debit1

Contr\_Debit1

Fct\_obj ;

Cont\_dep(i,l)\$ (ptdepart(i,l))..  $C(i,l)=e=\sum(j,y(i,j))*C_0$  ;

Bilan\_RAC(l,i,j)\$ (reference(l,i,j))..  $C(i,l)*Q(i)=e=(c(i,l+1)*Q(i)+kk*V(i,j)*C(i,l+1))$ ;

Bilan\_Mat\_Glo  $Q_{tot}=e= \sum(i,Q(i))$  ;

Contr\_Vol..  $V_{tot}=e=\sum(i, \sum(j,V(i,j) ) )$  ;

Bilan\_Mat\_Out(l)\$ (ord(l)=card(l))..  $Cf*Q_{tot}=e= \sum(i,C(i,l)*Q(i))$  ;

Contr\_Exis(i,j)..  $v(i,j)=l= y(i,j)*V_{tot}$  ;

Contr\_debit1(l,i)..  $C(i,l)=l=\sum(j,y(i,j))*C_0$  ;

Contr\_Debit2(i)..  $Q(i)=l=\sum(j,y(i,j) ) *Q_{tot}$  ;

Fct\_obj  $Z=e= \sum(i,\sum(j,y(i,j)))$  ;

\*\*\*\*\*déclaration des bornes des variables\*\*\*\*\*

C.up(i,l)= 1;

C.lo(i,l)= 0;

V.up(i,j)= 300;

V.lo(i,j)= 0;

Q.up(i)= 35;

Q.lo(i)= 0;

\*\*\*\*\*Déclaration du modèle\*\*\*\*\*

MODEL RACPARRCONTI /all/ ;

\*\*\*\*Option d'affichage\*\*\*\*

option sysout=on;

\*\*\*\* indication sur la nature du problème\*\*\*\*

SOLVE RACPARRCONTI using MINLP minimizing Z;

\*\*\*\*Déclaration d'affichage des résultats\*\*\*\*

DISPLAY y.l, c.l, v.l, f.l, Q.l;

Le choix d'utiliser un solveur particulier est effectué, soit en déclarant en fin du programme, soit à partir du fichier d'option dans la barre des tâches.

Annexe 4-II-

**RESULTATS DE L'ETUDE  
D'UN RESEAU DE  
TRANSPORT  
DE GAZ NATUREL**





Dans cette annexe, les résultats obtenus lors de l'étude d'un réseau de transport de gaz naturel sont présentés suivant l'initialisation des variables discrètes effectuées, les structures présentées dans les tableaux (4-3) à (4-5) sont rappelées.

## 1. RESULTATS SANS INITIALISATION DES VARIABLES $y_i$ (tableau 4-4)

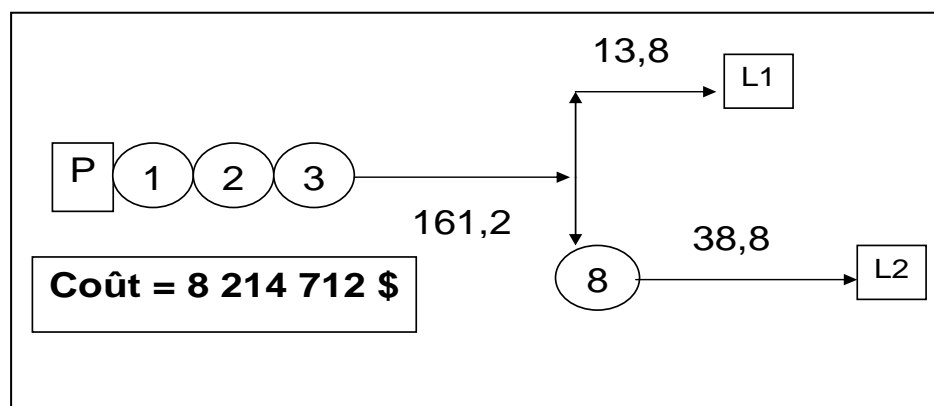
### 1.1. SBB

Segment de canalisation	Pression de refoulement (psi)	Pression d'aspiration (psi)	Diamètre (inches)	Longueur (miles)	Débit (MMFCD)
Arc1	718	370	36	161,2	597
Arc2	465	465	26	0	0
Arc3	600	600	18	0	0
Arc4	600	600	18	0	0
Arc5	600	600	18	0	0
Arc6	600	600	18	0	0
Arc7	600	200	18	13,8	295
Arc8	600	600	18	0	0
Arc9	965	965	18	0	0
Arc10	965	300	18	36,6	294
Arc11	300	200	18	2,2	294

Tableau A4-a1. Résultats obtenus sans initialisation de  $y_i$ .

N° Station de compression	Taux de compression	Puissance (hp)
1	1,44	9973
2	1,26	6192
3	1,29	6830
8	1,61	6520

Tableau A4-b1. Résultats obtenus sans initialisation de  $y_i$ .



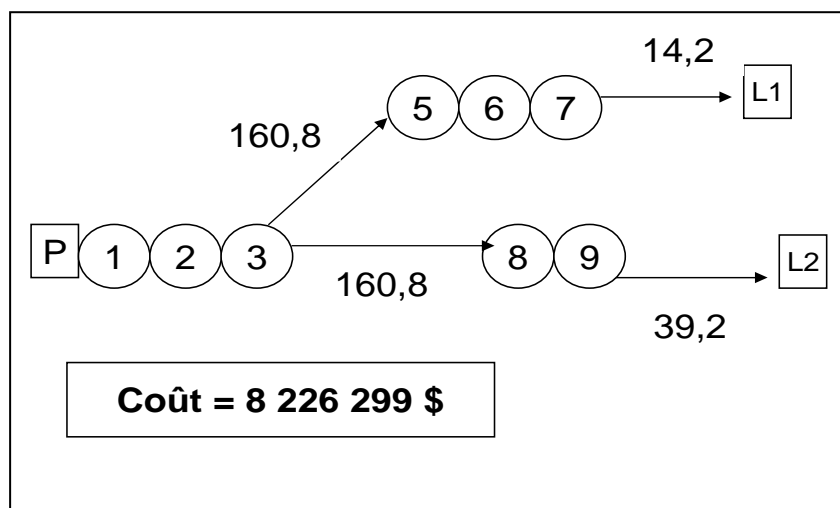
1.2. *DICOPT++*

Segment de canalisation	Pression de refoulement (psi)	Pression d'aspiration (psi)	Diamètre (inches)	Longueur (miles)	Débit (MMFCD)
Arc1	718	371	36	160,8	597
Arc2	424	424	0	0	0
Arc3	496	496	0	0	0
Arc4	496	496	0	0	0
Arc5	516	516	0	0	0
Arc6	549	549	0	0	0
Arc7	600	200	18	14,2	291
Arc8	496	496	0	0	0
Arc9	684	684	0	0	0
Arc10	965	300	18	37	292
Arc11	300	200	18	2,2	292

Tableau A4-a2. Résultats obtenus sans initialisation de  $y_i$ .

N° Station de compression	Taux de compression	Puissance (hp)
1	1,44	9973
2	1,14	3555
3	1,17	4194
5	1,04	508
6	1,06	824
7	1,09	1139
8	1,38	4322
9	1,41	4638

Tableau A4-b2. Résultats obtenus sans initialisation de  $y_i$ .



## 2. RESULTATS AVEC INITIALISATION PARTIELLE DES VARIABLES $y_i$ (0,1,0,0,1,0,0,0,1,0) (tableau 4-5)

### 2.1. SBB

Segment de canalisation	Pression de refoulement (psi)	Pression d'aspiration (psi)	Diamètre (inches)	Longueur (miles)	Débit (MMFCD)
Arc1	698	698	36	0	0
Arc2	1000	855	33	72,2	594
Arc3	1000	788	33	102,8	591
Arc4	788	788	7,4	0	0
Arc5	788	600	0	0	0
Arc6	600	600	13	0	0
Arc7	600	200	0	0	0
Arc8	788	788	18	0	0
Arc9	788	788	18	0	0
Arc10	788	300	18	22,8	295
Arc11	300	200	18	2,2	295

Tableau A4-a3. Résultats obtenus avec initialisation partielle de  $y_i$ .

N° Station de compression	Taux de compression	Puissance (hp)
1	1,40	9170
2	1,43	9811
3	1,17	4173

Tableau A4-b3. Résultats obtenus avec initialisation partielle de  $y_i$ .

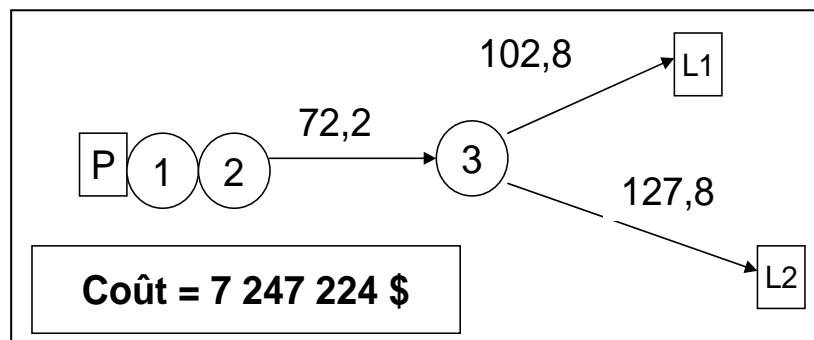


Figure A4-3. Réseau obtenu suivant SBB.

## 2.2. DICOPT++

Segment de canalisation	Pression de refoulement (psi)	Pression d'aspiration (psi)	Diamètre (inches)	Longueur (miles)	Débit (MMFCD)
Arc1	698	698	0	0	0
Arc2	1000	603	33	175	594
Arc3	603	603	0	0	0
Arc4	603	600	0	0	0
Arc5	600	600	0	0	0
Arc6	600	600	0	0	0
Arc7	600	600	0	0	0
Arc8	788	603	0	0	0
Arc9	788	300	18	22,8	295
Arc10	300	300	18	0	0
Arc11	300	200	18	2,2	295

Tableau A4-a4. Résultats obtenus avec initialisation partielle de  $y_i$ .

N° Station de compression	Taux de compression	Puissance (hp)
1	1,40	9170
2	1,43	9811
8	1,31	3608

Tableau A4-b4. Résultats obtenus avec initialisation partielle de  $y_i$ .

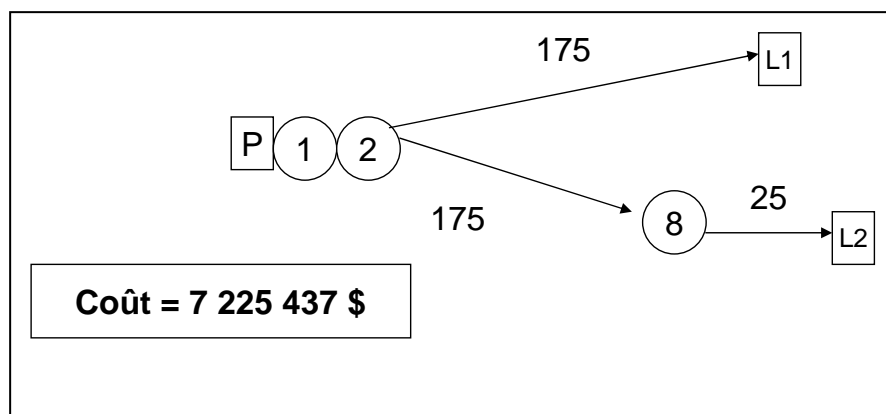


Figure A4-4. Réseau obtenu suivant DICOPT++.

### 3. RESULTATS AVEC INITIALISATION TOTALE DES VARIABLES $y_i$ (tableau 4-6)

#### 3.1. SBB ET DICOPT++

Segment de canalisation	Pression de refoulement (psi)	Pression d'aspiration (psi)	Diamètre (inches)	Longueur (miles)	Débit (MMFCD)
Arc1	615	615	34	0	597
Arc2	775	775	30	0	594
Arc3	1000	788	33	175	591
Arc4	600	788	25	0	296
Arc5	600	600	18	0	296
Arc6	600	600	18	0	296
Arc7	600	200	0	0	296
Arc8	788	311	21	24	296
Arc9	311	300	21	1	296
Arc10	300	300	25	0	296
Arc11	300	200	0	0	296

Tableau A4-a5. Résultats obtenus avec initialisation totale de  $y_i$ .

N° Station de compression	Taux de compression	Puissance (hp)
1	1,23	5594
2	1,26	6236
3	1,29	6874

Tableau A4-b5. Résultats obtenus avec initialisation totale de  $y_i$ .

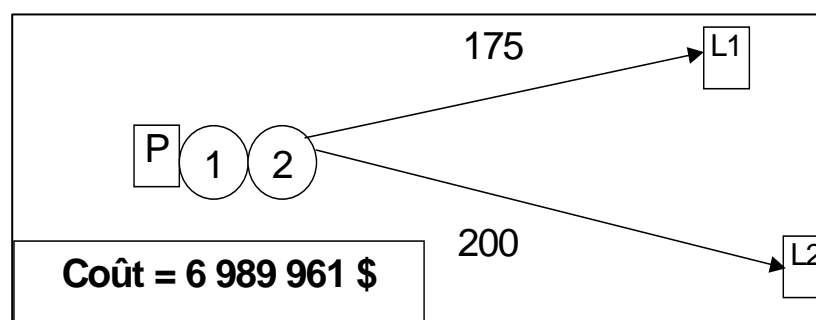


Figure A4-4. Réseau obtenu suivant DICOPT++ et SBB.

# Chapitre 5

## **IDENTIFICATION DE MODÈLES EN RÉGIME STATIONNAIRE**

(Étude d'un bassin de décantation et  
d'un réacteur de déphosphatation  
d'effluents aqueux)



Ce chapitre 5 est la suite du précédent ; il reprend la même démarche vis-à-vis des solveurs, pour choisir celui qui sera utilisé par la suite pour la résolution de problèmes dynamiques.

Deux problèmes traités au sein de l'équipe sont examinés. Le premier concerne un bassin de décantation d'effluents aqueux. Extrait de la littérature, cet exemple est une étape intermédiaire pour la résolution d'un problème plus complexe.

Le second problème traite le cas de l'optimisation d'un réacteur à lit fluidisé de déphosphatation d'effluents aqueux. Cette étude fait suite aux travaux de thèse de Monstastruc (2003), lors desquels une méthode hybride a été mise en œuvre.

## **1. ÉTUDE D'UN BASSIN DE DECANTATION**

L'étude d'un bassin de décantation d'effluents aqueux pollués est un exemple très intéressant du point de vue de l'identification de modèles d'opérations unitaires. Il permet de tester la capacité de *GAMS* à identifier des structures comportant des modèles élémentaires tels que réacteurs piston et RAC, by pass, zones mortes, etc. La superstructure initiale doit correspondre à un schéma général englobant la majorité des procédés possibles ou admissibles, compte tenu des informations et des contraintes du problème. Le but est de déterminer le modèle le plus simple afin de représenter le phénomène réel constaté expérimentalement.

Plusieurs études du décanteur ont été effectuées, parmi lesquelles celle de Floquet et al. (1989) et Monstastruc (2003). La première a identifié un modèle par une méthode d'optimisation en variables mixtes. Cette méthode se base sur le concept de décomposition, de projection et de linéarisation. La seconde étude utilise une méthode reposant sur une approche hybride à deux niveaux : une approche stochastique pour traiter le problème maître et un algorithme de programmation quadratique pour résoudre le problème esclave. Le premier niveau induit une détermination des variables structurelles du procédé alors que le second est relatif à une résolution paramétrique. Les résultats obtenus ont démontré qu'un effort conséquent d'initialisation était nécessaire pour ne pas obtenir une solution dégradée.



### 1.1. DESCRIPTION DU PROBLEME

Il s'agit d'un bassin de traitement d'effluents aqueux, de forme rectangulaire, comportant deux bras d'agitation mécanique (figure 5-1) présenté initialement par Floquet et al. (1989). Les réactions mises en jeu sont schématisées par la transformation suivante :  $A \xrightarrow{k} R$

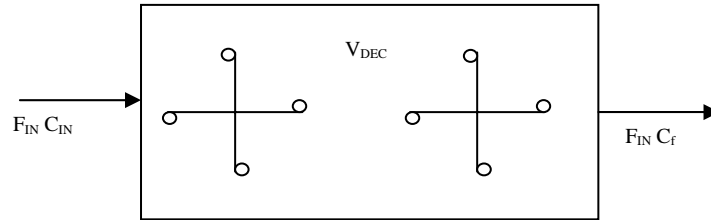


Figure 5-1. Bassin de décantation d'effluents aqueux.

La vitesse de réaction est supposée de premier ordre par rapport au polluant A :

$$r_A = k C_A.$$

$F_{IN}$  et  $C_{IN}$  représentent le débit et la concentration de l'alimentation, et  $C_f$  est la concentration du courant sortant.  $V_{DEC}$  correspond au volume total du décanteur. La réaction est considérée isotherme.  $F_{IN}$ ,  $C_{IN}$  et  $V_{DEC}$  sont les données du problème et sont reprises de l'étude de Floquet et al. (1989) :

$$F_{IN} = 36 \text{ m}^3/\text{h} ;$$

$$C_{IN} = 1 \text{ mole}/\text{m}^3 ;$$

$$V_{DEC} = 300 \text{ m}^3 ;$$

$$k = 0,36 \text{ h}^{-1}.$$

Le modèle est résolu suivant différentes valeurs numériques de  $C_f$ , respectivement 0,18 ; 0,58 ; 0,80 et 0,98 mole/m<sup>3</sup>.

L'identification paramétrique et structurelle du bassin est effectuée à partir de plusieurs modèles élémentaires pouvant être connectés en cascade (piston ou RAC) combinés avec des by-pass, des recyclages et des zones mortes. La superstructure, c'est-à-dire l'ensemble de toutes les combinaisons possibles des modèles élémentaires, est présentée dans la figure 5-2.

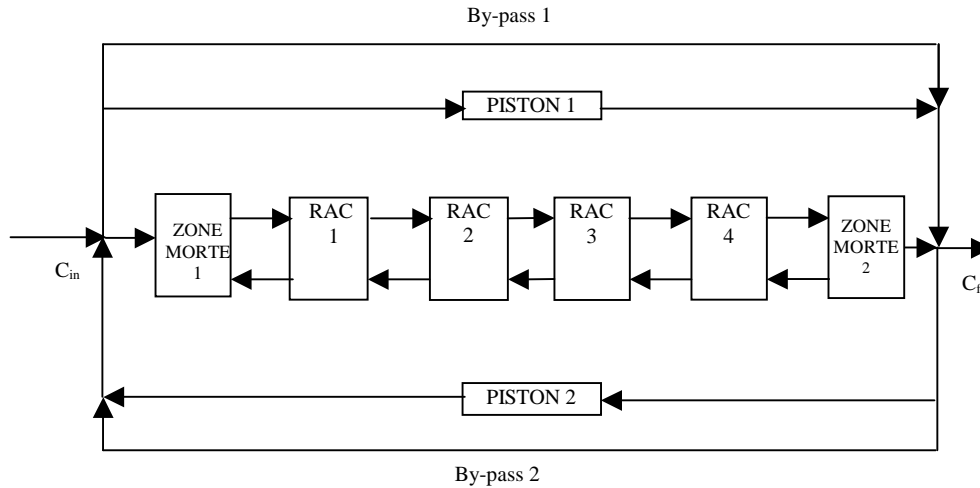


Figure 5-2. Modèle du décanteur.

Cette superstructure, identique à celle utilisée par Floquet et al. (1989) et Montastruc (2003), a été conservée afin de vérifier et de comparer les solutions obtenues. La superstructure retenue comporte deux zones mortes, deux by-pass, deux réacteurs pistons, quatre réacteurs parfaitement agités continus avec recyclage.

Le problème relatif à la modélisation du procédé de la figure 5-2 est un problème de programmation mixte où les variables discrètes (binaires) traduisent l'existence ou non des opérations unitaires du procédé et des éléments du recyclage. Les variables continues sont les différents débits, concentrations et volumes. Le problème consiste à minimiser le nombre des modèles élémentaires ainsi que le nombre de recyclages afin d'obtenir le modèle structurellement le plus simple permettant d'atteindre la concentration imposée de sortie. Ce problème peut être formulé de façon très générale comme suit :

$$\begin{array}{ll}
 \text{Min} \sum_{i=1}^n y_i & y_i : \text{variables binaires indiquant l'existence ou non d'un modèle élémentaire.} \\
 f(x_j, y_i) \leq 0 & x_j : \text{variables continues physiques (concentrations, débits, volumes).} \\
 g(x_j, y_i) = 0 & f : \text{contrainte inégalités d'existence d'un modèle élémentaire.} \\
 h(x_j) = 0 & g : \text{contrainte égalités sur les débits.} \\
 x \in R, y \in \{0,1\} & h : \text{contrainte égalités sur les bilans de matière.}
 \end{array}$$

Dans ce cas de figure, le problème implique une fonction objectif mono-critère. La concentration imposée de sortie  $C_f$  intervient dans la contrainte égalité qui traduit le bilan sur le nœud de sortie de la superstructure.

## **1.2. RESOLUTION DU MODELE**

### *1.2.1. Stratégie de résolution*

Le modèle est abordé suivant deux approches numériquement différentes. Le modèle 1 comporte des flux de débits fixes entre les RAC. On obtient alors un problème comprenant 10 variables binaires et 28 variables continues, précisées par la suite. Toutefois, l'inconvénient réside dans le fait que les débits entre les RAC sont constants. Cette hypothèse limite l'espace de recherche. Par conséquent un autre modèle est mis au point, comportant des flux de débits variables entre les RAC afin d'augmenter la taille de l'espace de recherche. En étant plus général dans la représentation du problème réel, la formulation résultante fait apparaître également 10 variables binaires, mais cette fois-ci 36 variables continues. Le choix définitif du modèle sera effectué en fonction des résultats trouvés, mais également en évitant aussi d'imposer trop de contraintes dans le modèle choisi, qui pourraient conduire vers des optima locaux.

### *1.2.2. Mise en équations*

Les deux modèles mis en oeuvre ont la même structure (figures 5-3 et 5-4). L'impact de cette différence de formulation sur la résolution numérique du système, concerne le nombre de variables continues, plus important pour le second modèle.

Le modèle de la première approche comporte (figure 5-3) :

- 7 variables de débit : P, E<sub>1</sub>, E<sub>2</sub>, B<sub>1</sub>, B<sub>2</sub>, Q, R
- 8 variables de volume V<sub>k</sub>, k=0,7
- 13 variables de concentration C<sub>j</sub>, j=0,12
- 10 variables binaires Y<sub>i</sub>, i= 0, 9.

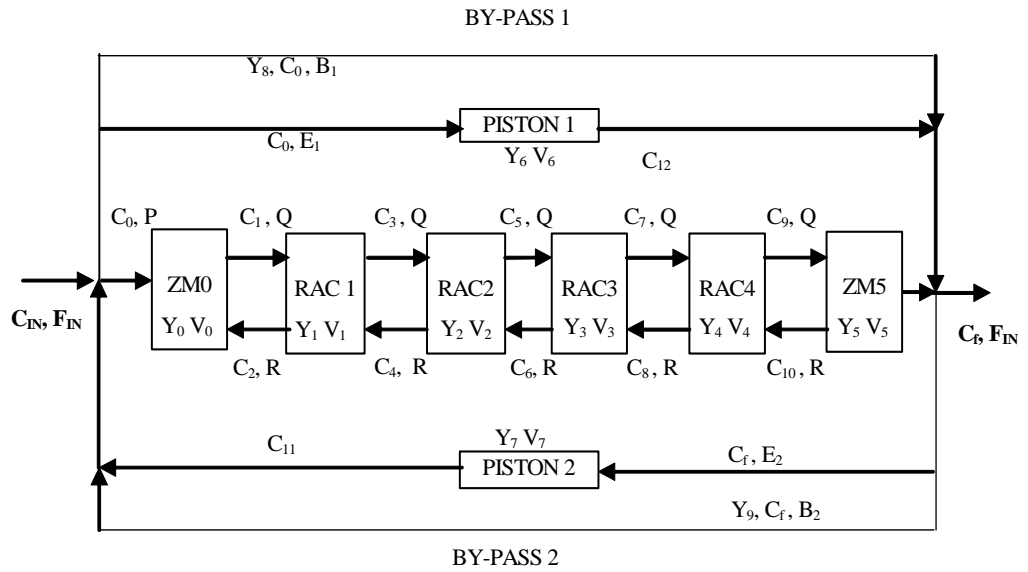


Figure 5-3. Modèle avec flux constants.

Le second modèle comporte (figure 5-4):

- 15 variables de débit : P, E<sub>1</sub>, E<sub>2</sub>, B<sub>1</sub>, B<sub>2</sub>, F<sub>S</sub> (s=1,10).
- 8 variables de volume V<sub>k</sub> (k=0,7)
- 13 variables de concentration C<sub>j</sub> (j=0,12)
- 10 variables binaires y<sub>i</sub> (i=0, 9)

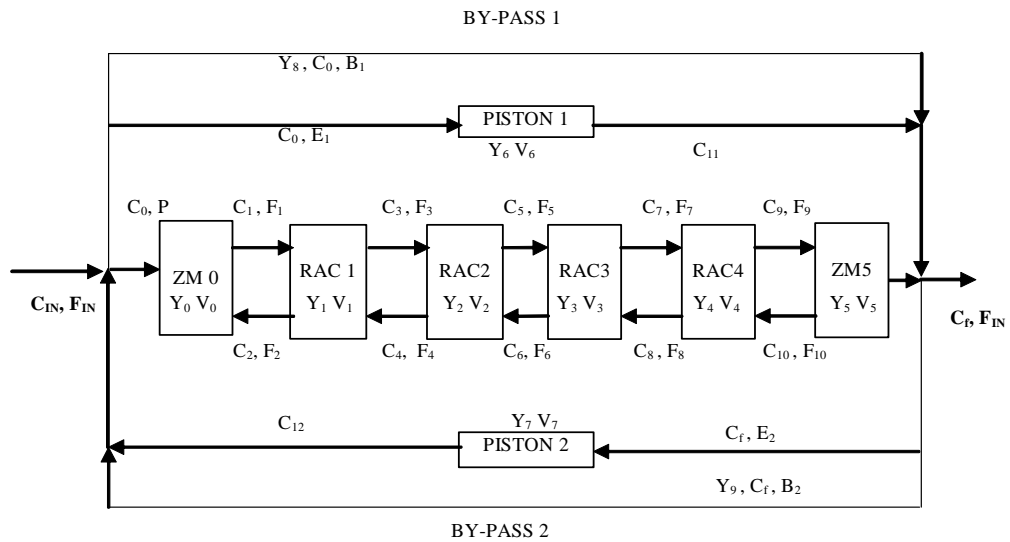


Figure 5-4. Modèle à flux variables.

### 1.3. EQUATIONS DES MODELES

La première formulation correspondant à la figure 5-3 est identique à la structure utilisée par Floquet et al (1989). Il est à souligner que la formulation du modèle à flux fixes correspond à un modèle à flux variables avec certaines simplifications au niveau des variables et conduit à certains changements dans les contraintes.

#### 1.3.1. Modèle à flux fixes

Les variables qui interviennent dans la superstructure de la figure 5-3 ont été listées dans la section précédente. Les équations de modélisation sont présentées dans ce qui suit :

##### Contraintes sur les volumes

$$V_{DEC} = \sum_{i=0}^7 V_i \quad (5-1)$$

$$V_i \leq y_i \cdot V_{DEC} \quad (5-2)$$

(si le RAC n'existe pas alors le volume du RAC est égal à zéro)

##### Equations structurelles

Bilan matière global des nœuds :

$$F_{IN} + B_2 + E_2 = B_1 + P + E_1 \quad (5-3)$$

Bilan de matière partiel du nœud en amont :

$$F_{IN} \cdot C_{IN} + B_2 \cdot C_f + E_2 \cdot C_{12} = (B_1 + P + E_1) \cdot C_0 \quad (5-4)$$

Bilan de matière partiel du nœud en aval:

$$B_1 \cdot C_0 + P \cdot C_{10} + E_1 \cdot C_{12} = (F_{IN} + B_2 + E_2) \cdot C_f \quad (5-5)$$

##### Réacteurs agités continus (exemple RAC 1)

Bilan sur un réacteur parfaitement agité :

$$C_1 \cdot Q + C_4 \cdot R = C_3 \cdot Q + C_2 \cdot R + k \cdot V_1 \cdot C_3 \quad (5-6)$$

Avec la relation donnant la concentration :

$$C_2 = y_1 \cdot C_3 + (1 - y_1) \cdot C_4 \quad (5-7)$$

**Réacteurs piston (exemple réacteur piston 1)**

$$C_{12} = C_0 \cdot \exp\left(-\frac{k \cdot V_6}{E_1}\right) \quad (5-8)$$

**Zones mortes**

$$P = Q - R \quad (5-9)$$

$$C_0 \cdot P + C_2 \cdot R = C_1 \cdot Q \quad (5-10)$$

$$C_{10} \cdot P + C_{10} \cdot R = C_9 \cdot Q \quad (5-11)$$

*1.3.2. Modèle à flux variables*

Mis à part les débits Q et R qui sont remplacés par les débits  $F_s$  ( $s=1,10$ ), les variables intervenant dans la superstructure de la figure 5-4 sont les mêmes que celles du modèle à débits fixes. Les équations de modélisation ne changent pas sauf la partie concernant les réacteurs agités et les zones mortes.

**Réacteurs agités continus (exemple RAC 1)**

$$C_1 \cdot F_1 + C_4 \cdot F_4 = C_2 \cdot F_2 + C_3 \cdot F_3 + k \cdot V_1 \cdot C_3 \quad (5-12)$$

$$F_1 + y_1 \cdot F_4 = F_3 + y_1 \cdot F_2 \quad (5-13)$$

$$(1 - y_1) \cdot F_2 = (1 - y_1) \cdot F_4 \quad (5-14)$$

L'équation (5-14) indique l'égalité des flux dans le cas où le modèle élémentaire du RAC n'existe pas.

Il faut également ajouter la relation donnant la concentration :

$$C_2 = y_1 \cdot C_3 + (1 - y_1) \cdot C_4 \quad (5-15)$$

**Zones mortes**

$$P = F_1 - F_2 = F_9 - F_{10} \quad (5-16)$$

$$C_0 \cdot P + C_2 \cdot F_2 = C_1 \cdot F_1 \quad (5-17)$$

$$C_{10} \cdot P + C_{10} \cdot F_{10} = C_9 \cdot F_9 \quad (5-18)$$

### 1.3.3. Bornes sur les variables continues

Les variables sont bornées de la manière suivante :

$$0 \leq C_j \leq 1 \quad j=0 \text{ à } 12 \quad (5-19)$$

$$0 \leq V_i \leq V_{DEC} \quad i=0 \text{ à } 7 \quad (5-20)$$

$$0 \leq E_1 \leq 2 \cdot y_6 \cdot F_{IN} \quad (5-21)$$

$$0 \leq E_2 \leq y_7 \cdot F_{IN} \quad (5-22)$$

$$0 \leq B_1 \leq 2 \cdot y_8 \cdot F_{IN} \quad (5-23)$$

$$0 \leq B_2 \leq y_9 \cdot F_{IN} \quad (5-24)$$

$$0 \leq P \leq 2 \cdot \left( \sum_{i=0}^5 y_i \right) \cdot F_{IN} \quad (5-25)$$

Ces bornes traduisent le fait que si la variable discrète est nulle (unité absente du modèle), alors la variable continue correspondante sera également nulle. Les bornes supérieures sur les débits E1, E2 et P ont été introduites afin de réduire l'espace de recherche. Dans certaines contraintes apparaît un facteur 2, qui est appliqué pour les flux s'écoulant de l'entrée vers la sortie. Ceci permet de borner les variables de débits suivant un ordre deux fois supérieur à la valeur de débit d'entrée.

## 1.4. RESULTATS ET ANALYSE

Les résultats obtenus par les méthodes *SBB* et *DICOPT++* sont présentés dans les tableaux 5-1 et 5-2 avec les deux modèles, pour différentes valeurs de la concentration de consigne  $C_f$ . Les résultats obtenus précédemment par Floquet et al. (1989) et par Montastruc (2003) sont également rappelés.

Un essai d'analyse de sensibilité lors de l'application des deux solveurs selon l'initialisation des variables a été effectué. Plusieurs cas de figure suivant l'initialisation ont été testés. Cependant, le nombre important de variables ne permet pas de définir une démarche d'initialisation précise mais permet plutôt d'avoir une information générale sur l'influence de ces variables pour l'obtention de solutions.

1.4.1. Modèle à débits constants

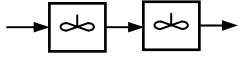
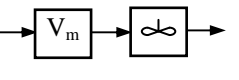
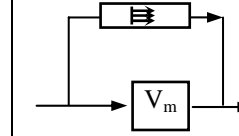
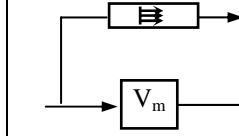
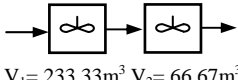
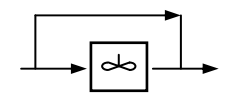
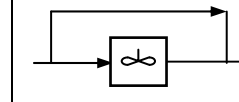
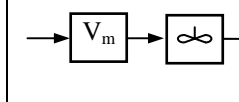
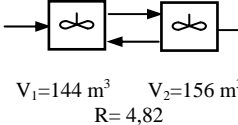
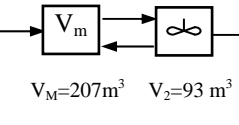
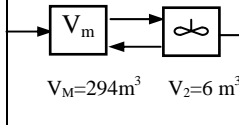
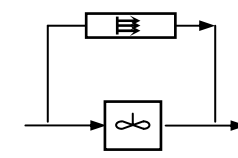
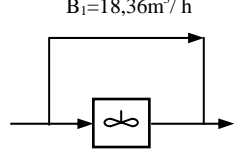
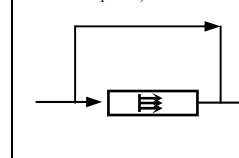
	$C_f=0,18$	$C_f=0,58$	$C_f=0,8$	$C_f=0,98$
<b>SBB</b>	 $V_1=233,33\text{m}^3$ $V_2=66,67\text{m}^3$	 $V_M=227,59\text{m}^3$ $V_2=72,41\text{m}^3$	 $Q=26,74\text{m}^3/\text{h}$ $V_M=261,38\text{m}^3$	 $Q=35,28\text{m}^3/\text{h}$ $V_M=254,90\text{m}^3$
<b>DICOPT++</b>	 $V_1=233,33\text{m}^3$ $V_2=66,67\text{m}^3$	 $B_1=18,42\text{m}^3/\text{h}$ $Q=17,58\text{m}^3/\text{h}$ $C_{12}=0,14\text{mol}/\text{m}^3$ $V_2=300\text{m}^3$	 $B_1=28,29\text{m}^3/\text{h}$ $Q=7,71\text{m}^3/\text{h}$ $V_4=300\text{m}^3$	 $V_M=297,96\text{m}^3$ $V_2=2,04\text{m}^3$
<b>Floquet</b>	 $V_1=144\text{m}^3$ $V_2=156\text{m}^3$ $R=4,82$	 $V_M=207\text{m}^3$ $V_2=93\text{m}^3$	<b>Non traité</b>	 $V_M=294\text{m}^3$ $V_2=6\text{m}^3$
<b>Montastruc</b>	 $Q=14,4\text{m}^3/\text{h}$ $V=150\text{m}^3$	 $B_1=18,36\text{m}^3/\text{h}$ $Q=17,64\text{m}^3/\text{h}$ $V=300\text{m}^3$	 $B_1=28,8\text{m}^3/\text{h}$ $E_1=7,2\text{m}^3/\text{h}$ $V_6=300\text{m}^3$	<b>Non traité</b>

Tableau 5-1. Résultats du modèle à débits fixes.



1.4.2. Modèle à débits variables

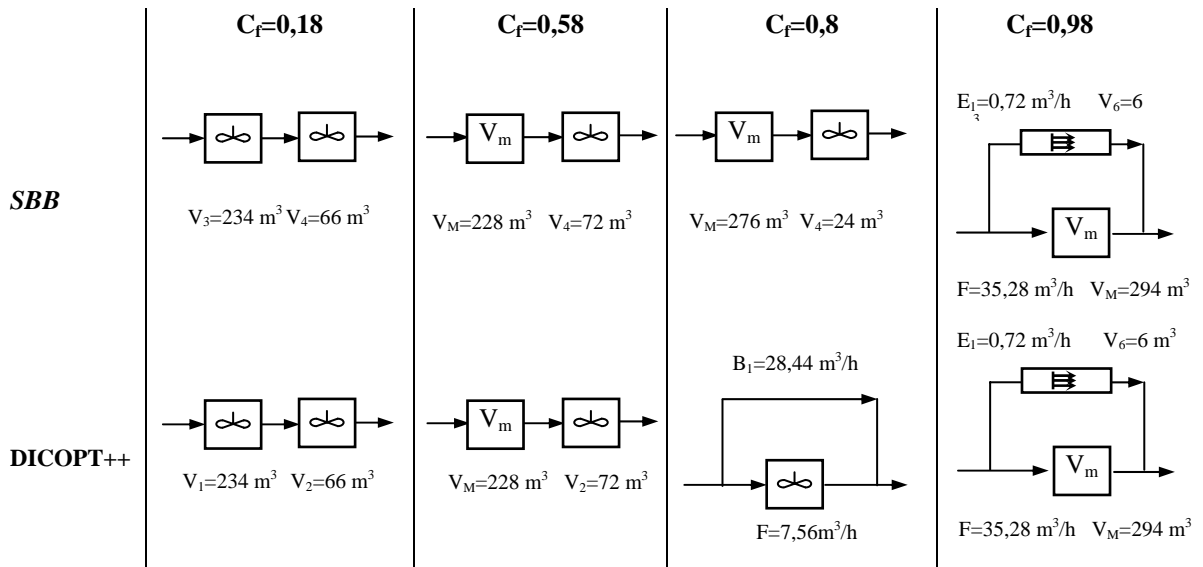


Tableau 5-2. Résultats du modèle à débits variables.

Dans l'ensemble, les structures obtenues présentent le même nombre d'éléments (soit deux réacteurs ou un réacteur et un by-pass), toutes ces structures permettent l'obtention de la même concentration de consigne  $C_f$  initialement imposée. Ainsi, pour chaque concentration, les quatre procédures conduisent à des résultats relativement différents, tout en présentant des caractéristiques voisines.

Dans les quatre cas, à partir de la concentration  $C_f=0,58$ , on constate l'apparition d'une zone morte ou d'un by-pass combiné à un RAC ou un réacteur piston. Le volume de la zone morte ou le débit traversant le by pass augmente avec la concentration, ce qui est normal, car en imposant une concentration de sortie de plus en plus importante par rapport aux impuretés, le procédé de décantation devient de moins en moins performant, fruit d'un petit volume réactionnel et de ce fait, d'un volume mort important ou d'un débit élevé de by-pass.

Les résultats de *SBB* et *DICOPT++* sont très voisins et assez similaires à ceux de Floquet et al. (1989), car dans les trois cas, une procédure déterministe est mise en œuvre, contrairement à Montastruc (2003), qui utilise une méthode hybride, et qui obtient des résultats assez différents.

Signalons que les résultats obtenus lors de l'utilisation du solveur *DICOPT++* peuvent varier dans certains cas suivant l'initialisation des variables, compte tenu de l'existence d'optima locaux dus probablement à des domaines non convexes.

Le modèle et la formulation du problème du bassin de décantation proviennent de la littérature, les résultats obtenus montrent que pour ce problème l'identification de modèles impliqués peut être traitée au sein de l'environnement *GAMS*. Bien qu'il soit délicat de statuer théoriquement sur l'efficacité de *SBB* et de *DICOPT++*, une initialisation partielle des variables est nécessaire pour *DICOPT++* et non pour *SBB*. L'utilisation de ce dernier se révèle ainsi préférable en première analyse pour traiter le problème d'identification de modèles.

## **2. MODELISATION ET OPTIMISATION D'UN REACTEUR EN LIT FLUIDISE DE DEPHOSPHATATION D'EFFLUENTS AQUEUX**

Au cours des dernières décennies, le développement de l'industrie et de l'économie a connu un essor, mais dans la plupart des cas, sans tenir compte de l'impact environnemental. Ainsi, la pollution est devenue un souci majeur pour différents pays, compte tenu de la gravité des problèmes induits sur la faune et la flore, et du coût toujours croissant des traitements pour y faire face.

Parmi les problèmes liés à la pollution, la contamination des eaux suite aux rejets de phosphore, principalement dûs aux activités agricoles et industrielles, crée le phénomène d'eutrophisation des eaux. La mise en place de la directive européenne de 1991 imposant des normes de rejet de plus en plus sévères est considérée comme un facteur clé de la lutte contre la l'eutrophisation des rivières et des lacs.

### **2.1. TRAVAUX ANTERIEURS**

Afin d'améliorer la récupération du phosphore des eaux usées, plusieurs procédés de récupération du phosphate (Morse et al., 1998) ont été mis en place. Selon les ions présents, deux types de réactions peuvent s'y produire. Si les ions sont l'ammonium ou le magnésium, le précipité formé est constitué principalement de struvite. Si ces ions sont remplacés par le calcium, la formation de différents phosphates est observée.

Plusieurs dispositifs sont utilisés pour la déphosphatation de rejets aqueux par précipitation des phosphates de calcium. Une alternative intéressante reposant sur l'utilisation d'un lit fluidisé a été initialement introduite par Seckler et al. (1996).

Les études effectuées par Monstastruc et al. (2004), basées sur différents travaux antérieurs réalisés au sein du Laboratoire de Génie Chimique (Boukhtouche, 2000 ; Bernard, 1999) l'ont orienté vers le choix d'un lit de sable fluidisé. Au cours de ces études, un procédé de récupération par précipitation de phosphates de calcium en lit fluidisé a été développé. L'objectif était la mise en place d'une méthodologie conduisant à la construction d'un pilote automatisé optimal pour traiter des débits de l'ordre de  $0,1 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$  de rejets aqueux synthétiques ( $[\text{P}]_{\text{in}}=50 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ ).

Une procédure découplant les phénomènes physiques présents, précipitation et enrobage, a été mise en œuvre suivant deux niveaux de modélisation présentés dans la figure 5-5.

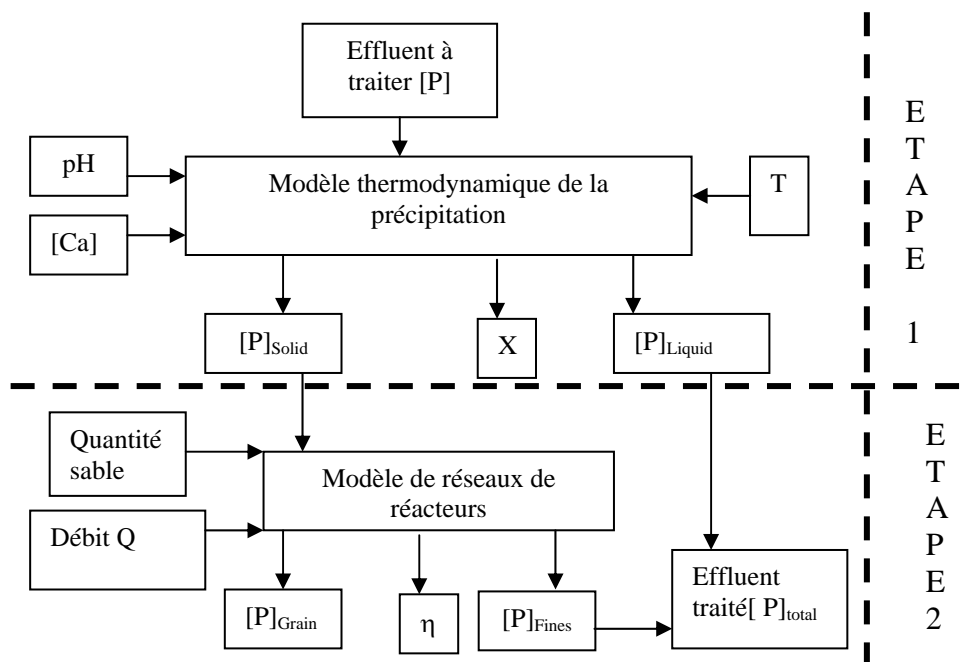


Figure 5-5. Modélisation à deux niveaux pour le lit fluidisé de déphosphatation.

Le premier niveau de modélisation concerne la détermination du taux de conversion du phosphate. Il est basé sur la prédiction de l'équilibre du système d'étude  $\text{Ca-PO}_4\text{-H}_2\text{O}$ . Les détails du modèle thermodynamique de prédiction du taux de conversion du phosphate ne seront pas rappelés mais, il est souligné que ce modèle a été validé à partir de résultats de la littérature, puis expérimentalement par Montastruc (2003).

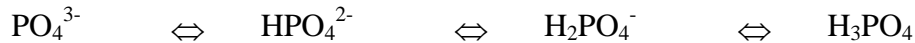
Le second niveau consiste en la détermination de l'efficacité du procédé en fonction du taux de conversion, de la masse de sable et des conditions hydrodynamiques du lit. Il est important de remarquer qu'un calcul phénoménologique n'est pas de mise car il impliquerait des connaissances précises d'un nombre conséquent de paramètres clés inclus dans le processus d'agglomération. Une autre alternative identique à celle utilisée dans l'exemple du

bassin de décantation a été choisie, à savoir que l'efficacité est calculée en assimilant le lit fluidisé à un réseau de réacteurs idéaux avec une cinétique d'enrobage du 1<sup>er</sup> ordre. Comme dans le cas précédent, la superstructure générée comporte une combinaison de cellules élémentaires représentant des écoulements idéaux (réacteurs parfaitement agités, réacteurs pistons, by-pass, recyclages et volumes morts). Le réseau optimal extrait de cette superstructure est celui qui représente au plus près le comportement du réacteur, et est défini en termes de nombre de cellules de volumes et de débits associés, de concentrations d'entrée, de volume total de réacteur et de concentration de sortie.

Le paragraphe suivant décrit le principe du procédé de déphosphatation utilisé.

### *2.1.1. Description du procédé de déphosphatation*

Le procédé est basé sur la précipitation du phosphate de calcium obtenu par mélange d'une solution phosphatée avec des ions calcium et une base forte (Seckler et al. 1996 ; Van Dijk et al., 1984 et Eggers et al., 1991). Cette base permet de déplacer l'équilibre chimique de l'acide orthophosphorique selon le schéma suivant :



Le procédé est constitué d'un lit fluidisé de sable représenté de façon schématique sur la figure 5-6 est comparable à l'appareil proposé par Seckler et al. (1996). Les alimentations continues en solution sont composées, d'une part, d'eau phosphatée et, d'autre part, des deux réactifs, à savoir les ions calciques et la base, afin de contrôler le pH. Le phosphate de calcium précipite à la surface des grains de sable et les recouvre. En fonctionnement, la présence de fines sortant du lit est, en général, observée : l'efficacité du lit est alors directement liée à la quantité de fines s'échappant du lit. Le pilote doit traiter des débits de rejet assurant la fluidisation du lit de sable.

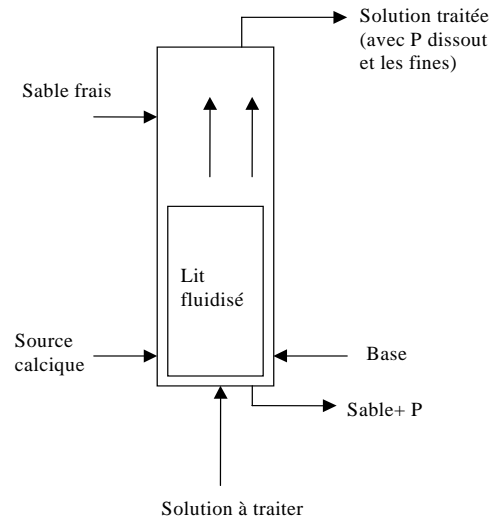


Figure 5-6. Représentation schématique du lit fluidisé.

Les différents choix du problème, tels que : matériau de croissance, effluent synthétique à traiter et les sources en calcium et base sont décrits dans Monstastruc (2003).

### 2.1.2. Observations expérimentales

Le procédé comporte un lit fluidisé constitué de sable alimenté par des solutions aqueuses. Le phosphate de calcium précipite au niveau de la surface supérieure des grains de sable, dans le même temps, les petites particules appelées 'fines' quittent le lit. L'agglomération de fines entre elles est négligeable et sont emportées lorsque la vitesse ascensionnelle est trop importante.

Deux différents régimes sont expérimentalement observés (voir figure 5-7). Dans le cas où la vitesse de fluidisation est élevée ( $>90$  L/h) (porosité du lit de l'ordre de 0,6), une seule zone est observée à la sortie du lit fluidisé : les fines sont extraites avec l'effluent liquide. L'efficacité du procédé est alors due essentiellement à l'enrobage des fines sur les grains de sable. Le résultat de l'enrobage selon Mersmann (1994) est la conséquence de deux phénomènes antagonistes, agglomération et abrasion. D'une part, l'agglomération favorisée à vitesse de fluidisation élevée, correspond à des fréquences de collisions beaucoup plus nombreuses, lesquelles sont aussi cause d'abrasion. D'autre part, lorsque la vitesse de fluidisation est faible ( $<50$  L/h), une nouvelle zone apparaît au-dessus du lit où les fines stagnent et s'agglomèrent entre elles. La forme en strates de ces agglomérats et leur taille font qu'ils restent à la surface du lit fluidisé (cf. figure 5-7). En revanche, dans le lit, les fines recouvrent totalement les grains de sable et constituent des particules de structures complexes et plus volumineuses (figure 5-8).

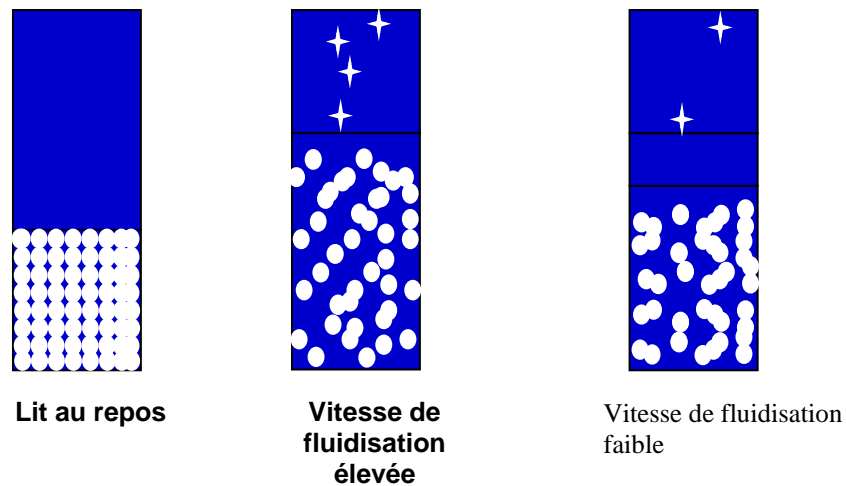


Figure 5-7. Schématisation des phénomènes observés dans la colonne.



Figure 5-8. Fines s'agglomérant au-dessus du lit.

### 2.1.3. Méthode de résolution utilisée

Le second niveau de modélisation, selon le schéma de la figure 5-5, consiste en la détermination de l'efficacité du procédé en fonction du taux de conversion, de la masse de sable et des conditions hydrodynamiques du lit. Une approche identique à celle utilisée dans l'exemple du bassin de décantation a été mise en oeuvre, c'est-à-dire que l'efficacité est calculée en assimilant le lit fluidisé à un réseau de réacteurs idéaux, qui doit être identifié au sein d'une superstructure.

Dans l'étude de Montastruc, la recherche du réseau optimal de réacteurs au sein de la superstructure est effectuée selon une démarche impliquant une procédure stochastique (recuit simulé ou algorithme génétique), au niveau supérieur (problème maître). A chaque résolution du problème maître, la procédure stochastique extrait un réseau particulier au sein de la superstructure. Puis, la structure du réseau est optimisée à un niveau inférieur (problème esclave) par une méthode de programmation quadratique successive (SQP). Bien que toutes les solutions proposées par la méthode stochastique soient faisables, outre la difficulté d'initialisation abordée ci-après, un des inconvénients de cette approche réside dans la dimension du problème continu qui est variable, car dépendante de la structure proposée. Le schéma de la démarche est rappelé dans la figure 5-9.

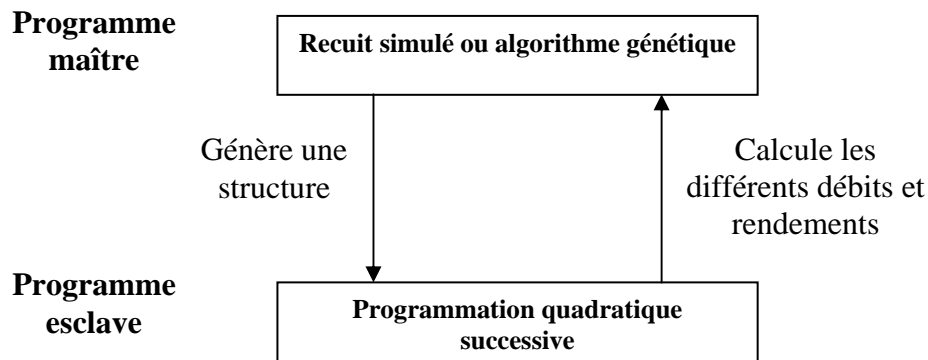


Figure 5-9. Méthodologie d'identification de modèles.

L'autre difficulté de cette approche réside dans l'initialisation de la procédure SQP à chaque solution proposée par le recuit simulé, ce qui conduit dans certains cas à des solutions de mauvaise qualité. Pour des cas simples, plusieurs bonnes solutions peuvent être trouvées ; par contre, pour des cas plus complexes induisant de fortes bilinéarités par exemple, les résultats dépendent fortement de l'initialisation des variables utilisées.

En reprenant l'étude, afin de pallier aux difficultés d'initialisation rencontrées par Montastruc, le problème est traité avec l'environnement *GAMS* et les solveurs *DICOPT++* et *SBB*. Ceci doit permettre dans un premier temps de tester les capacités des solveurs de *GAMS* à résoudre des problèmes de taille conséquentes, et dans une seconde phase de proposer le choix du solveur le plus adéquat.

Afin d'effectuer une étude numérique complète, le problème sera traité avec plusieurs fonctions objectifs.

Cette étude s'inscrit dans la continuité des travaux antérieurs effectués au sein de l'équipe par Laquerbe (1999) et Montastruc (2003) et vise à surmonter les difficultés signalées par ces auteurs, en particulier en ce qui concerne l'initialisation des variables et le traitement de certains types de contraintes, en particulier bilinéaires.

Le paragraphe suivant présente la modélisation du lit fluidisé effectuée dans l'environnement *GAMS*. Les équations utilisées seront présentées dans un premier temps, puis les données du problème ainsi que les différentes fonctions objectifs utilisées, seront décrites.

## 2.2. MODELISATION DU LIT FLUIDISE

Dans un premier temps, afin d'effectuer des comparaisons avec l'étude précédente de Montastruc (2004), la même superstructure est conservée. Puis, dans un second temps, des essais avec des structures plus complexes seront présentés. Ceci doit permettre d'affiner éventuellement la qualité de la solution optimale et surtout de vérifier si le choix de la superstructure initiale est pertinent vis-à-vis du problème considéré.

Dans la superstructure utilisée en premier lieu, les réacteurs piston présents dans la modélisation du bassin de décantation sont remplacés par une série de quatre RAC afin de rendre l'application de la méthode numérique plus facile (quatre réacteurs agités continus en série ont le même effet qu'un réacteur piston).

La superstructure représentée sur la figure 5-10 comporte un volume mort  $V_1$ , un by-pass (flux numéro 15), un recyclage (flux numéro 2), et 12 RAC de volume  $V_2$  à  $V_{13}$ . Comme dans les exemples précédents, les variables binaires du problème MINLP représentent l'existence ou l'absence des unités élémentaires. La structure comporte 15 éléments binaires, ce qui offre une combinatoire assez élevée ( $2^{15}=32768$  combinaisons). Cette superstructure conduit aux équations explicitées ci-après. Dans les différentes expressions,  $V_i$  représentent les volumes des réacteurs,  $F_i$  les débits totaux,  $C_i$  les concentrations molaires en fines et  $y_i$  la présence ou non de l'élément. La superstructure est représentée avec ses notations.

$$\text{Contraintes sur les volumes } \sum_{i=1}^{13} V_i = V_{total} \quad (5-26)$$

$$V_i \leq y_i V_{tot} \quad (5-27)$$



### Equations structurelles

Contraintes sur le nœud amont

$$F_0 + F_{10} + F_{12} + F_{13} = F_1 + F_{11} + F_{14} \quad (5-28)$$

$$C_0 F_0 + C_9 F_{10} + C_{17} F_{12} + C_f F_{13} = (F_1 + F_{11} + F_{14}) C_1 \quad (5-29)$$

Contraintes sur le nœud aval

$$F_5 + F_{11} + F_{14} = F_6 + F_{12} + F_{13} + F_0 \quad (5-30)$$

$$C_5 F_5 + C_{13} F_{11} + C_1 F_{14} = (F_6 + F_{12} + F_{13} + F_0) C_{out} \quad (5-31)$$

Bilan sur les réacteurs 7, 8, 9 et 10 : (exemple réacteur 7)

entrée – sortie = réaction

$$C_1 F_1 + C_8 F_9 = C_2 F_2 + C_9 F_{10} + k V_6 C_2 \quad (5-32)$$

$$F_1 + y_7 F_9 = F_2 + y_7 F_{10} \quad (5-33)$$

$$(1 - y_7) F_9 = (1 - y_7) F_{10} \quad (5-34)$$

Soit l'écriture de 12 bilans partiels, car on ne peut écrire des équations de bilan partiel sur les réacteurs n'ayant pas de recirculation.

Il faut ajouter à ces équations de bilans, les équations d'existence :

$$C_9 = y_7 C_2 + (1 - y_7) C_8 \quad (5-35)$$

$$C_8 = y_8 C_3 + (1 - y_8) C_7 \quad (5-36)$$

$$C_7 = y_9 C_4 + (1 - y_9) C_6 \quad (5-37)$$

$$C_6 = y_{10} C_5 + (1 - y_{10}) C_f \quad (5-38)$$

Bilan sur les réacteurs 3, 4, 5, 6, 11, 12, 13 et 14 (exemple réacteur 3) :

$$C_{16} F_{12} = C_{17} F_{12} + k V_2 C_{17} \quad (5-39)$$

Des contraintes sur les flux de débit sont ajoutées, permettant ainsi d'annuler le débit dans le cas où le RAC n'existe pas. Bien sûr, on peut obtenir l'existence d'un RAC ( $y=1$ ) avec un volume nul mais la minimisation du nombre de RAC dans la fonction objectif permet de minimiser le nombre de flux.

$$F_{14} \leq 2 y_{15} F_0 \quad (5-40)$$

$$F_{13} \leq y_2 F_0 \quad (5-41)$$

$$F_{11} \leq 2 (y_{11} + y_{12} + y_{13} + y_{14}) F_0 \quad (5-42)$$

$$F_{12} \leq (y_3 + y_4 + y_5 + y_6) F_0 \quad (5-43)$$

$$F_1 - F_{10} \leq 2(y_7 + y_8 + y_9 + y_{10}) F_0 \quad (5-44)$$

Les équations (5-40) à (5-44) permettent de réduire l'espace de recherche et de définir des contraintes impliquant l'existence d'un flux de débit suivant les variables discrètes représentant l'existence le modules élémentaires. Un facteur 2 est introduit pour les flux de débits traversant la superstructure de l'entrée vers la sortie pour permettre de limiter l'espace de recherche et borner ainsi les variables de débits.

Le système à résoudre comporte alors des :

Contraintes linéaires :

- 14 équations sur les volumes (5-26 et 5-27)
- 8 équations de bilan total sur les réacteurs (5-39)
- 2 équations de bilan total sur les nœuds (5-28 et 5-30)
- 4 équations sur les concentrations (5-35 à 5-38)
- 5 équations sur les flux de débits. (5-40 à 5-44)

Contraintes bi-linéaires :

- 2 équations de bilan partiel sur les nœuds (5-29 et 5-31)
- 12 équations de bilan partiel sur les réacteurs (5-32 à 5-34)

Variables bornées :

- 13 variables de volumes
- 14 débits
- 17 concentrations

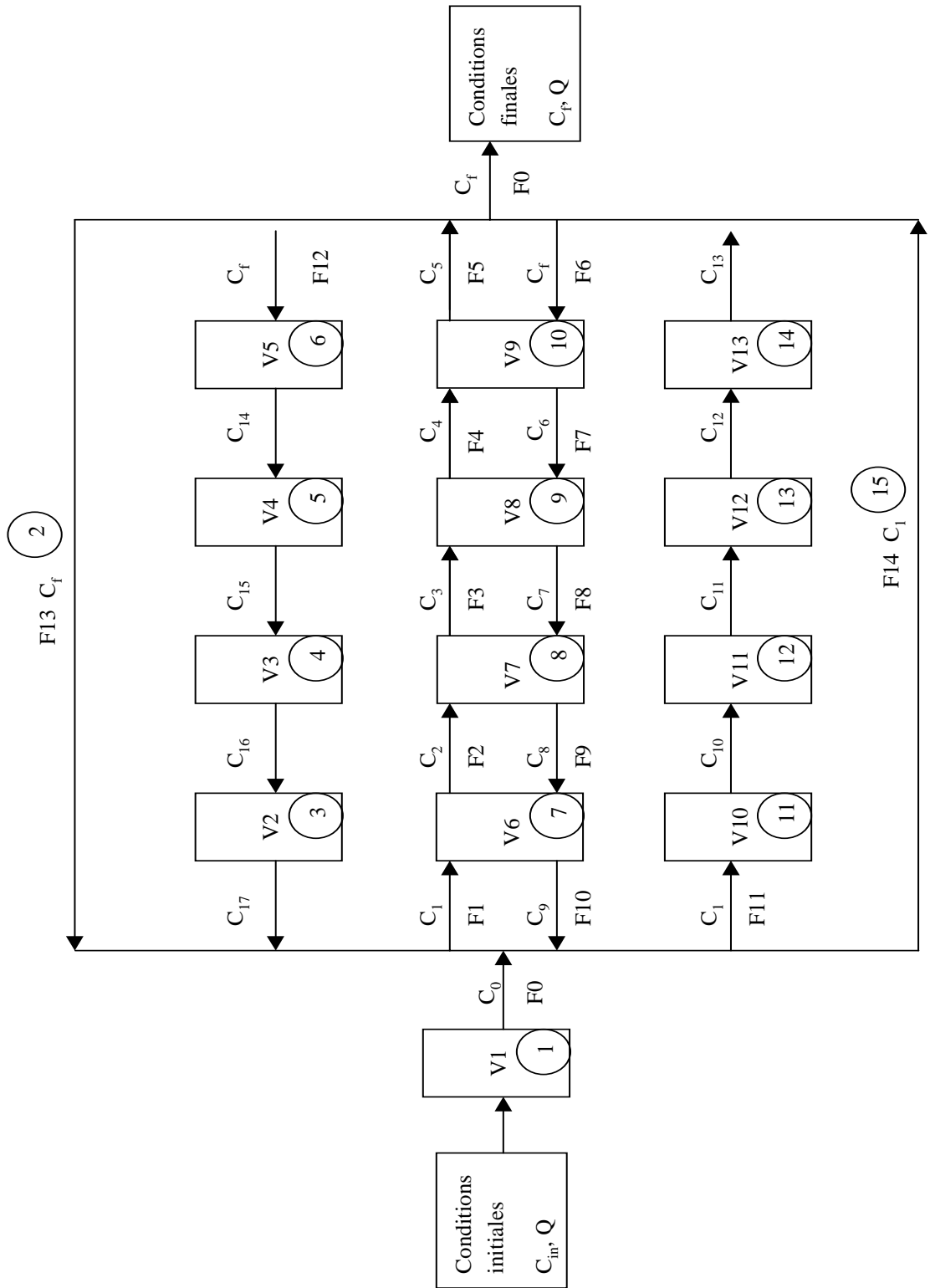


Figure 5-10. Superstructure ne comportant que des réacteurs agités continus.

Les données du problème et les démarches de résolution sont présentées dans le paragraphe suivant.

### **2.3. DONNÉES DU PROBLÈME ET RÉOLUTION**

En fonction des résultats expérimentaux et du modèle thermodynamique utilisé, trois cas de figure, selon la valeur du débit initial, se présentent.

Cas N°1 : structure pour un débit faible ( $F_0 = 50$  l/h)

Cas N°2 : structure pour un débit fort ( $F_0 = 90$  l/h)

Cas N°3 : même structure pouvant traiter les deux débits

Les données correspondantes aux résultats obtenus par le modèle de l'étape 1 présentée dans le paragraphe 2.1, suivant les valeurs des débits sont définies ci-dessous.

Pour le cas d'un débit faible (50 l/h), la concentration initiale à l'entrée  $C_0$  est de 1 mol/l, la concentration de sortie  $C_f$  est de 0,258 mol/l, la valeur du taux d'agglomération  $K$  est de 91  $h^{-1}$  et le volume total est 1,3 l.

Pour le cas d'un débit fort (90 l/h), la concentration initiale à l'entrée  $C_0$  est de 1 mol/l, la concentration de sortie  $C_f$  est de 0,477 mol/l, la valeur du taux d'agglomération  $K$  est de 68,5  $h^{-1}$  et le volume total est 1,9 l.

Afin de valider la démarche de résolution avec les deux solveurs, le choix d'utiliser plusieurs fonctions objectif s'est avéré nécessaire. Deux démarches de résolution distinctes sont appliquées selon les cas traités. La première est utilisée pour les deux premiers cas de débits considérés séparément, alors que la seconde est mise en œuvre pour le dernier cas comprenant les deux débits simultanément.

#### *2.3.1. Initialisation des variables*

Malgré le nombre important de publications impliquant la résolution de problèmes MINLP avec *GAMS*, il n'existe pas d'étude particulière concernant l'initialisation des variables. Il est clair qu'une bonne initialisation pour un problème donné conduit plus facilement à l'obtention d'une solution optimale. Mais, vu le manque d'information et la complexité des problèmes, seules les orientations fournies par le guide d'utilisation des solveurs (*GAMS*, 2004) peuvent être considérées.

Pour le solveur *DICOPT++*, un ensemble de tests effectués sur les différents problèmes traités précédemment a permis de constater qu'une résolution sans initialisation est fortement déconseillée, car le solveur effectuera automatiquement une initialisation des variables avec une valeur égale à 0.

De ce fait, pour *DICOPT++*, dont la méthodologie de résolution implique une méthode itérative, on a entrepris d'initialiser les variables en distinguant leur nature, continue ou discrète.

Pour confirmer la nécessité d'initialiser des variables lors de l'utilisation du solveur *DICOPT++*, une étude préliminaire effectuée sans aucune initialisation a conduit à des résultats de qualité médiocre. Ainsi, en se fondant sur les constats rapportés lors de l'étude du bassin de décantation, une autre étude a été menée en initialisant les variables discrètes et les variables de volumes.

Pour le solveur *SBB*, les études effectuées antérieurement ont permis de constater la faible influence de l'initialisation sur la démarche de résolution. Toutefois, il est évident qu'une 'bonne' initialisation favorisera la recherche, par rapport à une absence totale d'initialisation. Ainsi, mis à part les variables de concentration, toutes les autres ont été initialisées. Ce choix provient du fait que les variables de concentration sont des variables dépendant de débits et de volumes.

Le paragraphe suivant présente les différentes fonctions objectif utilisées suivant les cas traités.

### 2.3.2. Démarche 1

Pour les deux premiers cas considérés séparément, le problème est résolu pour les fonctions objectifs suivantes :

$$1) \min (F) = \sum_{i=1}^{15} Y_i \quad (5-45)$$

Avec les concentrations de sortie des deux cas introduites comme des contraintes égalités. L'optimisation de la structure est effectuée en minimisant le nombre de modèles élémentaires, en considérant que la concentration de sortie du modèle est fixe et égale à la concentration expérimentale.

$$2) \min (F) = (C_{f,\text{mod}} - C_{f,\text{exp}})^2 \quad (5-46)$$

$C_{f,\text{mod}}$  (respectivement  $C_{f,\text{exp}}$ ) représentent la concentration de sortie fournies par le modèle (respectivement la concentration expérimentale). Dans ce cas, l'optimisation est effectuée sur la concentration.

$$3) \min (F) = (C_{f,\text{mod}} - C_{f,\text{exp}})^2 + \rho \sum_{i=1}^{15} Y_i \quad (5-47)$$

Le problème consiste à minimiser le carré de l'écart entre la valeur de la concentration de sortie  $C_{f,\text{mod}}$  obtenue par le modèle et la valeur mesurée  $C_{f,\text{exp}}$ . Une pénalité sur le critère permet de minimiser à la fois l'écart modèle-mesure et la complexité du modèle en équilibrant les ordres de grandeur des deux termes à l'aide d'un facteur de pénalité  $\rho$ . Cette démarche constitue le point fondamental de la méthodologie proposée en recherchant le modèle le plus simple qui satisfait aussi à la concentration de sortie.

### 2.3.3. Démarche 2

Cette démarche s'applique au cas où les deux débits sont traités en même temps. Le but est d'extraire à partir de la superstructure le modèle qui se rapproche au mieux des deux concentrations expérimentales. Dans ce cas, la première fonction objectif utilisée lors de la démarche précédente ne peut être appliquée, car un conflit au niveau des contraintes de bilans risque d'être généré. En effet, le bilan ne peut être satisfait pour deux concentrations différentes de sorties fixées. Le problème est donc résolu suivant les fonctions objectif suivantes :

$$1) \min (F) = (C_{f,\text{mod}} - C_{f,\text{exp}})^2_{\text{cas 1}} + (C_{f,\text{mod}} - C_{f,\text{exp}})^2_{\text{cas 2}} \quad (5-48)$$

Cette fonction objectif consiste à optimiser la superstructure en prenant en considération la minimisation de l'écart quadratique de la concentration du modèle pour les deux cas de débits simultanés.

$$2) \min (F) = (C_{f,\text{mod}} - C_{f,\text{exp}})^2_{\text{case 1}} + (C_{f,\text{mod}} - C_{f,\text{exp}})^2_{\text{case 2}} + \rho \sum_{i=1}^{15} y_i \quad (5-49)$$

Pour le second critère, on traite un problème plus général que pour le premier, car on ajoute un terme qui tient compte de la complexité de la structure proposée.

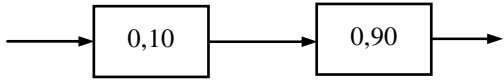
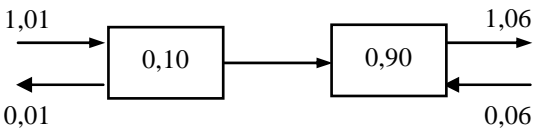
### 2.3.4. Résultats numériques

Les résultats de l'utilisation de *DICOPT++* sans initialisation des variables a permis de constater que peu de solutions étaient obtenues, sauf dans les cas simples (cas 1 et 2), le plus souvent, le solveur n'arrive même pas à résoudre le problème relaxé qui constitue l'étape préliminaire de résolution du problème où les contraintes sont relaxées.

Etant donné que la superstructure ne comporte que des RAC, afin de simplifier la présentation des résultats, le pictogramme représentant les RAC ne sera pas utilisé dans l'édition des résultats, il sera remplacé par un rectangle comportant le volume relatif du RAC et les flux de débits. L'écart quadratique (E.Q.) entre la concentration de référence et la concentration du modèle, déterminée par l'optimisation est indiqué pour chaque cas.

Les résultats obtenus pour les trois cas de flux de débits ainsi que pour l'ensemble des fonctions objectifs suivant les deux solveurs utilisés sont présentés dans les tableaux suivants.

#### 2.3.4.1. Résultats cas 1 (débit faible)

Fonction objectif	
$\sum_{i=1}^{15} y_i$	
<p><b>SBB</b></p>  <p><math>(C_{f,mod} - C_{f,exp})^2 = 0</math></p>	<p><b>DICOPT++</b></p>  <p><math>(C_{f,mod} - C_{f,exp})^2 = 0</math></p>

**Tableau 5-3. Résultats cas 1 suivant la première fonction objectif.**

Fonction objectif	
$(C_{f,\text{mod}} - C_{f,\text{exp}})^2$	
<p><b>SBB</b></p> <p style="text-align: center;"><math>(C_{f,\text{mod}} - C_{f,\text{exp}})^2 = 0</math></p>	<p><b>DICOPT++</b></p> <p style="text-align: center;">Structure non optimale</p>

Tableau 5-4. Résultats cas 1 suivant la seconde fonction objectif.

Fonction objectif	
$(C_{f,\text{mod}} - C_{f,\text{exp}})^2 + \rho \sum_{i=1}^{15} y_i$	
<p><b>SBB</b></p> <p style="text-align: center;"><math>(C_{f,\text{mod}} - C_{f,\text{exp}})^2 = 0</math></p>	<p><b>DICOPT++</b></p> <p style="text-align: center;"><math>(C_{f,\text{mod}} - C_{f,\text{exp}})^2 = 0</math></p>
Résultat antérieur (Montastruc (AG/QP))	
<p style="text-align: center;"><math>(C_{f,\text{mod}} - C_{f,\text{exp}})^2 = 1 e - 20</math></p>	

Tableau 5-5. Résultats cas 1 suivant la troisième fonction objectif comparés avec résultat de Montastruc.



2.3.4.2. Résultats Cas 2 débit fort

Fonction objectif	
$\sum_{i=1}^{15} y_i$	
<p><b>SBB</b></p> <p><math>(C_{f,mod} - C_{f,exp})^2 = 6,6 e - 21</math></p>	<p><b>DICOPT++</b></p> <p><math>(C_{f,mod} - C_{f,exp})^2 = 4,1 e - 22</math></p>

Tableau 5-6. Résultats cas 2 suivant la première fonction objectif.

Fonction objectif	
$(C_{f,mod} - C_{f,exp})^2$	
<p><b>SBB</b></p> <p><math>(C_{f,mod} - C_{f,exp})^2 = 5,36 e - 23</math></p>	<p><b>DICOPT++</b></p> <p><math>(C_{f,mod} - C_{f,exp})^2 = 4,1 e - 22</math></p>

Tableau 5-7. Résultats cas 2 suivant la seconde fonction objectif.

Fonction objectif	
$(C_{f, \text{mod}} - C_{f, \text{exp}})^2 + \rho \sum_{i=1}^{15} y_i$	
<p><b>SBB</b></p> <p><math>(C_{f, \text{mod}} - C_{f, \text{exp}})^2 = 2,5 e - 21</math></p>	<p><b>DICOPT++</b></p> <p><math>(C_{f, \text{mod}} - C_{f, \text{exp}})^2 = 1 e - 19</math></p>
<b>Résultat antérieur (Montastruc (AG/QP))</b>	
<p><math>(C_{f, \text{mod}} - C_{f, \text{exp}})^2 = 1 e - 20</math></p>	

Tableau 5-8. Résultats cas 1 suivant la première fonction objectif et résultat de Montastruc.

### 2.3.4.3. Résultats CAS 3 deux débits simultanés

Dans la présentation des résultats, la notation a/b indique que la valeur a est relative à la concentration du débit faible, et la valeur b, à la concentration du débit fort.

Fonction objectif	
$(C_{f, \text{mod}} - C_{f, \text{exp}})^2_{\text{cas 1}} + (C_{f, \text{mod}} - C_{f, \text{exp}})^2_{\text{cas 2}}$	
<b>SBB</b>	
<p><math>(C_{f, \text{mod}} - C_{f, \text{exp}})_{\text{cas 1}}^2 = 8,6 e - 04</math>      <math>(C_{f, \text{mod}} - C_{f, \text{exp}})_{\text{cas 2}}^2 = 9,6 e - 04</math></p>	
<b>DICOPT++</b>	
Structure non optimale	

Tableau 5-9. Résultats cas 3 suivant la première fonction objectif.

<p><b>Fonction objectif</b></p> $(C_{f,mod} - C_{f,exp})_{cas1}^2 + (C_{f,mod} - C_{f,exp})_{cas2}^2 + \rho \sum_{i=1}^{15} y_i$ <p><b>SBB</b></p>	
$(C_{out,mod} - C_{out,exp})_{cas1}^2 = 8,6 e - 04$	$(C_{out,mod} - C_{out,exp})_{cas2}^2 = 9,6 e - 04$
<p><b>DICOPT++</b></p>	
$(C_{f,mod} - C_{f,exp})_{cas1}^2 = 1e - 03$	$(C_{f,mod} - C_{f,exp})_{cas2}^2 = 1e - 03$
<p><b>Résultat antérieur (Montastruc (AG/QP))</b></p>	
$(C_{f,mod} - C_{f,exp})_{cas2}^2 = 5,9 e - 03$	$(C_{f,mod} - C_{f,exp})_{cas2}^2 = 7,8 e - 04$

Tableau 5-10. Résultats cas 3 suivant la seconde fonction objectif et de Montastruc.

### 2.3.5. Analyse des résultats

Dans le cas 1 (débit faible), les résultats obtenus par le solveur *DICOPT++* suivant la première et la troisième fonction objectif sont proches de ceux obtenus par *SBB*. Pour la deuxième fonction objectif, *DICOPT++* fournit une solution non optimale (le nombre de modules élémentaires est supérieur ou égal à 5). Cette différence peut être expliquée par l'initialisation des variables, qui devient prépondérant pour ce type de problème impliquant souvent des interactions lourdes au niveau des variables.

Dans le cas 2 (débit fort), bien que les résultats obtenus soient différents vis-à-vis des structures trouvées, ils sont équivalents au niveau de la valeur des fonctions objectifs.

Pour les deux cas, le nombre de structures élémentaires n'excède pas deux. On peut penser à juste titre que le problème comprend plusieurs optima car plusieurs modèles, incluant le même nombre de modules élémentaires et conduisant à la même concentration de sortie, sont identifiés.

La même remarque peut être étendue à l'utilisation de *DICOPT++*, pour lequel les solutions obtenues varient suivant l'initialisation des variables (particulièrement pour les variables discrètes). Ce constat constitue un obstacle important car, compte tenu du nombre élevé de variables utilisées, il serait difficile d'effectuer un plan d'expériences pour distinguer les variables les plus influentes sur le choix de la solution optimale.

D'après les résultats présentés dans les tableaux 5-5 et 5-8 concernant les structures obtenues par *Montastruc* dans les cas 1 et 2, la démarche hybride utilisée génère des solutions assez différentes de celles données par *GAMS* avec des temps de calcul nettement plus élevés que ceux de la présente étude.

Dans le cas 3 (deux débits considérés simultanément), on remarque que l'utilisation du solveur *SBB* suivant les deux fonctions objectifs utilisées conduit toujours à la même solution, alors que *DICOPT++* trouve des solutions qui sont soit infaisables physiquement, soit non optimales. Le premier type de solutions infaisables physiquement est justifié par des structures comportant un grand nombre de RAC et des écarts quadratiques importants ou des valeurs de flux de débits très faibles. Le second, solution non optimale, indique l'arrêt prématuré du solveur *DICOPT++*, qui n'arrive pas à résoudre le problème relaxé. Les résultats obtenus pour ce dernier cas, le plus complexe de ceux étudiés, confirment clairement qu'une bonne initialisation lors de l'utilisation de *DICOPT++* est nécessaire pour améliorer les résultats.

Le résultat de Montastruc rappelé dans le tableau 5-10, montre que la solution obtenue par ce dernier est peut être non optimale car on observe dans la seconde branche en parallèle une valeur extrêmement faible du débit entre les deux RAC.

Un autre point important constaté pendant la phase de résolution est relatif au temps de calcul, qui pour l'ensemble des tests, ne dépassait pas 300 secondes, alors que dans les travaux de Montastruc (2003) avec la démarche hybride combinant la méthode du recuit simulé ou un algorithme génétique et une procédure SQP, le temps de calcul moyen est estimé à 5000 secondes.

## **2.4. INFLUENCE DU CHOIX DE LA SUPERSTRUCTURE**

L'intérêt de cette étude est de vérifier si la superstructure précédemment utilisée (figure 5-10) représente au mieux le réacteur à lit fluidisé, et s'il est possible de la modifier afin d'améliorer la qualité des solutions fournies par *GAMS*.

### **2.4.1. Structure 1**

Dans la première modification apportée, le volume mort a été remplacé par un RAC. Ce choix est justifié par la conception numérique du modèle, en effet le volume mort est représenté numériquement par un volume où il n'y a pas de réaction. Néanmoins, physiquement, il se peut que soit représentée une branche comportant des RAC avec un débit faible, donc négligeable, ce qui se traduirait par une influence faible, et donc un court circuit. Ceci signifie que le RAC existe mais avec une importance mineure, et son volume pourra alors être considéré comme un volume mort.

Pour ce cas, la même superstructure de la figure 5-10 est réutilisée, où le volume mort est simplement remplacé par un RAC. Etant donné que le cas 3 est le plus complexe, seul ce cas de figure est traité suivant la dernière fonction objectif, qui regroupe l'écart quadratique au niveau des concentrations et la somme des variables associés aux modules élémentaires. Les résultats obtenus avec *SBB* et *DICOPT++*, ainsi que les écarts quadratiques sont présentés dans le tableau suivant :

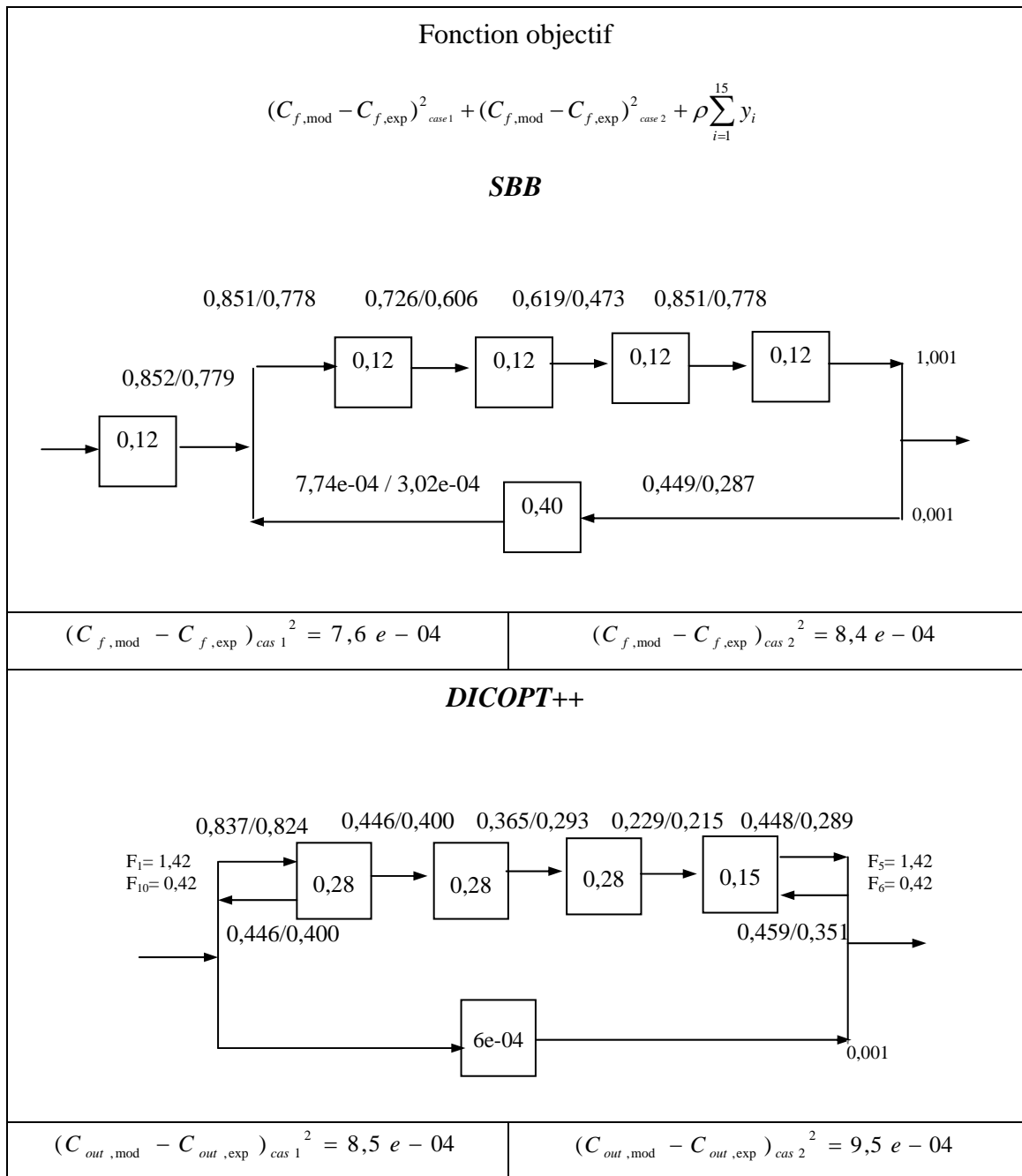


Tableau 5-11. Résultats obtenus pour la structure 1.

Pour *SBB*, on peut dire que la structure obtenue est proche de celle du même cas précédent, utilisant un volume mort. Cependant, cette structure implique deux branches dont l'une comporte un flux de débit très faible qui peut être négligé, indiquant bien que l'existence d'un volume mort est nécessaire pour ce cas, car elle permet d'éviter l'apparition de branches parallèles de faible influence. Les écarts quadratiques entre concentrations sont relativement proches, et traduisent que les structures sont d'une efficacité comparable.

Pour *DICOPT++*, la solution obtenue apparaît meilleure, au vu de l'écart quadratique pour cette solution par rapport à la précédente. Malgré cette amélioration de la solution, l'importance de l'initialisation se fait sentir pendant les simulations puisque les résultats varient toujours selon cette dernière. La structure obtenue suivant *SBB* pour le cas avec volume mort reste la structure la plus intéressante, car les volumes ont le même ordre de grandeur, contrairement à la structure donnée par *DICOPT++*.

#### 2.4.2. Structure 2

Suite aux observations effectuées sur l'existence d'un volume mort, dans cette seconde structure, la superstructure initiale de la figure 5-10 est utilisée. Mais, afin de prévoir la possibilité d'échanges supplémentaires entre les RAC, huit branches ont été ajoutées entre les RAC avec un sens d'écoulement de l'intérieur vers l'extérieur. La structure 2 est ainsi présentée sur la figure 5-11.

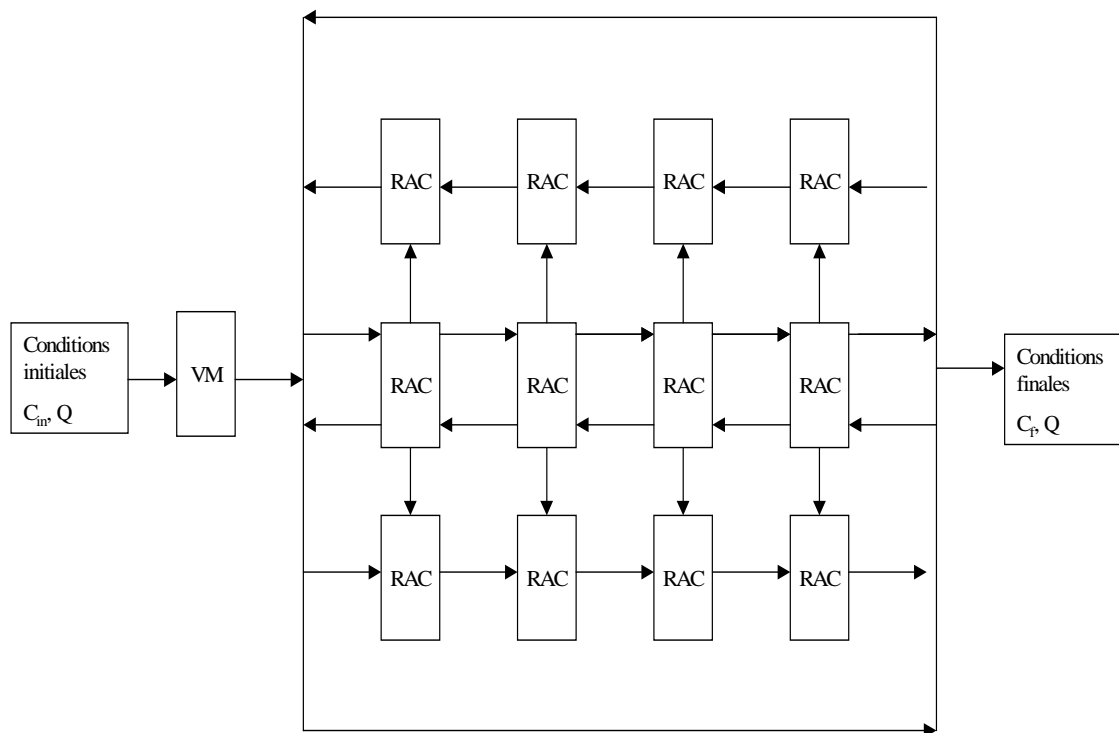


Figure 5-11. Superstructure comportant une diffusion radiale unilatérale.

La dimension du problème, en terme de variables et de contraintes, reste identique à celle présentée dans la section 2.1.3, seules les équations de bilan sur les RAC sont légèrement modifiées pour tenir compte de l'ajout des flux de diffusion radicale.

Cette superstructure plus complexe conduit à des résultats similaires à ceux obtenus avec celle de la figure 5-10. Compte tenu de la similitude des résultats, il n'a pas été jugé nécessaire de mettre en place cette superstructure comportant en plus une diffusion radiale bilatérale.

### 3. CONCLUSION

Dans cette seconde partie de l'identification de modèle en régime stationnaire, deux problèmes (étude du cas d'un bassin de décantation et d'un réacteur de déphosphatation d'effluents aqueux) ont été traités. L'application des deux solveurs *SBB* et *DICOPT++* n'a pas pu permettre de conclure sur le mieux adapté pour le traitement de problèmes d'identification de procédés.

Dans les deux cas, on a rapproché le plus possible la formulation du problème numérique au problème réel physique. Certaines bornes au niveau des contraintes, telles que celles des débits, ont été ajoutées afin de réduire l'espace de recherche, qui pouvait potentiellement générer des solutions infaisables ou illogiques.

Le premier problème, traité selon deux modèles différents, a permis de constater un changement assez important au niveau des résultats lors de l'utilisation de *DICOPT++* suivant l'initialisation appliquée, ce qui n'est pas le cas pour le solveur *SBB*.

Suivant la définition des conditions de fonctionnement du second problème, il est apparu, pour les deux cas traités séparément, qu'il existe un ensemble de structures plus ou moins équivalentes, permettant de représenter des solutions très proches sans qu'un effort particulier au niveau de l'initialisation ne soit nécessaire. Cependant, le traitement du troisième cas, à deux flux simultanés, a été déterminant, car même si aucun plan d'expériences permettant d'affiner l'influence de l'initialisation des variables sur le problème n'a été réalisé suite au nombre important de paramètres, l'initialisation générale des variables s'est avérée prépondérante dans ce cas.



Rappelons que le guide d'utilisation *GAMS* oriente les utilisateurs à traiter les problèmes avec l'initialisation la plus appropriée possible. Mais dans un certain nombre de cas, comme dans la résolution des problèmes de grande taille, un dilemme apparaît car il n'existe pas d'orientation particulière.

Toutefois, la comparaison des résultats obtenus avec l'étude effectuée par *Montastruc* impliquant une démarche hybride permet de constater que les modules de résolutions *DICOPT++* et surtout *SBB* ont fait preuve d'une grande efficacité pour la résolution de problème d'identification de procédés stationnaires.

Vu l'ensemble des résultats obtenus, le choix d'utiliser le solveur *SBB* est apparu plus judicieux. En effet, il minimise l'influence de la phase d'initialisation des variables, ce qui peut se traduire par une résolution plus efficace dans le cas de traitement de procédés non-stationnaires.

La suite de ces travaux présente la problématique de l'identification de procédés en régime dynamique.

# Chapitre 6

## **IDENTIFICATION DE MODÈLES EN RÉGIME DYNAMIQUE**

(Études préliminaires)



Cette partie traite la résolution de problèmes MINLP en régime dynamique. Ces problèmes sont souvent résolus avec des méthodes de type MIDO (Mixed Integer Dynamic Optimization), dans le cas où les équations dynamiques caractérisant le système sont traitées à partir de leur forme différentielle. Dans le cadre de ces travaux, le modèle d'écoulement élémentaire du RAC se caractérise par une forme différentielle. Cependant, vu l'orientation de l'étude, la présence de nombreuses contraintes non linéaires ainsi que l'environnement de modélisation utilisé, il s'avère préférable d'utiliser des méthodes de résolution MINLP en essayant de représenter au mieux les modèles d'écoulement.

Compte tenu du faible nombre des travaux de recherche traitant le cas d'identification dynamique de modèles suivant l'approche systémique, les mêmes démarches que celles appliquées dans le cas statique seront utilisées. La différence de traitement entre un problème statique et dynamique réside dans le fait que les écoulements sont représentés par des modèles construits à partir de l'interprétation d'une courbe de Distribution des Temps de Séjour (DTS). Un descriptif des principales bases théoriques et la définition des diverses notions s'y rattachant sont présentés en premier lieu. Le but de la procédure de modélisation mise en oeuvre, à l'inverse des problèmes statiques qui essaient de retrouver la concentration de sortie la plus proche de la concentration calculé par le modèle, est de proposer un modèle permettant d'ajuster au mieux la courbe expérimentale recueillie sur l'installation.

Dans un second temps, une phase de caractérisation est effectuée pour analyser les techniques de traitement et de modélisation des problèmes dynamiques. Cette approche permet d'étudier et de valider les différentes démarches pouvant être utilisées pour représenter les modèles d'écoulement.

Ce chapitre 6 se limite à la phase de caractérisation des modèles proposés, alors que le suivant (chapitre7), reprendra dans la continuité des travaux effectués par Laquerbe (1999) au sein de l'équipe, et concernant la modélisation des locaux ventilés de l'industrie nucléaire. Il a paru important de reprendre les travaux de Laquerbe, compte tenu des difficultés numériques rencontrées par l'approche hybride mise en oeuvre dans son étude. L'étude du local ventilé est précédée par trois exemples préliminaires, présentés afin d'étudier les divers types d'injection.

Le manque de détail sur un certain nombre d'informations tels que : les points caractérisant la DTS, la qualité précise des injections, les hypothèses utilisées lors de l'expérimentation,... ont limité les exemples d'applications traités dans cette étude.

## **1. THÉORIE DES DISTRIBUTIONS DE TEMPS DE SÉJOUR**

Une bonne connaissance de l'écoulement des fluides circulant dans des appareillages ou des installations est indispensable à l'optimisation de leur rendement et à la bonne compréhension des processus qui s'y déroulent. La théorie des distributions de temps de séjour permet d'appréhender ces problèmes. Elle s'applique non seulement à l'étude des réacteurs chimiques, à l'origine de son développement, mais dans un sens beaucoup plus large à tout écoulement de matière.

Les courbes de DTS permettent ainsi d'analyser des processus complexes dépendant uniquement des écoulements observés dans le système ; ces courbes sont classiquement obtenues par traçage. Les techniques de traçage seront détaillées dans un premier temps. Dans un second temps, quelques éléments théoriques sur les distributions de temps de séjour seront présentés.

### **1.1. TECHNIQUES DE TRAÇAGE**

#### *1.1.1. Généralités*

La notion de distribution de temps de séjour, ainsi que d'autres aspects de la méthodologie, sont les mêmes pour tous les traceurs. Seuls les moyens de métrologie changent suivant le traceur considéré.

Le traceur est simplement un outil permettant de visualiser un processus, mais il est indispensable de maîtriser l'ensemble de la procédure mise en œuvre pour garantir la qualité des mesures. Rappelons que c'est sur ces mesures que va s'appuyer la modélisation.

A la différence des méthodes numériques prédictives, où il est possible d'effectuer des simulations sans support expérimental (celui-ci étant cependant indispensable lors de la phase de validation des résultats), la modélisation des écoulements par interprétation de DTS ne peut se concevoir sans une expérimentation associée,

s'appuyant à la base sur une expérience de traçage dont le processus est décrit ci-dessous.

Le processus de traçage consiste à marquer une « tranche » de matière du système étudié par une injection de traceur et à en suivre la concentration en fonction du temps en divers points caractéristiques. Si une injection, aussi brève que possible, est réalisée à l'entrée du système, la distribution des temps de séjour correspond directement au signal en concentration de traceur que l'on peut mesurer au niveau de la sortie générale du système. Si une telle perturbation en entrée n'est pas réalisable de manière aisée, il est possible d'appliquer un signal quelconque ; on obtient alors une courbe de réponse dérivée de la DTS réelle du système. Des formules de déconvolution, pour le passage de l'une à l'autre, sont fournies au paragraphe suivant.

### *1.1.2. Les stimuli*

Les perturbations les plus couramment appliquées sont :

- l'impulsion Dirac, injection d'une quantité unitaire de traceur dans un intervalle de temps aussi faible que possible. En théorie, le support de l'injection doit être de mesure nulle. Cette perturbation est la plus délicate à reproduire expérimentalement ; généralement on effectue une perturbation de type créneau en choisissant une durée pour celui-ci très faible devant les constantes de temps caractéristiques du système étudié ;
  - l'échelon positif qui consiste à imposer une émission constante de traceur ;
  - la purge échelon réalisée par l'arrêt de l'injection de traceur après avoir attendu toutefois l'établissement de conditions d'équilibre en concentration. Une perturbation de type purge échelon est à recommander lorsqu'il n'est pas possible de réaliser un échelon positif ne perturbant pas l'écoulement ;
  - le créneau, méthode mixte des deux précédentes pour laquelle on peut attendre ou non l'établissement de conditions d'équilibre lors de l'injection de traceur ;
  - la rampe qui consiste à augmenter de manière linéaire au cours du temps le débit de traceur injecté.

De manière qualitative, l'information globale recueillie sur l'écoulement est strictement identique dans tous les cas. La perception de certaines dynamiques de transfert est facilitée pour certains stimuli par rapport à d'autres. Ainsi, une perturbation de type Dirac favorisera la perception des dynamiques les plus rapides, alors qu'une

perturbation de type échelon ou purge échelon est préférable pour des phénomènes de transfert à constantes de temps plus faibles. En conséquence, une perturbation est préférée à une autre principalement pour des raisons pratiques. Se pose alors le problème du choix du traceur.

### *1.1.3. Les traceurs*

Le traceur est caractérisé par des propriétés dynamiques identiques à celles du fluide étudié, mais il est facilement décelable par une caractéristique physique. Il doit permettre ainsi de suivre les phénomènes sans les perturber.

En ventilation, le mécanisme dominant de dispersion des polluants est la diffusion turbulente ; le transfert du polluant est donc considéré comme indépendant de sa nature, tant que le milieu est dilué (concentrations de polluant ou de traceur inférieures à quelques %) ou que les effets propres à la physique des aérosols (sédimentation, en particulier) sont négligeables, lorsque l'on se trouve en présence d'un polluant particulaire. En conséquence, le choix du traceur est indifférent quant à la représentativité de l'expérience ; il se fera donc en fonction de critères de commodité d'emploi, de non-perturbation de l'écoulement, de stabilité et de sensibilité de détection. Les traceurs couramment utilisés sont des traceurs gazeux (hélium ou hexafluorure de soufre) ou des traceurs particuliers fluorescents (fluorescéine sodée). Dessagne et al. (1991) recensent les techniques de traçage gazeux disponibles et énumèrent un certain nombre d'indices permettant de juger la performance du système de ventilation.

L'emploi de traceurs radioactifs peut s'avérer nécessaire pour simuler le dégagement de très faibles quantités de contaminants dans un volume important.

Dans le cas présent, on s'appuie uniquement sur la technique de traçage à l'hélium lors de la phase de qualification du logiciel. Le principal intérêt de l'hélium réside dans sa très grande inertie chimique, même à des températures élevées, ainsi que dans sa propriété d'être détectable en continu et en temps réel ; sa principale limitation est liée à sa présence dans l'air ambiant, à raison de 5,2 ppm. Vasseur et al. (1985) décrivent la technique de traçage à l'hélium pour l'étude des systèmes de ventilation. Le dispositif utilisé lors de toutes les expériences de traçage réalisées lors de cette étude est schématisé sur la figure 6-1. Les stimuli sont appliqués au système, par injection dans le conduit de soufflage général du local, d'un débit (ou d'une quantité) d'hélium contrôlé(e) grâce à l'utilisation de capillaires (orifices calibrés). Des constantes caractéristiques du capillaire relient la perte de charge aux bornes de celui-ci au débit

d'hélium émis, ce qui permet de contrôler parfaitement le débit (ou la quantité) d'hélium injecté(e).

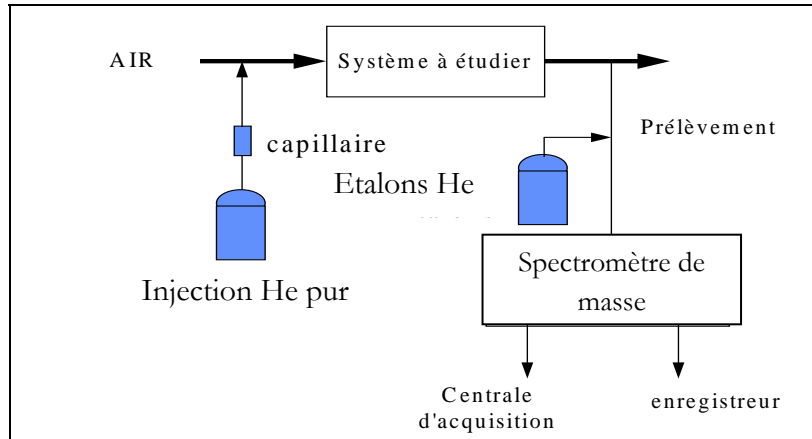


Figure 6-1. Appareillage lié au traçage à l'hélium.

D'autres techniques de traçage peuvent être mises en œuvre, comme l'utilisation de matières radioactives de périodes courtes (Blet, 1998). Ces techniques de traçages radioactifs nécessitent un matériel plus conséquent et imposent de prendre certaines précautions quant à leur utilisation sur une installation industrielle.

Les techniques de traçage peuvent également être utilisées pour calculer uniquement le débit d'air circulant dans un conduit. La mise en œuvre de traceurs fait l'objet de normes bien précises ; on peut citer notamment la norme NF X10-131 de Décembre 1974.

## 1.2. HYPOTHÈSES RELATIVES À L'APPROCHE SYSTÉMIQUE

Le domaine du génie des procédés, génie de la réaction chimique, implique des problèmes dynamiques dûs aux réacteurs et à leurs caractéristiques. La notion de 'réacteur' est prise, selon l'objectif de cette étude, dans un sens très large. On peut la définir comme toute portion d'espace traversée par des éléments mobiles qui y séjournent pendant une durée variable : appareils industriels, local, organe d'un être vivant,... La modélisation du fonctionnement des réacteurs et des procédés industriels impliquant un fluide en écoulement, nécessite la connaissance de l'hydrodynamique des transferts de chaleur et de matière, et des réactions chimiques. La maîtrise de l'écoulement des divers réactifs qui transitent dans un réacteur est une étape indispensable avant de prévoir ses performances. Diverses méthodes permettent d'avoir accès à ces informations, elles peuvent être expérimentales ou théoriques, globales ou locales.



Dans le cadre du calcul des réacteurs, les récents progrès techniques en métrologie et en vitesse de calcul permettent de disposer d'outils performants pour accéder expérimentalement ou théoriquement à une description fine des vitesses d'écoulement en tout point du système étudié. Le développement de la prise en compte des réactions chimiques dans la mécanique des fluides numériques d'une part, et le développement de métrologies avancées d'autre part, ouvrent des voies pleines d'avenir pour la simulation du fonctionnement des réacteurs. Cependant, elles restent encore difficilement applicables dans le cas de réacteurs de configurations complexes ou certains types de réacteurs, en particulier, ceux faisant intervenir un milieu polyphasique, ou des locaux dont la géométrie est complexe.

Les hypothèses sur lesquelles est fondée l'approche systémique et qui sont nécessaires à l'obtention expérimentale d'une courbe de distribution de temps de séjour exploitable sont les suivantes (Villermaux, 1993) :

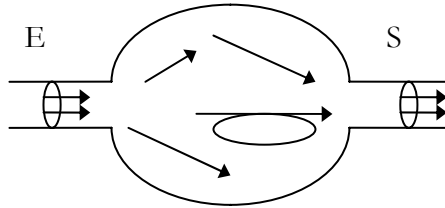
- l'écoulement se trouve en régime permanent établi ;
- l'écoulement est déterministe, c'est-à-dire qu'il ne fait pas intervenir de processus aléatoires macroscopiques comme des basculements de filets. Un processus aléatoire stationnaire rapide comme la turbulence (dont la constante de temps est négligeable devant les dynamiques de transfert global de l'écoulement) est considéré comme quasi-déterministe à l'échelle de l'expérimentateur ;
- le fluide est incompressible et il ne subit pas de variations de masse volumique en traversant l'installation, dues par exemple à des effets thermiques ;
- l'écoulement à travers les sections d'entrées/sorties se fait uniquement par convection forcée, ceci afin d'éviter des effets de diffusion du traceur lors de son injection et du prélèvement pour la mesure ;
- les conduites d'entrées/sorties sont de petites dimensions par rapport à l'enceinte et l'écoulement est de type piston. Ceci permet de marquer de manière uniforme l'air du système de soufflage.

Ces hypothèses sont celles qui sont généralement rencontrées en ventilation industrielle, exceptée peut-être celle d'écoulement déterministe dans le cas de processus aléatoires ou périodiquement perturbés qui ne semble pas a priori évidente. Pour vérifier cette hypothèse, il est alors nécessaire de réaliser des études de reproductibilité des expériences.

### 1.3. ÉLÉMENTS DE THÉORIE SUR LES DTS

#### 1.3.1. Définition

L'approche est basée sur la définition de fonctions de distribution destinées à représenter le devenir statistique des diverses fractions du fluide traversant le système étudié.



*Figure 6-2. Schématisation de l'écoulement d'un fluide.*

La fonction de distribution de base est la distribution des temps de séjour (DTS),  $E(t)$ , qui est telle que  $E(t)dt$  corresponde à la fraction du débit de sortie qui a séjourné dans l'enceinte durant un temps compris entre  $t$  et  $t+dt$ . L'âge d'une molécule correspond au temps passé dans le système depuis qu'elle a franchi l'entrée.  $E(t)$  peut alors être assimilée à la densité de probabilité du temps de séjour dans le débit de sortie.

On constate que la DTS a la dimension de l'inverse d'un temps et on peut déduire les caractéristiques suivantes :

$$\left. \begin{array}{l} \forall t < 0, E(t) = 0 \\ \forall t \geq 0, E(t) \geq 0 \\ \lim_{t \rightarrow +\infty} E(t) = 0 \\ \int_0^{+\infty} E(t).dt = 1 \end{array} \right\} \quad (6-1)$$

Une fonction,  $F(t)$ , peut être déduite de  $E(t)$  par simple intégration ; il s'agit de la distribution des temps de séjour cumulée, fonction qui permet de calculer la quantité totale de traceur recueillie à la sortie S du système entre le moment de l'injection et le temps  $t$  :

$$F(t) = \int_0^t E(t).dt \quad (6-2)$$

**1.3.2. Formules caractéristiques**

La DTS pour diverses perturbations en concentration en entrée du système étudié est donnée par les formules présentées dans le tableau 6-1.

Perturbation	Réponse impulsionnelle	Réponse indicielle	
	Dirac	Echelon positif	Echelon négatif
DTS	$E(t) = \frac{C_I(t)}{\int_0^{\infty} C_I(t)dt}$	$E(t) = \frac{d\left(\frac{C_E(t)}{C_{\acute{e}q}}\right)}{dt}$	$E(t) = -\frac{d\left(\frac{C_{PE}(t)}{C_{\acute{e}q}}\right)}{dt}$
		D'où : $C_{PE}(t) = C_{\acute{e}q} - C_E(t)$	

**Tableau 6-1. Formules caractéristiques de DTS.**

Notations :  $C_I$  : réponse à une perturbation de type impulsionnelle.

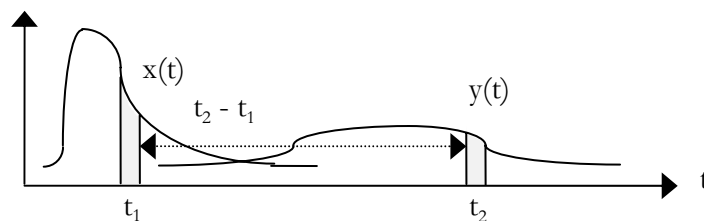
$C_E$  : réponse à une perturbation de type échelon positif.

$C_{PE}$  : réponse à une perturbation de type purge échelon.

$C_{\acute{e}q}$  : concentration d'équilibre avant (ou après) une perturbation de type purge échelon (ou échelon positif).

Il est à souligner que le processus de mélange à l'intérieur d'un système est un processus linéaire. Par conséquent, la réponse  $y$  du système à n'importe quelle perturbation  $x$  peut être obtenue à partir de la réponse impulsionnelle du système, représentée par  $E$ , par un produit de convolution :

$$y(t_2) = \int_0^{t_2} x(t_1)E(t_2 - t_1)dt_1 \tag{6-3}$$



**Figure 6-3. Réponse d'un système  $y$  suivant une perturbation  $x$ .**

Réciproquement, à partir de la réponse du système étudié pour n'importe quel type de perturbation, on peut calculer la DTS par déconvolution.

Une propriété très intéressante en découle : si les signaux d'entrée  $x$  et de sortie  $y$  sont enregistrés par des appareils identiques, ayant eux-mêmes des propriétés de systèmes linéaires, une déformation que pourraient introduire de manière systématique les appareils d'enregistrement ou de mesure, disparaît lors de la procédure de déconvolution.

Par abus de langage, et à cause de cette propriété de linéarité de la réponse par rapport au signal d'entrée, on est souvent amené à qualifier toute courbe de traçage par le terme de distribution des temps de séjour, alors que, dans l'absolu, la courbe de distribution des temps de séjour théorique correspond à la réponse du système à une perturbation de type Dirac.

Un certain nombre d'indices caractéristiques de l'écoulement peut être calculé à partir des divers moments mathématiques des courbes, le plus utilisé étant le temps de séjour moyen. Si les cinq hypothèses énumérées précédemment sont respectées, alors le temps de séjour moyen  $\bar{t}_s$  est égal au temps de renouvellement  $\bar{\tau}$  :

$$\bar{\tau} = \bar{t}_s = \frac{V}{Q} = \frac{\text{Volume accessible au fluide}}{\text{Débit circulant}} \quad (6-4)$$

où :

$$\bar{t}_s = \int_0^{\infty} t.E(t).dt = \frac{\int_0^{\infty} t.C_I(t).dt}{\int_0^{\infty} C_I(t).dt} = \frac{\int_0^{\infty} C_{PE}(t).dt}{C_{PE}(0)} = \int_0^{\infty} \left[ 1 - \frac{C_E(t)}{C_{éq}} \right].dt \quad (6-5)$$

Notation :  $C_{PE}(0)$  : concentration d'équilibre avant une purge échelon.

Le temps de renouvellement correspond à l'inverse du taux de renouvellement (nombre de renouvellements horaires de l'air présent dans le système).

Les moments d'ordre supérieur renseignent sur d'autres caractéristiques de l'écoulement. Par exemple, le moment d'ordre 2 donne la variance de la distribution, alors que le moment d'ordre 3 est rattaché à l'asymétrie de la courbe.

**1.3.3. DTS des modèles d'écoulements idéaux**

Pour les deux écoulements idéaux, à la base de tout modèle construit selon l'approche systémique, les DTS sont fournies dans le tableau 6-2.

	<b>DTS</b>	<b>Réponse impulsionnelle</b>	<b>Réponse indicielle (Echelon positif)</b>
<b>RAC</b>	$E(t) = \frac{1}{\bar{t}_s} \exp\left(-\frac{t}{\bar{t}_s}\right)$	$C_I(t) = C_0 \exp\left(-\frac{t}{\bar{t}_s}\right)$	$C_E(t) = C_{\text{éq.}} \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\bar{t}_s}\right)\right)$
<b>Piston</b>	$E(t) = \delta(t - \bar{t}_s)$	$C_I(t) = C_0 \delta(t - \bar{t}_s)$	$\begin{cases} C_E(t) = 0 & \text{pour } t < \bar{t}_s \\ C_E(t) = C_{\text{éq.}} & \text{pour } t \geq \bar{t}_s \end{cases}$

**Tableau 6-2. : Formules de DTS pour les modèles d'écoulements idéaux.**

où  $\delta$  est la distribution de Dirac et  $C_0$  la concentration maximale imposée suite à une impulsion.

**1.3.4. DTS des écoulements réels**

Il est possible de représenter la circulation complexe d'un fluide par un modèle associant des modèles d'écoulements idéaux. Pour être réaliste, ce modèle doit être aussi simple que possible. Réaliste, c'est-à-dire reposant sur des bases physiques, s'inspirant de la configuration réelle du local et prenant en compte la circulation des fluides et les courants d'échange de matière. Simple, c'est-à-dire idéalisant les phénomènes et faisant appel à un nombre de paramètres aussi restreint que possible, compte tenu des données disponibles dans les courbes de DTS.

L'analyse de DTS s'applique déjà à de nombreux domaines tels que les réacteurs chimiques, l'hydrologie, et semble pouvoir être étendue à tout système fermé à l'intérieur duquel circule un fluide. L'approche systémique est intéressante pour l'étude de milieux complexes, comme en ventilation industrielle, pour lesquels on voudrait pouvoir prédire a priori les transferts réels. De plus, elle conduit à des informations globalisées et synthétiques, révélant parfois des comportements indécélables dans une masse trop grande d'informations, fournies le cas échéant par une approche locale.

### *1.3.5. Extension de la notion de DTS*

Les formules précédentes sont valables pour des systèmes linéaires comme c'est ici le cas, mais des relations existent également pour des processus non linéaires (Najim et al., 1996).

De même, Fernandez-Sempere et al. (1995) proposent des techniques pour calculer les distributions de temps de séjour dans un système en régime transitoire, c'est-à-dire pour lequel le débit ou son propre volume varie. Contrairement au cas d'un réacteur chimique où le volume du système peut varier, en ventilation seul le débit peut varier. Ces formules semblent intéressantes pour traiter les régimes transitoires consécutifs à l'arrêt, au démarrage, ou à la fermeture d'un clapet en ventilation par une méthode similaire à l'approche systémique.

## **2. ÉTAPES DE CARACTERISATION DU PROBLEME DYNAMIQUE**

### ***2.1. PROCEDURE DE VALIDATION DE L'APPROCHE***

Cette phase de l'étude, étape préliminaire réalisée afin de valider l'approche de résolution, implique l'utilisation de l'approche systémique pour une identification paramétrique et structurelle de procédés mettant en jeu des notions de DTS.

Cette procédure de validation implique deux étapes distinctes. La première correspond à la simulation d'une structure dont toutes les variables paramétriques et structurelles sont fixées. La distribution de temps de séjour résultante est déterminée au moyen d'Excel. Dans la seconde phase, le problème d'optimisation MINLP est résolu avec *GAMS* : on recherche, au sein d'une superstructure, un arrangement d'écoulements élémentaires donnant la DTS se rapprochant au mieux de la DTS simulée lors de la première étape. Les deux étapes de cette caractérisation sont résumées dans la figure 6-4 :

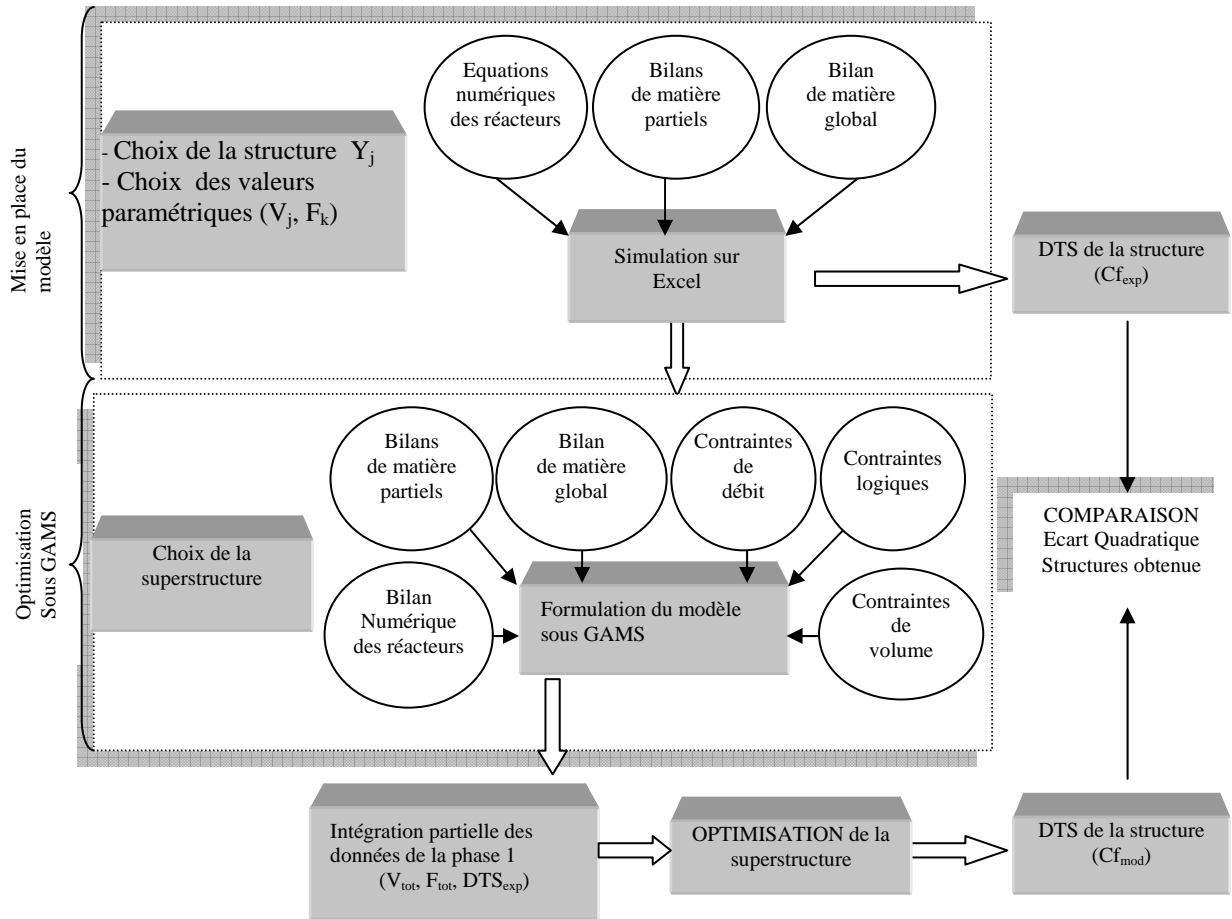


Figure 6-4. Étapes de validation de la procédure.

Le but de cette démarche est de vérifier si, à partir d'une superstructure initiale où toutes les variables sont supposées inconnues, *GAMS* arrive à retrouver la même en portant une attention particulière à l'écart quadratique entre les concentrations du modèle obtenu par l'optimiseur et du modèle simulé par Excel.

## 2.2. MODELISATION DU PROBLEME SOUS GAMS

Afin d'obtenir la structure qui lisse au plus près la courbe DTS expérimentale obtenue dans la phase 1, cette seconde phase consiste à formuler et à résoudre un modèle sous *GAMS* à partir d'une superstructure. Cette dernière représente potentiellement un certain nombre de solutions. Le volume total et le débit d'entrée utilisés lors de la simulation sur Excel sont réutilisés comme données du problème au sein de *GAMS*. La DTS expérimentale sera également utilisée afin de construire la fonction objectif à minimiser, i.e. l'écart quadratique entre cette dernière et celle fournie par le modèle construit par *GAMS*.

Plusieurs superstructures ont été testées. Les résultats de la superstructure la plus générale, incluant toutes structures simulées dans la phase 1 comme solution, sont présentés. Généralement, les résultats obtenus lors de l'utilisation de ces structures intermédiaires sont très proches des résultats présentés par la suite.

La superstructure globale retenue pour cette étude, comporte six RAC, deux réacteurs pistons, un by-pass et un reflux. Dans le cas où les débits traversant des modèles élémentaires sont nuls, ces modèles seront assimilés à des volumes morts. Les variables discrètes binaires ( $y_j$ ) traduisent l'existence ou non d'opérations unitaires et de flux de matière. Les variables continues sont les variables de flux ( $F_k$ ), de concentrations ( $C_l^{(i)}$ ) et les volumes ( $V_j$ ). La superstructure est présentée dans la figure 6-5.

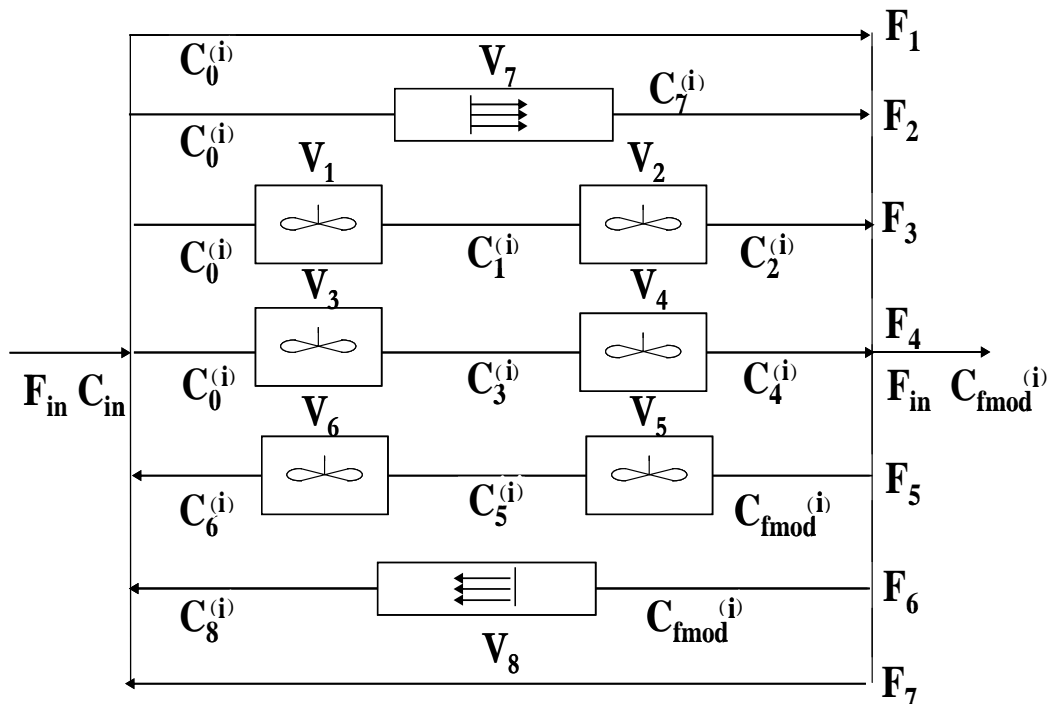


Figure 6-5. Superstructure du modèle (globale).

L'indice  $j$  représente le numéro du réacteur ( $1 \leq j \leq 10$ ). Les valeurs 9 et 10 de cet indice sont associées respectivement au reflux et au by-pass. L'indice  $k$  représente le numéro de la branche du réseau ( $1 \leq k \leq 7$ ). L'indice  $l$  représente la concentration ( $0 \leq l \leq 8$ ). L'indice  $i$  représente le numéro de l'itération, ou pas de temps, à un temps donné ( $0 \leq i \leq i_{max}$ ). La valeur de  $i_{max}$  varie selon l'exemple traité. Cette structure représente un nombre de solutions potentielles égale à  $2^{10}=1024$ . La formulation du problème comporte les équations suivantes :



Contrainte de Volume

$$\sum_{j=1}^8 V_j = V_{total} \quad (6-6)$$

Bilan de matière du nœud à l'entrée

$$F_{in} + \sum_{k=1}^4 F_k = \sum_{k=5}^7 F_k \quad (6-7)$$

$$C_{in}^{(i)} F_{in} + C_6^{(i)} F_5 + C_8^{(i)} F_6 + C_{f\text{mod}}^{(i)} F_7 = C_0^{(i)} \sum_{k=1}^{k=4} F_k \quad (6-8)$$

Bilan de matière du nœud à la sortie

$$C_{f\text{mod}}^{(i)} \sum_{k=5}^{k=7} F_k = C_0^{(i)} F_1 + C_7^{(i)} F_2 + C_2^{(i)} F_3 + C_4^{(i)} F_4 \quad (6-9)$$

Équation numérique du RAC (exemple RAC1)

$$C_1^{(i+1)} = \left( \frac{h * F_1}{v_1} \right) (C_0^{(i)} - C_1^{(i)}) + C_1^{(i)} \quad (6-10)$$

$h$  : pas de temps

Existence du réacteur (exemple réacteur 1)

$$V_1 \leq y_1 * V_{tot} \quad (6-11)$$

Contraintes de débit (exemple débit1)

$$F_1 \leq M * (y_1 + y_2) * F_{in} \quad (6-12)$$

$M$  : constante utilisée pour borner supérieurement la variable de débit maximale circulant dans la superstructure (ici,  $M$  est choisi égale à 10)

$y_1$  et  $y_2$  correspondent à l'existence des RAC 1 et 2.

La contrainte (6-12) représente une contrainte logique liée à l'existence de flux de débit dans le cas où RAC 1 ou 2 existe. L'inégalité avec un facteur  $M$  permet de borner le débit.

### 2.2.1. Modélisation d'un écoulement piston

La formulation d'un écoulement piston varie selon le type d'injection utilisé. Plusieurs formulations peuvent être écrites dans *GAMS*. Il est d'autant plus intéressant d'utiliser des fonctions simples avec le minimum de variables intermédiaires et en particulier de variables binaires, afin de simplifier le travail de résolution. Suivant le type d'injection, les formulations mises en œuvre sont présentées ci-après.

#### 2.2.1.1. Injection Echelon

La DTS décrivant l'injection échelon s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{cases} C_{out} = 0 & \text{pour } t < \left( \frac{V_{pfr}}{F_{in}} \right) \\ C_{out} = C_{in} & \text{pour } t \geq \left( \frac{V_{pfr}}{F_{in}} \right) \end{cases} \quad (6-13)$$

Elle est représentée par la figure 6-6.  $C_{out}$  correspond à la concentration de sortie du réacteur.

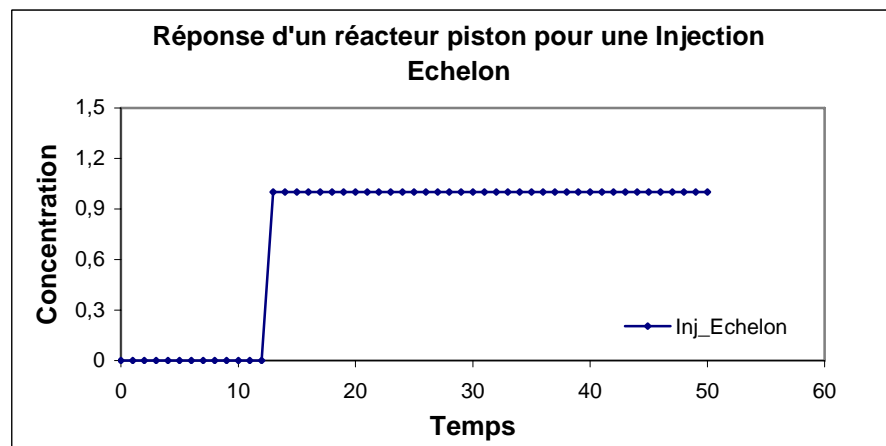


Figure 6-6. DTS pour un écoulement piston suivant une injection échelon.

Dans le cas d'une injection échelon, une formulation de type 'sigmoïde' est adoptée. Elle est représentée par la formule suivante :

$$C_{out}^{(i)} = C_{in}^{(i)} \times \text{sigmoïde} \left[ k \left( t^{(i)} - \frac{V_1}{F_1} \right) \right] \quad (6-14)$$

Il est à noter que la modélisation d'un problème incluant une discontinuité importante peut engendrer des difficultés numériques lors de la résolution par le solveur.

Dans cette étude, la fonction sigmoïde a été utilisée, de manière à représenter au mieux le décrochage d'un piston idéal dans le cas d'une purge échelon. Le coefficient  $k$  a été choisi d'une manière arbitraire et pris égal à 100.

### 2.2.1.2. Impulsion de Dirac

La DTS décrivant une impulsion de Dirac s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{cases} C_{out} = 0 & \text{pour } t \neq \left( \frac{V_{pfr}}{F_{in}} \right) \\ C_{out} = C_{in} & \text{pour } t = \left( \frac{V_{pfr}}{F_{in}} \right) \end{cases} \quad (6-15)$$

Elle est représentée par la figure 6-7 :

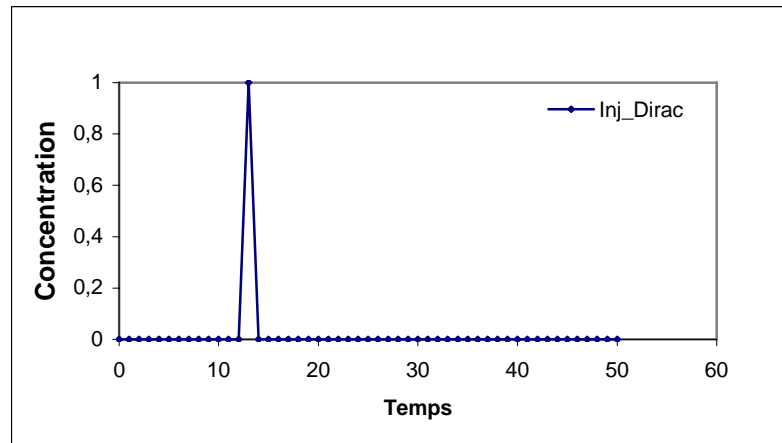


Figure 6-7. DTS d'un réacteur piston suivant une impulsion de Dirac.

Dans le cas d'une impulsion de type Dirac, une formulation de l'équation du piston impliquant des variables binaires s'est avérée nécessaire. La représentation d'un piston idéal à partir d'une formulation mathématique est difficile à mettre en œuvre. Le modèle utilisé comporte un ensemble d'équations et de variables intermédiaires. La formulation choisie est la suivante :

$$t^{(i)} - \frac{V}{Q} = T_{pos}^{(i)} - T_{neg}^{(i)} \quad (6-16)$$

$$C_{out}^{(i)} \leq 1 - B^{(i)} \quad (6-17)$$

$$C_{pos}^{(i)} + C_{neg}^{(i)} \leq M_2 B^{(i)} \quad (6-18)$$

$$T_{pos}^{(i)} + T_{neg}^{(i)} \leq M_1 B^{(i)} \quad (6-19)$$

$$C_{out}^{(i)} - C_0^{(i)} = C_{pos}^{(i)} - C_{neg}^{(i)} \quad (6-20)$$

$C_{pos}^{(i)}, C_{neg}^{(i)}, T_{pos}^{(i)}, T_{neg}^{(i)}$ : variables continues positives ou nulles

$B^{(i)}$ : variables binaires

$M_1$ : borne maximale ( $= \text{Max} \left( t^{(i)} - \frac{V}{Q} \right)$ )

$M_2$ : borne maximale (=2)

Les bornes  $M_1$  et  $M_2$  sont fixées suivant les contraintes (6-18) et (6-19) et correspondent aux valeurs maximales des variables présentes.

La résolution de cet ensemble d'équations dépend de la valeur des variables binaires :

Si  $B^{(i)}=0$ , alors :

On trouve d'après (6-17) :  $C_{out}^{(i)} \leq 1$  (6-21)

$$(6-18) \quad C_{pos}^{(i)} + C_{neg}^{(i)} \leq 0 \Leftrightarrow C_{pos}^{(i)} = C_{neg}^{(i)} = 0 \quad (6-22)$$

$$(6-19) \quad T_{pos}^{(i)} + T_{neg}^{(i)} \leq 0 \Leftrightarrow T_{pos}^{(i)} = T_{neg}^{(i)} = 0 \quad (6-23)$$

$$(6-16) \quad t^{(i)} = \frac{V}{Q} \quad (6-24)$$

Si  $B^{(i)}=1$ , alors :

On trouve d'après (6-17) :  $C_{out}^{(i)} \leq 0 \Leftrightarrow C_{out}^{(i)} = 0$  (6-25)

$$(6-18) : C_{pos}^{(i)} + C_{neg}^{(i)} \leq M_2 \quad (6-26)$$

$$(6-19) : T_{pos}^{(i)} + T_{neg}^{(i)} \leq M_1 \quad (6-27)$$

$$(6-20) \text{ et } (6-27) : t^{(i)} - \frac{V}{Q} \leq M_1 \quad (6-28)$$

Cette formulation permet de représenter la réponse d'un écoulement piston idéal à une impulsion de Dirac. Selon la valeur de la variable binaire  $B$ , si cette dernière est nulle, alors l'ensemble des équations (6-21) à (6-24) fournit une égalité entre  $t$  et  $V/Q$  pour une concentration positive. Si la valeur de  $B$  est égale à 1, on obtient une concentration de sortie du piston nulle avec un écart  $t-V/Q$  compris entre 0 et  $M_I$ . L'ensemble de ces équations satisfait la contrainte (6-15).

Dans ce cas, l'utilisation de variables binaires peut entraîner une certaine difficulté de résolution car le nombre de variables discrètes dans l'équation représentant l'écoulement piston est proportionnel au nombre de pas de temps utilisé.

### *2.2.2. Modélisation de l'écoulement parfaitement agité continu (RAC)*

Suivant l'injection traitée, plusieurs méthodes ont été testées. Considérant l'écoulement comme idéal, le RAC est modélisé suivant une méthode numérique. Le choix d'utiliser la méthode d'Euler est justifié en annexe. En parallèle, pour le cas d'une injection échelon, une seconde formulation, correspondant à la définition de la DTS présentée dans le paragraphe précédent, est utilisée. Ceci, permet de tester la capacité de *GAMS* à résoudre les mêmes problèmes suivant une formulation différente des RAC.

#### *2.2.2.1. Purge Échelon*

Dans le cas d'une purge échelon, certaines hypothèses peuvent être effectuées pour représenter le RAC suivant une formulation mathématique simple, présentée lors de la définition de la DTS pour des écoulements idéaux.

$$C_E(t) = C_{\text{éq.}} \left( 1 - \exp\left(-\frac{t}{\bar{t}_s}\right) \right) \quad (6-29)$$

où  $C_{\text{éq}}$  représente la concentration d'équilibre avant (ou après) une perturbation de type purge échelon (ou échelon positif).

La formulation (6-29) indique que la concentration de sortie du RAC doit tendre vers  $C_{eq}$ . Ceci est vrai pour un seul RAC, certainement pour plusieurs RAC en série, mais beaucoup moins évident lorsqu'il y a des connexions entre RAC situés sur des branches différentes.

Cependant, pour ce type d'injection, en parallèle au traitement du problème suivant une méthode numérique, le choix de représenter les RAC par la formule mathématique précédente est adopté dans un certain nombre de cas simples, pour permettre d'analyser le comportement de *GAMS* face à ces cas. Des exemples de caractérisations traités en représentant le RAC avec une formule mathématique sont présentés en annexe.

### 2.2.2.2. *Impulsion de Dirac*

Pour une impulsion de type DIRAC, le choix d'utiliser seulement une méthode de résolution numérique est justifié en annexe avec un cas de caractérisation simple. Ce choix est principalement dû à la forme de l'expression analytique du RAC dans le cas d'une impulsion de DIRAC. Rappelons que la concentration de sortie dans le cas d'un seul RAC s'écrit sous la forme suivante :

$$C_I(t) = C_0 \exp\left(-\frac{t}{t_s}\right) \quad (6-30)$$

où  $C_0$  représente la concentration d'entrée au niveau du RAC.

Il est supposé que la concentration d'entrée  $C_0$  est constante, en revanche, dans le cas d'un ensemble de réacteurs en série, l'équation précédente ne peut être appliquée pour les autres réacteurs en série car la concentration d'entrée n'est plus la même et varie suivant la concentration de sortie du précédent réacteur cette remarque amène à la nécessité d'intégrer l'équation différentielle caractérisant le RAC suivant des bornes des concentrations variables, ce qui peut générer des équations complexes à résoudre numériquement dans le cas d'une superstructure comportant plus de trois RAC en série.

### 2.2.3. Fonction objectif

La dimension du problème en terme de variables et de contraintes varie suivant le nombre de points utilisés pour discrétiser le temps (en général une dizaine). Indépendamment de ce nombre de points, il faut ajouter aux variables continues, 7 variables de débit et 8 variables de volume. Le problème consiste à extraire de la superstructure, présentée sur la figure 6-5, le modèle permettant de se rapprocher le plus possible des concentrations expérimentales, tout en minimisant également le nombre de flux et de modèles élémentaires, ce qui conduit à la fonction objectif  $z$  suivante :

$$\text{Min } z = \rho \times \sum_{i=1}^{i_{\max}} (C_{f \text{ mod}}^{(t)} - C_{f \text{ exp}}^{(t)})^2 + \sum_{j=1}^8 y_j \quad (6-31)$$

### 2.2.4. Bornes des variables

Les variables continues sont bornées comme suit.

$$0 \leq C_j^{(t)} \leq 1 \quad j=0 \text{ à } 8 \quad (6-32)$$

$$0 \leq C_{f, \text{mod}}^{(t)} \leq 1 \quad (6-33)$$

$$0 \leq V_i \leq V_{\text{tot}} \quad i=1 \text{ à } 8 \quad (6-34)$$

$$0 \leq F_{1,2,3,4} \leq M \cdot F_{\text{in}} \quad (6-35)$$

$$0 \leq F_{5,6,7} \leq \frac{M}{2} \cdot F_{\text{in}} \quad (6-36)$$

Ces bornes sont imposées pour délimiter l'espace de recherche. Vu le nombre important des variables, l'utilisation de bornes s'avère nécessaire pour éviter les optima locaux et pour rester dans un espace de recherche physiquement réaliste.

Suite à différents essais, la valeur de la constante  $M$  est fixée à 10. Les débits  $F_{1,2,3,4}$  peuvent être inférieurs ou égaux à 10 fois la valeur du débit à l'entrée. Par contre,  $F_{5,6,7}$  peuvent être inférieurs ou égaux à 5 fois la valeur du débit d'entrée. Cette différence de débit est due au sens de l'écoulement de ces derniers. N'ayant pas d'information supplémentaire sur le procédé, la borne maximale  $M$  pourra être modifiée selon les informations globales fournies par la courbe.

**2.3. RESULTATS OBTENUS**

S’agissant d’une phase préliminaire de validation de l’approche, les modèles de référence simulés sont choisis arbitrairement, et les différentes variables paramétriques sont données sans unité. Les diverses études sont réalisées avec un pas de discrétisation du temps égal à 1 dans un intervalle compris entre 0 et 50.

Selon le type d’injection, purge échelon ou impulsion de Dirac, les résultats obtenus pour les modèles traités sont résumés dans les tableaux 6-3 et 6-4 comportant les structures de référence (colonne Modèle). L’écart quadratique (E.Q.) entre la concentration du modèle de référence et la concentration du modèle déterminé par optimisation est indiqué pour chaque cas. Les courbes de DTS sont simulées sous Excel suivant une formulation donnée des RAC (méthodes d’Euler par exemple), et cette même formulation (Euler par exemple) est utilisée sous GAMS, afin de comparer les solutions obtenues selon la formulation utilisée.

**2.3.1. Purge échelon**

Rappelons que dans le cas d’une purge échelon, deux formulations ont été étudiées. Les résultats obtenus avec les écarts quadratiques (E.Q.) sont présentés ci-dessous.

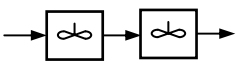
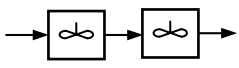
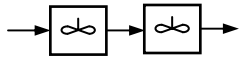
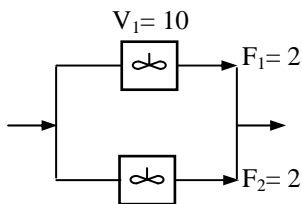
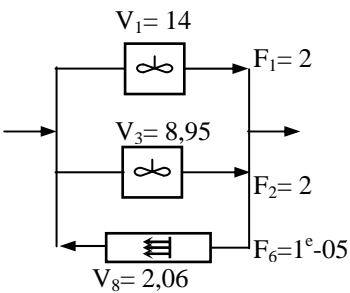
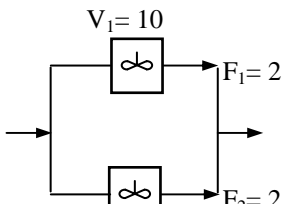
Modèle de référence	Formulation RAC intégrale	Formulation RAC numérique
 $V_1=50 \quad V_2=50$	 $V_1=50 \quad V_2=50$ E.Q.= 0	 $V_1=50 \quad V_2=50$ E.Q.= 0
 $V_2=15$	 $V_8=2,06$ E.Q.= $3,15^{\circ}-10$	 $V_2=15$ E.Q.= $3,21^{\circ}-10$



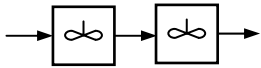
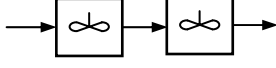

Tableau 6-3. Résultats pour une purge échelon.

A part le premier cas où le même résultat est obtenu pour les deux formulations, selon le choix de la formulation, les résultats peuvent être différents mais avec des écarts quadratiques très faibles. Cette tendance porte à croire qu'il existe un ensemble de solutions aux caractéristiques très proches de celles de la structure initialement simulée dans la phase I. Pour les trois derniers cas, suivant une formulation de RAC intégrée, on constate l'apparition d'un volume mort, représentant des RAC dont les flux de débits sont nuls : donc aucun écoulement ne traversent le RAC.

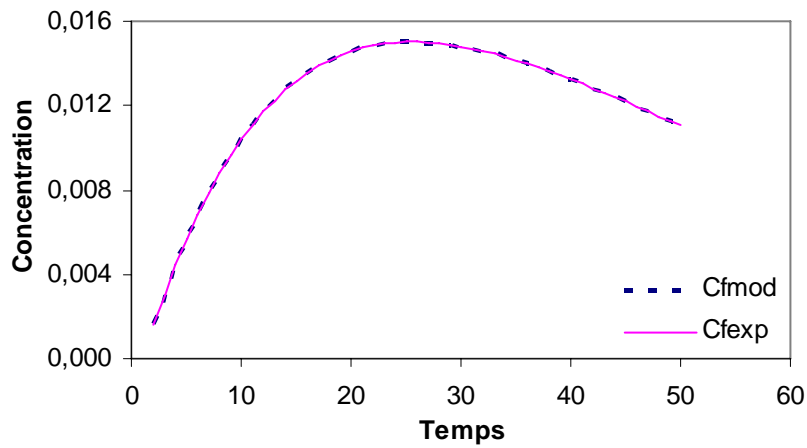
Selon une formulation de RAC numérique, les résultats obtenus sont souvent plus proches des structures simulées pour les trois premiers cas. Dans les deux derniers cas, des structures différentes de celles simulées sont obtenues, mais avec un écart quadratique relativement faible. En effet, un écart quadratique d'ordre  $1^{\circ}-05$  est équivalent à un écart relatif de l'ordre de  $2^{\circ}-02$  au niveau de la concentration, ce qui est faible et acceptable.

**2.3.2. Impulsion de Dirac**

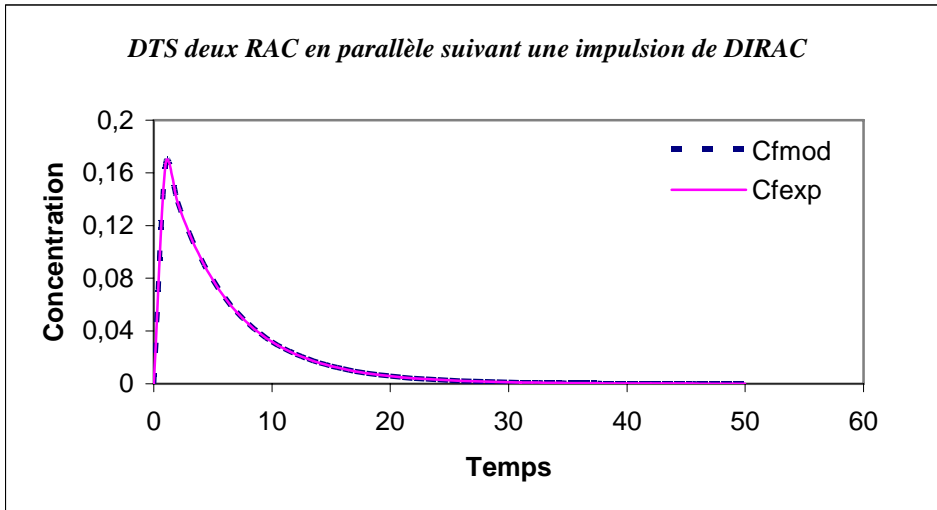
Les résultats obtenus pour ce type d'injection avec une formulation numérique pour le modèle d'écoulement du RAC sont présentés dans le tableau suivant. La résolution selon une formulation intégrale des RAC ne peut être effectuée pour les raisons citées précédemment.

Modèle de référence	Formulation RAC numérique
 $V_1=50$ $V_2=50$	 $V_1=50$ $V_2=50$ E.Q.= $4,6^e-10$

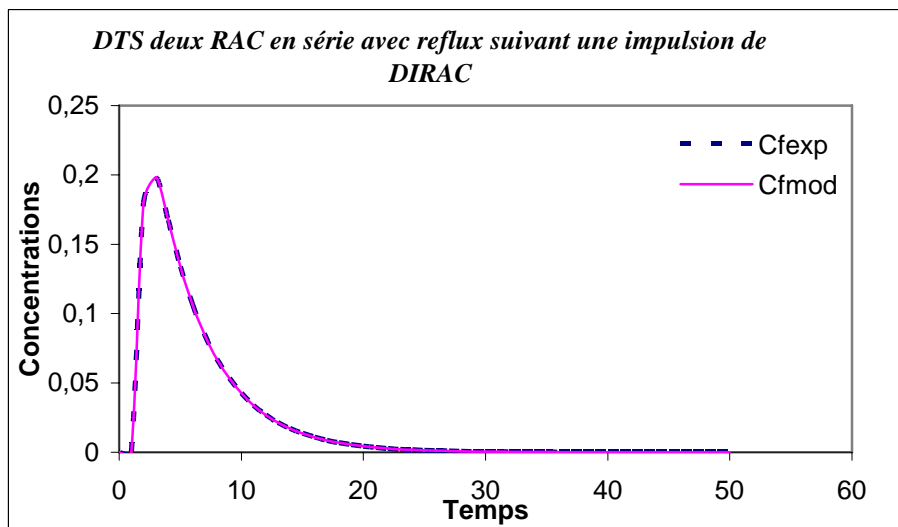
*DTS deux RAC en série suivant une impulsion de Dirac*



Modèle de référence	Formulation RAC numérique



Modèle de référence	Formulation RAC numérique



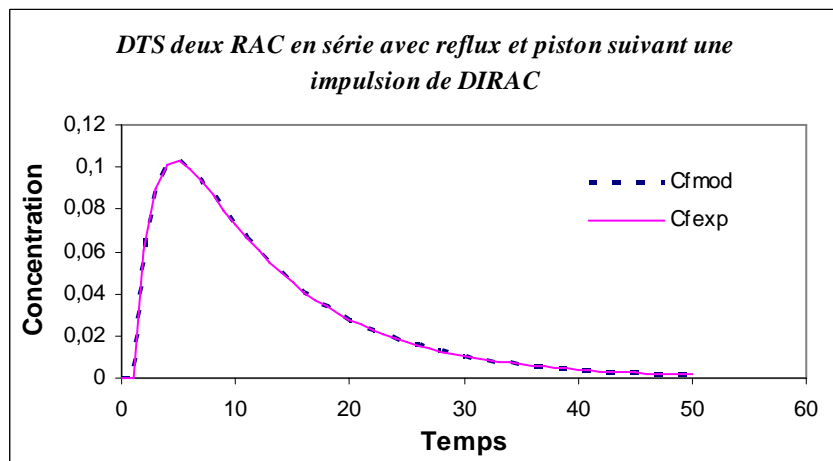
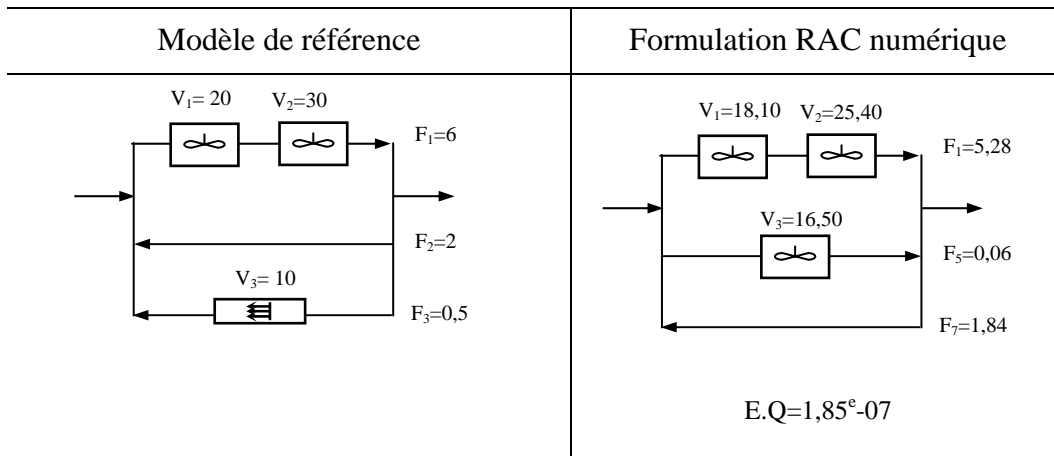
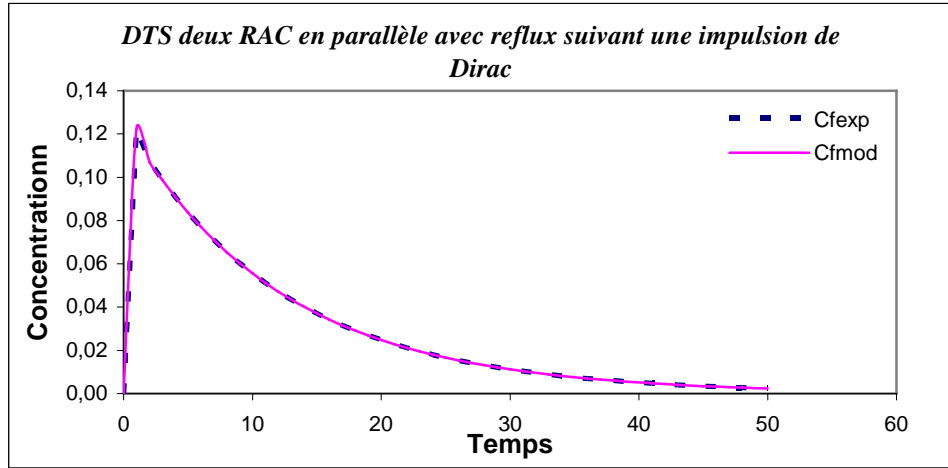
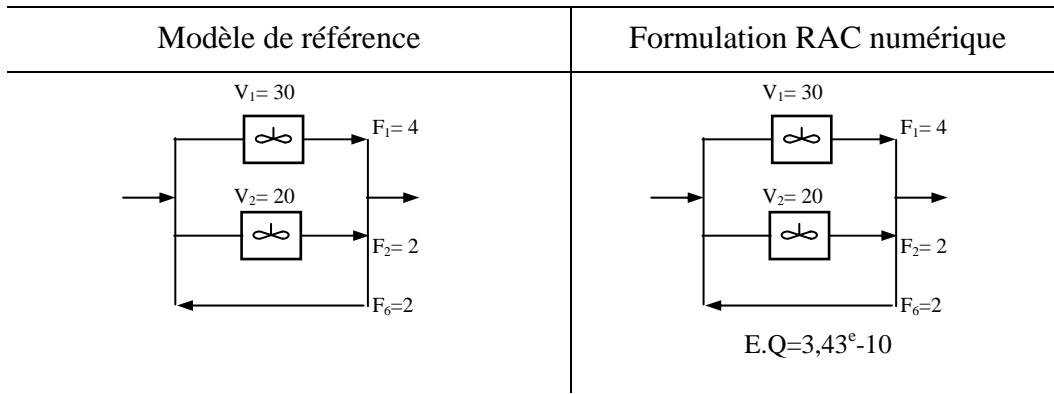


Tableau 6-4. Résultats pour une impulsion de DIRAC.

Les structures obtenues pour les quatre premiers cas sont identiques à la référence, avec des valeurs de l'écart quadratique nulles ou très faibles (de l'ordre de  $10^{-10}$ ), ce qui indique que *GAMS* arrive à retrouver la structure de référence simulée sur Excel avec la même DTS. Cette dernière est présentée pour chaque modèle de référence avec celle du modèle obtenu, ce qui permet de confirmer la qualité des différents résultats vis-à-vis du modèle de référence.

### **3. CONCLUSION**

Cette étude de caractérisation relative à l'utilisation de l'approche systémique pour l'identification paramétrique et structurelle de modèles de procédés s'est avérée intéressante à plusieurs égards. D'une part, les résultats obtenus ont démontré l'existence potentielle de plusieurs structures pouvant donner des DTS très proches d'une courbe de DTS expérimentale. Cela permet d'adapter le choix de la configuration dans des cas réels où certaines contraintes non formulées lors de la résolution du problème MINLP pourraient survenir. De plus, l'utilisation de l'environnement *GAMS* a conduit à l'obtention de résultats sans effort particulier concernant l'initialisation des variables. Par ailleurs, l'efficacité de *SBB* a permis de proposer des superstructures relativement complexes au sein desquelles la solution a été recherchée.

**Annexe 6 -I-. CHOIX DE LA DE DESCRIPTION DU MODÈLE D'ÉCOULEMENT DU RAC..... 3**

<b>1. MÉTHODE ANALYTIQUE.....</b>	<b>7</b>
<b>2. MÉTHODES NUMÉRIQUES .....</b>	<b>7</b>
2.1.    MÉTHODE D'EULER .....	7
2.2.    MÉTHODE DE RUNGE-KUTTA D'ORDRE 2.....	8
2.3.    MÉTHODE DE RUNGE-KUTTA D'ORDRE 4.....	9
<b>3. DISCUSSION DES MÉTHODES NUMÉRIQUES .....</b>	<b>10</b>
<b>4. VALIDATION DU CHOIX DE LA MÉTHODE.....</b>	<b>11</b>

**Annexe 6-II. EXEMPLES DE CARACTERISATION SUIVANT UNE PURGE ECHELON .....** 15

<b>1. RESULTATS AVEC FORMULATION SIGMOÏDE POUR LES REACTEURS PISTONS .....</b>	<b>17</b>
<b>2. RESULTATS SUIVANT FORMULATION BV DU REACTEUR PISTON.....</b>	<b>23</b>



## Annexe 6 -I-

# **CHOIX DE LA MÉTHODE DE DESCRIPTION DU MODÈLE D'ÉCOULEMENT DU RAC**





Cette annexe est dédiée à la représentation d'écoulements correspondant au RAC. Rappelons qu'il n'existe aucune méthode générale permettant de résoudre une équation différentielle, mais seulement une somme de méthodes utilisables dans quelques cas particuliers. La plupart des équations différentielles ne possèdent pas de solution explicite, mais uniquement des solutions approchées déterminées par des méthodes de discrétisation. Certains théorèmes prouvent, dans des conditions assez générales (continuité du champ, champ Lipschitzien,...), l'existence et l'unicité de solutions, mais sans en donner de formules explicites.

Le choix de la méthode pour représenter le modèle n'est pas évident car il existe une gamme importante de méthodes efficaces, permettant de faire une analogie précise entre le modèle physique et la représentation mathématique du problème. Plusieurs contraintes dépendantes du problème et de la nature des besoins des solveurs utilisés ont orienté le choix d'une méthode particulière de modélisation. Ce choix a été effectué suivant plusieurs critères :

- La méthode doit représenter au mieux le RAC dans l'approche systémique.
- Elle doit être adaptable sans modifications majeures en cours de calcul.
- Elle doit pouvoir être utilisée pour représenter, non seulement un seul RAC, mais aussi un ensemble de RAC.
- Elle doit être applicable pour les deux types de stimuli afin de générer un modèle utilisable dans n'importe quelles conditions.

Un caractère important de la superstructure retenue est sa 'globalité', c'est-à-dire sa capacité à inclure toutes les solutions potentielles. Elle comporte de façon évidente des ensembles de RAC en série, c'est d'ailleurs pourquoi un exemple comportant deux RAC en série a été choisi pour valider la procédure.

Il est nécessaire de resituer le cadre des recherches selon l'environnement d'optimisation utilisé, afin de prendre en considération la méthode ayant le moins de contraintes et qui peut être le plus facilement transposable. Dans cette approche, l'identification structurelle et paramétrique est effectuée simultanément. Les travaux

récents de Laquerbe (2001) et de Claudel (2002) sont les seules études envisageant de générer automatiquement des modèles d'écoulement.

Dans la première, l'approche est basée sur le fait que le code permet de résoudre simultanément la génération des structures de modèles et l'estimation de leurs paramètres optimaux. L'identification de la structure des modèles et une boucle d'identification paramétrique pour chaque structure a été mise en oeuvre dans le but de faire correspondre les paramètres de cette structure à une courbe expérimentale issue de la courbe de DTS. La génération des structures réside dans le choix de modèles élémentaires d'écoulements et la détermination de leurs connexions. Des procédures stochastiques ont été implémentées : le recuit simulé et un algorithme génétique.

Dans la seconde, un algorithme de résolution mathématique suivant la théorie de la logique floue a été mis en place. Cette méthode se base sur les deux principes de la théorie de Zadeh, l'ajout de l'incertitude et l'élimination de l'incertitude. Ces deux principes forment les deux valeurs utilisées dans la logique possibiliste, à savoir, le degré de possibilité et le degré de certitude.

L'équation différentielle décrivant le RAC étant :

$$\frac{dC_{out}}{dt} = \frac{F_{in}}{V} \cdot (C_{in} - C_{out}) \quad (A6-1)$$

Soit une équation différentielle d'ordre 1, elle peut être résolue selon :

- une méthode de résolution analytique,
- une méthode de résolution numérique.

Des deux types d'injections étudiés, celle de Dirac est la plus difficile à réaliser expérimentalement ; elle implique un temps de passage inférieur au centième du temps de passage total dans le système. Sa représentation mathématique utilise une tranche de temps  $\Delta t$ , négligeable par rapport au temps total.

Un exemple comprenant une impulsion de type Dirac représenté à travers une loi normale est traité dans ce qui suit afin de démontrer les difficultés de résolution engendrées lors de l'utilisation d'une méthode analytique.

## 1. MÉTHODE ANALYTIQUE

L'utilisation de ce type de méthode requiert une connaissance exacte de l'injection. Dans le cas d'un Dirac pur, deux méthodes potentiellement intéressantes peuvent être traitées : soit la transformée de Laplace où la variable temps  $t$  est remplacée par une fonction de transfert  $s$ , soit l'injection peut être assimilée à une loi normale. Dans ce second cas, on calcule l'intégrale de l'équation différentielle afin de déterminer une formule analytique permettant de décrire l'écoulement dans le RAC.

Après examen des techniques de résolution la voie analytique est réfutée pour plusieurs raisons implicites du problème traité (nature variable, modélisation structurelle, etc.)

## 2. MÉTHODES NUMÉRIQUES

Les méthodes d'intégration numérique d'équations différentielles ordinaires sont actuellement très connues. Trois méthodes sont appliquées à la modélisation de réacteurs en série.

### 2.1. MÉTHODE D'EULER

Utilisée pour la résolution des équations différentielles d'ordre 1 de forme :

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = f(t, y) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases} \quad (\text{A6-2})$$

elle repose sur le développement en série de Taylor de la fonction  $y(t)$  :

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + (t_{i+1} - t_i) y'(t_i) + \frac{(t_{i+1} - t_i)^2}{2} y''(t_i) + \dots \quad (\text{A6-3})$$

En posant  $h = t_{i+1} - t_i$ , la méthode d'Euler consiste à calculer  $y(t_{i+1})$  à partir de  $y(t_i)$  par la formule :

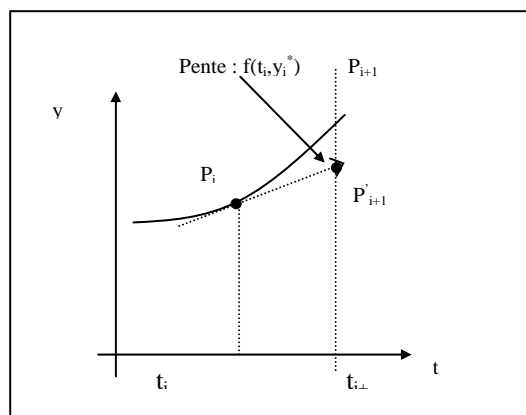
$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + hf(t_i, y(t_i)) \quad (\text{A6-4})$$

L'erreur locale faite sur cette approximation est de l'ordre  $h^2$ . Cette erreur s'accumule au fur et à mesure que l'on progresse dans le temps. L'erreur globale dépend linéairement du pas  $h$ .

Suivant cette méthode, l'équation différentielle représentant le RAC 1 s'écrit :

$$C_1^{i+1} = \frac{h}{\tau} (C_0^i - C_1^i) + C_1^i \text{ avec } C_0^{(t=0)} = 1 \quad (\text{A6-5})$$

Une autre approche serait d'utiliser la forme d'Euler améliorée, qui correspondrait au développement de la fonction de série Taylor à l'ordre 3. Cette formule permet de diminuer l'erreur commise au cours des itérations.



**FIGURE 6A-1. PRINCIPE DE LA METHODE D'EULER.**

## **2.2. MÉTHODE DE RUNGE-KUTTA D'ORDRE 2**

Afin d'améliorer la précision des intégrations, Runge et Kutta ont proposé des méthodes s'appuyant sur le développement de Taylor pour deux variables  $(t,y)$  appliqués à la fonction  $f(t,y)$ . Le principe de ces méthodes consiste à calculer des points intermédiaires pour déterminer avec plus de précision le  $i+1^{\text{ème}}$  point à partir du dernier point calculé. La méthode d'ordre 2 est appelée, la méthode d'ordre 4 plus couramment utilisée, est également indiquée.

Dans la méthode d'ordre deux, on assimile le tronçon de la courbe sur l'intervalle  $h$  entre les points  $P_i$  et  $P_{i+1}$  à un arc de parabole. La tangente à la courbe au milieu  $M_i$  est parallèle à la corde  $[P_i; P_{i+1}]$ . On trouve la position du point  $M_i$  par approximation par la méthode d'Euler. Les coordonnées de  $M_i$  sont donc :

$$M \begin{cases} t_i + \frac{h}{2} \\ y(t_i) + \frac{hf(t_i, y(t_i))}{2} \end{cases} \quad (\text{A6-6})$$

La pente de la tangente en  $M(y'(t_i))$  donne la pente de la droite  $[P_i; P_{i+1}]$ , d'où le calcul des coordonnées de  $P_{i+1}$  :

$$\left\{ \begin{array}{l} P_{i+1} = t_i + h \\ y(t_i) + hf \left( t_i + \frac{h}{2}, y(t_i) + \frac{h}{2} f(t_i, y(t_i)) \right) \end{array} \right. \quad (\text{A6-7})$$

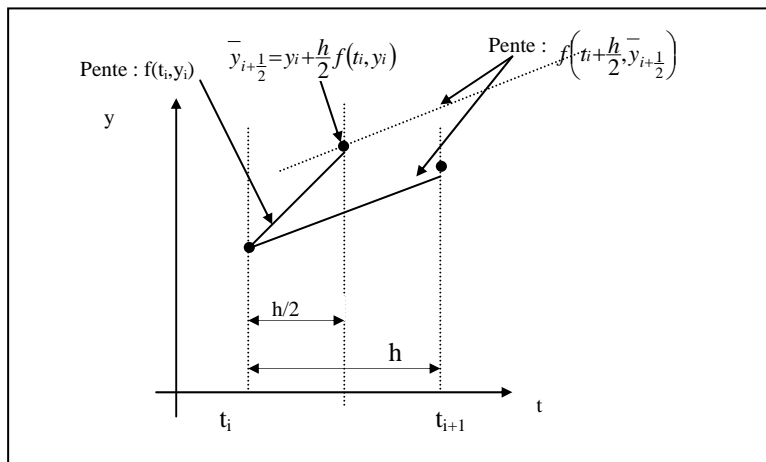


Figure 6A-2. Principe de la méthode de Runge-Kutta d'ordre 2.

### 2.3. METHODE DE RUNGE-KUTTA D'ORDRE 4

La méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 est la procédure d'intégration numérique la plus couramment employée. Elle trouve un juste équilibre entre lourdeur des calculs et précision du résultat.

Basée sur le même principe que la méthode d'ordre 2, le calcul du  $(i+1)^{\text{ième}}$  point par la méthode de Runge-Kutta d'ordre 4, nécessite les calculs suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} t_{i+1} = t_i + h \\ y_{i+1} = y_i + \frac{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}{6} \end{array} \right. \quad (\text{A6-8})$$

$$\begin{cases} k_1 = h \cdot f(t_i, y_i) \\ k_2 = h \cdot f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_1}{2}\right) \\ k_3 = h \cdot f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_2}{2}\right) \\ k_4 = h \cdot f(t_i + h, y_i + k_3) \end{cases} \quad (\text{A6-9})$$

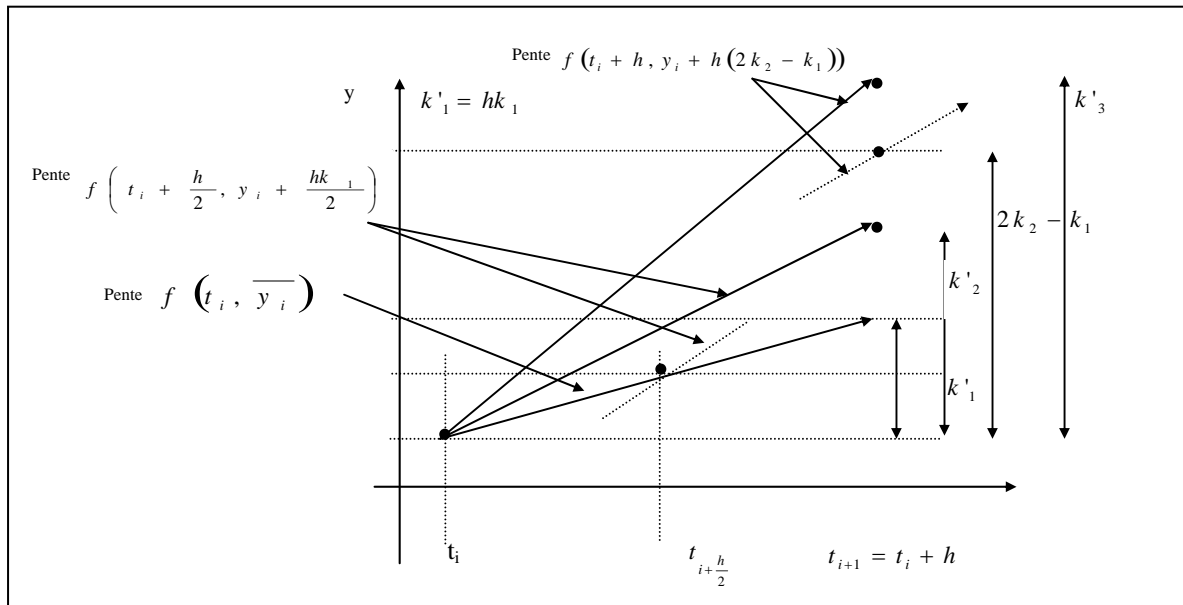


Figure 6A-3. Principe de la méthode de Runge-kutta d'ordre 4.

### 3. DISCUSSION DES MÉTHODES NUMÉRIQUES

La méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 est la plus couramment utilisée ; elle nécessite la détermination des coefficients de Kutta ( $K_1, K_2, K_3, K_4$ ), d'où des temps de calcul plus importants que les méthodes d'Euler. Cette méthode est plus efficace que les deux autres mentionnées ci-dessus dans le cas où les pentes sont raides (Stiff), c'est à dire que la réponse présente des variations importantes au niveau des pentes.

Par contre, dans le cas où les courbes sont peu inclinées, l'application de la méthode de Runge-Kutta engendre un temps de calcul important pour un gain de précision très faible, par rapport à la procédure d'Euler.

Dans le domaine des RAC, l'évolution de la concentration au cours du temps suit une tendance continue avec des valeurs de pentes entre les différents points assez

faibles. La méthode d'Euler paraît la plus appropriée pour traiter le problème, en réalisant un bon compromis entre précision et rapidité des calculs.

#### 4. VALIDATION DU CHOIX DE LA MÉTHODE

Afin de valider le choix de la méthode d'Euler, une structure a été simulée selon deux approches : analytique et numérique. La première correspond à l'application de la transformée de Laplace, et la seconde concerne la mise en œuvre de la formule d'Euler. La structure simulée est la même que celle déjà utilisée, elle comporte deux RAC en série suivant une impulsion de DIRAC, et est rappelée dans la figure (A6-4).

Le choix de cette structure comme exemple n'est pas anodin, il obéit au fait que la plus part des DTS peuvent potentiellement impliquer des solutions de ce type.

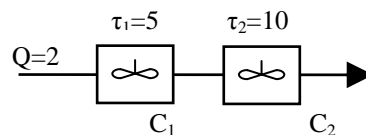


Figure A6-4. Exemple traité.

Les valeurs des différents paramètres sont fixées :  $\tau_1$  et  $\tau_2$  prennent les valeurs respectives de 5 et 10 et le débit d'entrée est choisi égal à 2.

Les équations décrivant l'évolution de la concentration de sortie du premier et second réacteur en fonction du temps suivant les deux méthodes s'écrivent sous la forme suivante :

- **Méthode d'Euler:**

$$C_i^{(t+1)} = \frac{\Delta t}{\tau_i} (C_{i-1}^{(t)} - C_i^{(t)}) + C_i^{(t)} \quad (\text{A6-10})$$

où  $i$  représente l'indice de sortie du réacteur.

- **Méthode de la transformée de Laplace :**



$$C_1^{(t)} = \frac{1}{\tau_1} \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) \quad (\text{A6-11})$$

$$C_2^{(t)} = \left[\frac{1}{\tau_1} - \frac{\tau_2}{\tau_1(\tau_2 - \tau_1)}\right] \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) + \left[\frac{1}{(\tau_2 + \tau_1)}\right] \exp\left(-\frac{t}{\tau_2}\right) \quad (\text{A6-12})$$

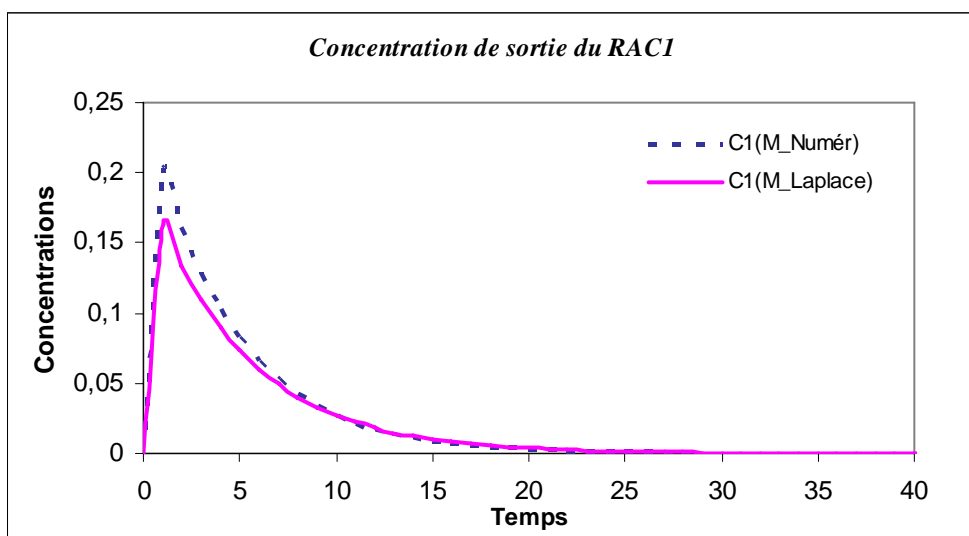
Les concentrations de sortie des deux réacteurs, les écarts quadratiques ainsi que leurs sommes sont présentées dans le tableau suivant :

t	Cin <sup>(t)</sup>	méthode d'Euler		Transformée de Laplace		Ecart quadratique	
		C <sub>E1</sub> <sup>(t)</sup>	C <sub>E2</sub> <sup>(t)</sup>	C <sub>L1</sub> <sup>(t)</sup>	C <sub>L2</sub> <sup>(t)</sup>	(C <sub>E1</sub> -C <sub>L1</sub> ) <sup>2</sup>	(C <sub>E2</sub> -C <sub>L2</sub> ) <sup>2</sup>
0	1	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
1	0	2,00E-01	0,00E+00	1,64E-01	1,72E-02	1,31E-03	2,97E-04
2	0	1,60E-01	2,00E-02	1,34E-01	2,97E-02	6,73E-04	9,37E-05
3	0	1,28E-01	3,40E-02	1,10E-01	3,84E-02	3,33E-04	1,94E-05
4	0	1,02E-01	4,34E-02	8,99E-02	4,42E-02	1,57E-04	6,37E-07
5	0	8,19E-02	4,93E-02	7,36E-02	4,77E-02	6,96E-05	2,46E-06
6	0	6,55E-02	5,26E-02	6,02E-02	4,95E-02	2,81E-05	9,23E-06
7	0	5,24E-02	5,39E-02	4,93E-02	5,00E-02	9,67E-06	1,49E-05
8	0	4,19E-02	5,37E-02	4,04E-02	4,95E-02	2,45E-06	1,79E-05
9	0	3,36E-02	5,25E-02	3,31E-02	4,83E-02	2,45E-07	1,84E-05
10	0	2,68E-02	5,06E-02	2,71E-02	4,65E-02	5,00E-08	1,71E-05
11	0	2,15E-02	4,83E-02	2,22E-02	4,44E-02	4,70E-07	1,48E-05
12	0	1,72E-02	4,56E-02	1,81E-02	4,21E-02	9,29E-07	1,22E-05
13	0	1,37E-02	4,27E-02	1,49E-02	3,97E-02	1,23E-06	9,55E-06
14	0	1,10E-02	3,98E-02	1,22E-02	3,72E-02	1,36E-06	7,21E-06
15	0	8,80E-03	3,70E-02	9,96E-03	3,47E-02	1,35E-06	5,24E-06
16	0	7,04E-03	3,41E-02	8,15E-03	3,22E-02	1,24E-06	3,67E-06
17	0	5,63E-03	3,14E-02	6,67E-03	2,99E-02	1,09E-06	2,46E-06
18	0	4,50E-03	2,89E-02	5,46E-03	2,76E-02	9,24E-07	1,58E-06
19	0	3,60E-03	2,64E-02	4,47E-03	2,54E-02	7,59E-07	9,54E-07
20	0	2,88E-03	2,41E-02	3,66E-03	2,34E-02	6,10E-07	5,34E-07
21	0	2,31E-03	2,20E-02	3,00E-03	2,15E-02	4,81E-07	2,68E-07
22	0	1,84E-03	2,00E-02	2,46E-03	1,97E-02	3,73E-07	1,12E-07
23	0	1,48E-03	1,82E-02	2,01E-03	1,80E-02	2,86E-07	3,18E-08
24	0	1,18E-03	1,65E-02	1,65E-03	1,65E-02	2,17E-07	2,27E-09
25	0	9,44E-04	1,50E-02	1,35E-03	1,51E-02	1,63E-07	3,67E-09
26	0	7,56E-04	1,36E-02	1,10E-03	1,38E-02	1,21E-07	2,22E-08
27	0	6,04E-04	1,23E-02	9,03E-04	1,25E-02	8,93E-08	4,84E-08
28	0	4,84E-04	1,11E-02	7,40E-04	1,14E-02	6,55E-08	7,62E-08
29	0	3,87E-04	1,01E-02	6,06E-04	1,04E-02	4,78E-08	1,02E-07
30	0	3,09E-04	9,11E-03	4,96E-04	9,46E-03	3,47E-08	1,23E-07
31	0	2,48E-04	8,23E-03	4,06E-04	8,60E-03	2,51E-08	1,39E-07
32	0	1,98E-04	7,43E-03	3,32E-04	7,82E-03	1,80E-08	1,50E-07
33	0	1,58E-04	6,71E-03	2,72E-04	7,10E-03	1,29E-08	1,57E-07
34	0	1,27E-04	6,05E-03	2,23E-04	6,45E-03	9,21E-09	1,58E-07

35	0	1,01E-04	5,46E-03	1,82E-04	5,86E-03	6,56E-09	1,57E-07
36	0	8,11E-05	4,93E-03	1,49E-04	5,32E-03	4,65E-09	1,52E-07
37	0	6,49E-05	4,44E-03	1,22E-04	4,82E-03	3,29E-09	1,46E-07
38	0	5,19E-05	4,00E-03	1,00E-04	4,37E-03	2,32E-09	1,38E-07
39	0	4,15E-05	3,61E-03	8,19E-05	3,97E-03	1,63E-09	1,28E-07
40	0	3,32E-05	3,25E-03	6,71E-05	3,60E-03	1,15E-09	1,19E-07
41	0	2,66E-05	2,93E-03	5,49E-05	3,26E-03	8,04E-10	1,09E-07
42	0	2,13E-05	2,64E-03	4,50E-05	2,95E-03	5,62E-10	9,91E-08
43	0	1,70E-05	2,38E-03	3,68E-05	2,68E-03	3,92E-10	8,96E-08
44	0	1,36E-05	2,14E-03	3,01E-05	2,43E-03	2,73E-10	8,06E-08
45	0	1,09E-05	1,93E-03	2,47E-05	2,20E-03	1,90E-10	7,21E-08
46	0	8,71E-06	1,74E-03	2,02E-05	1,99E-03	1,32E-10	6,41E-08
47	0	6,97E-06	1,56E-03	1,65E-05	1,80E-03	9,17E-11	5,69E-08
48	0	5,58E-06	1,41E-03	1,35E-05	1,63E-03	6,35E-11	5,02E-08
49	0	4,46E-06	1,27E-03	1,11E-05	1,48E-03	4,40E-11	4,42E-08
50	0	3,57E-06	1,14E-03	9,08E-06	1,34E-03	3,04E-11	3,87E-08
Somme						2,60E-03	5,51E-04

*Tableau A6-1. DTS simulée suivant la transformée de Laplace et la méthode d'Euler.*

Les courbes de DTS de sortie du RAC 1 suivant les deux méthodes sont présentées dans la figure suivante :



*Figure A6-5. DTS du RAC1.*

L'écart quadratique obtenu entre les deux courbes est égal à  $2,6 \times 10^{-3}$  (EQ relatif  $\approx 5,2 \times 10^{-5}$ ). Les courbes ont la même allure, on remarque que l'écart est plus important au niveau des pics. Ceci est dû au degré de précision des deux méthodes. Certes, il existe un écart au niveau des points de départ (écart quadratique de l'ordre de  $1 \times 10^{-4}$ ) qui a

tendance à disparaître par la suite (en se ramenant à  $1e-10$ ), mais la méthode d'Euler arrive rapidement à retrouver l'allure de la réponse analytique.

Les courbes de DTS de sortie du RAC 2 suivant les deux méthodes sont présentées dans la figure suivante :

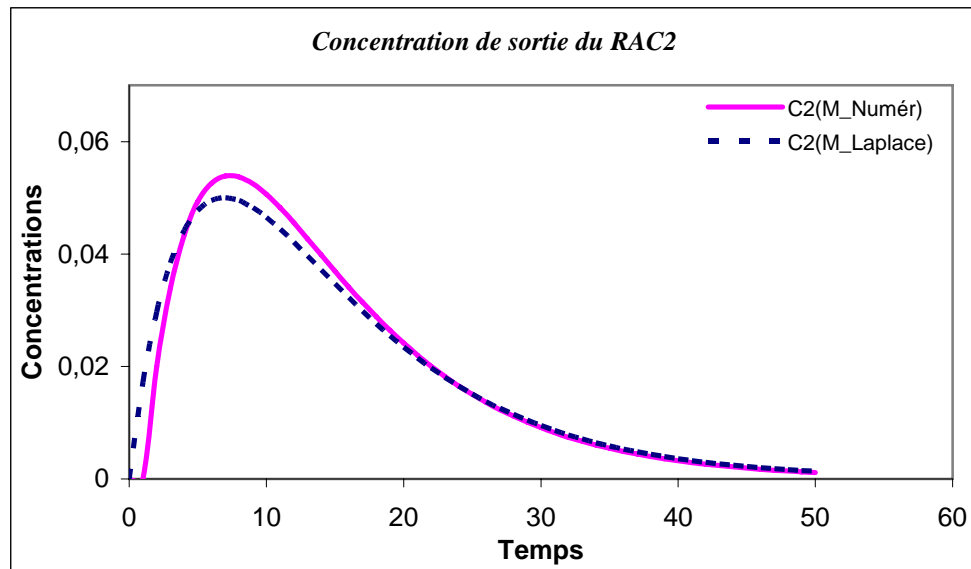


Figure A6-6. DTS du RAC2.

L'écart quadratique obtenu entre les deux courbes est égal à  $5,51 \times 10^{-4}$  (EQ relatif =  $1,1 \times 10^{-5}$ ). Les mêmes remarques que celles formulées au sujet des courbes précédentes peuvent être formulées.

D'après l'exemple utilisé, les résultats obtenus selon deux méthodes classiques, mais de nature différente, ont permis de les comparer. Les deux méthodes donnent des résultats similaires, montrant que la méthode numérique d'Euler conduit à des résultats fiables, même pour des courbes de DTS ayant des allures très différentes, comme c'est le cas pour celles des figures (A6-5) et (A6-6).

Dans le cas d'une impulsion Dirac, la méthode analytique nécessite l'intégration de l'équation différentielle (A6-1) pour chaque réacteur, d'où une complexité importante de résolution dans le cas où la superstructure contient un nombre important de réacteurs en série. Dans ce cas, la résolution du problème en utilisant une formulation numérique est plus simple à traiter. La méthode d'Euler sera donc utilisée lors de la modélisation du problème.

## Annexe 6 -II-

### **EXEMPLES DE CARACTERISATION SUIVANT UNE PURGE ECHELON**



Dans cette annexe, des cas de structures sont simulées avec la superstructure globale suivant une formulation de RAC intégrale. La formulation des réacteurs pistons est effectuée selon la formulation sigmoïde et BV. La description de la formulation BV est présentée dans le chapitre 7.

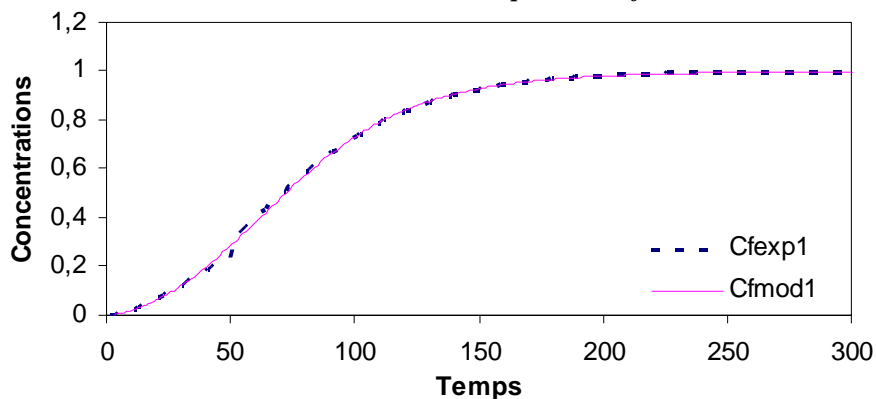
Dans certains cas, les paramètres et les structures ont été choisies telles que la DTS expérimentale obtenue révèle certaines discontinuités qui sont rarement constatées expérimentalement (Claudel, 2002). Selon la fonction objectif utilisée, le paramètre de pénalité est modifié pour analyser son impact général sur l'efficacité des solutions obtenus. Ce choix est effectué pour vérifier les capacités de *SBB* à traiter des problèmes présentant certaines discontinuités.

## 1. RESULTATS AVEC FORMULATION SIGMOÏDE POUR LES REACTEURS PISTONS

Le tableau A6-1 présente les résultats obtenus pour une structure fixée avec des paramètres choisis au hasard.

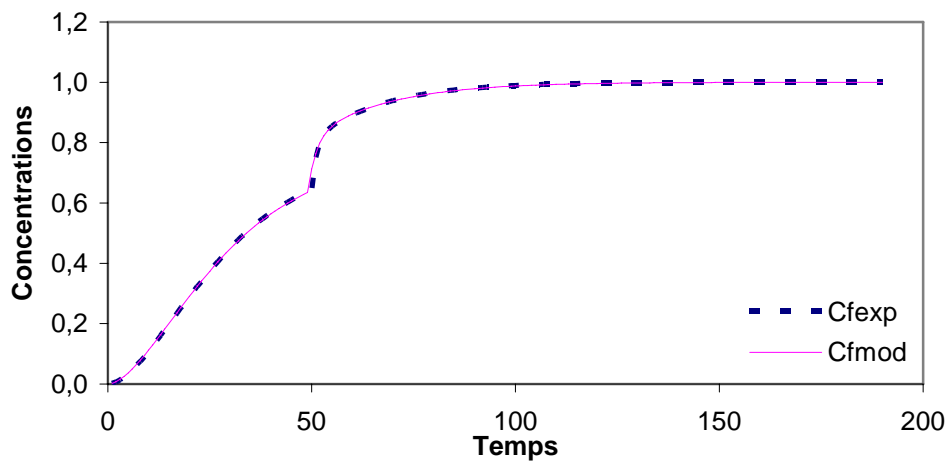
Modèle de référence	Formulation RAC intégrale

*DTS de 2 RAC en série avec piston et reflux.*



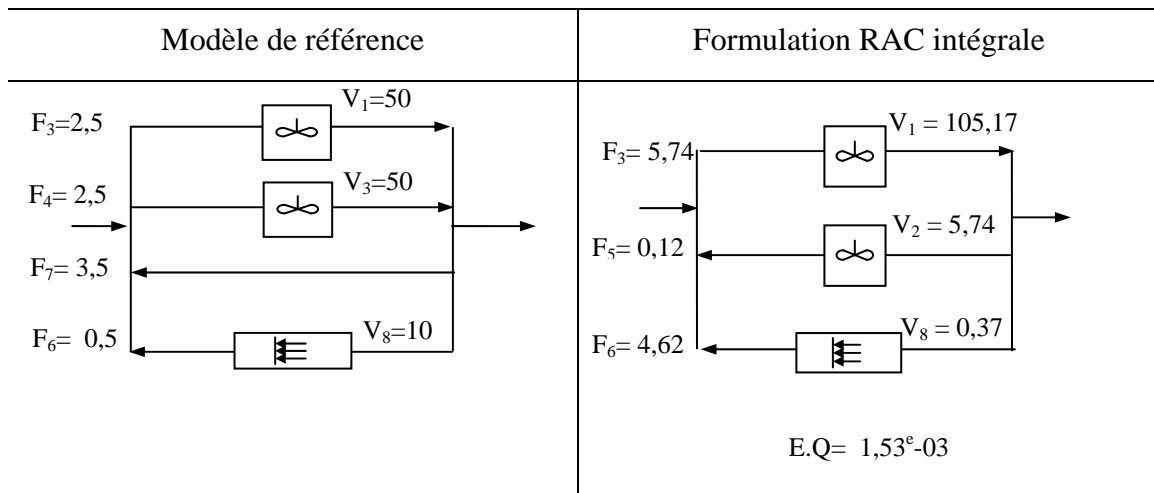
Modèle de référence	Formulation RAC intégrale
<p> <math>V_1 = 100</math>   <math>V_2 = 100</math>  <math>F_3 = 6</math>  <math>F_7 = 2</math>  <math>F_6 = 1</math>  <math>V_8 = 50</math> </p>	<p> <math>V_1 = 147,69</math>   <math>V_2 = 60,95</math>  <math>F_3 = 8,12</math>  <math>F_7 = 5,96</math>  <math>F_2 = 0,84</math>  <math>V_7 = 41,37</math>  <math>E.Q = 5,68^e-03</math> </p>

*DTS de 2 RAC avec reflux et réacteur piston*

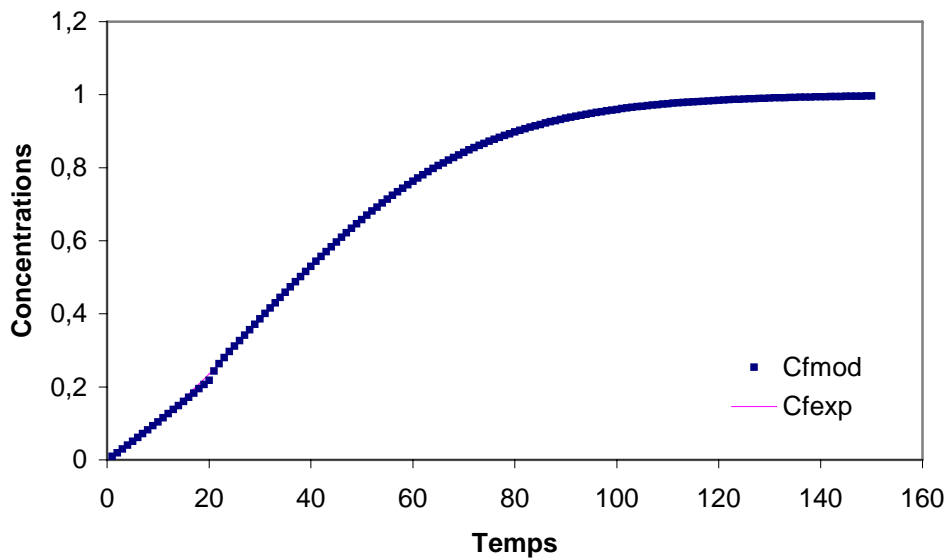


*Tableau A6-1. Résultats pour une purge échelon.*

Le tableau A6-2 présente les résultats de simulations effectuées pour deux structures identiques mais avec des valeurs paramétriques différentes. On remarque que le deuxième exemple présente une discontinuité au niveau de la courbe de DTS. Dans les deux cas, *GAMS* obtient des structures relativement différentes mais dont les concentrations fournies par les modèles sont proches.



*DTS de deux RAC parallèle avec reflux et réacteur piston*



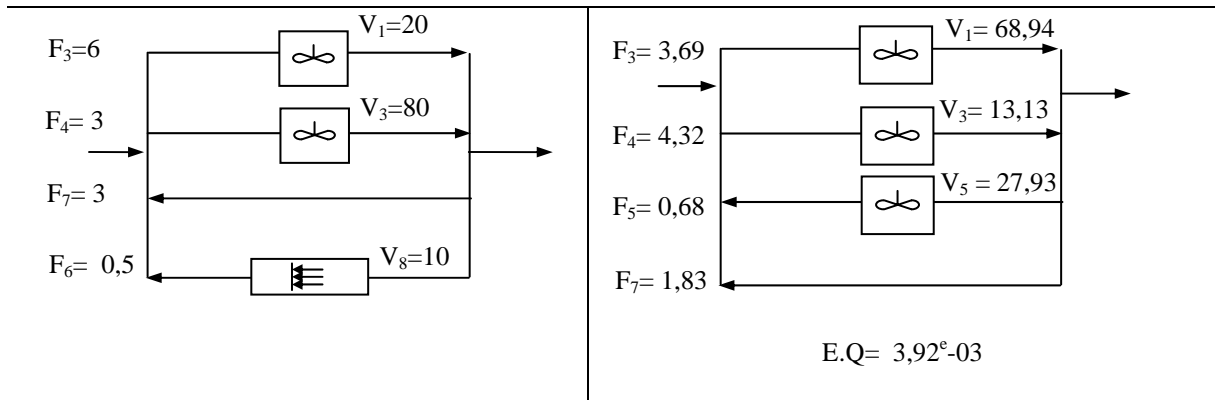
**Tableau A6-2. Résultats pour une purge échelon.**

Une étude effectuée sur une structure où le paramètre pénalisant la fonction objectif avec les modules élémentaires est modifié, est présentée sur tableau A6-3

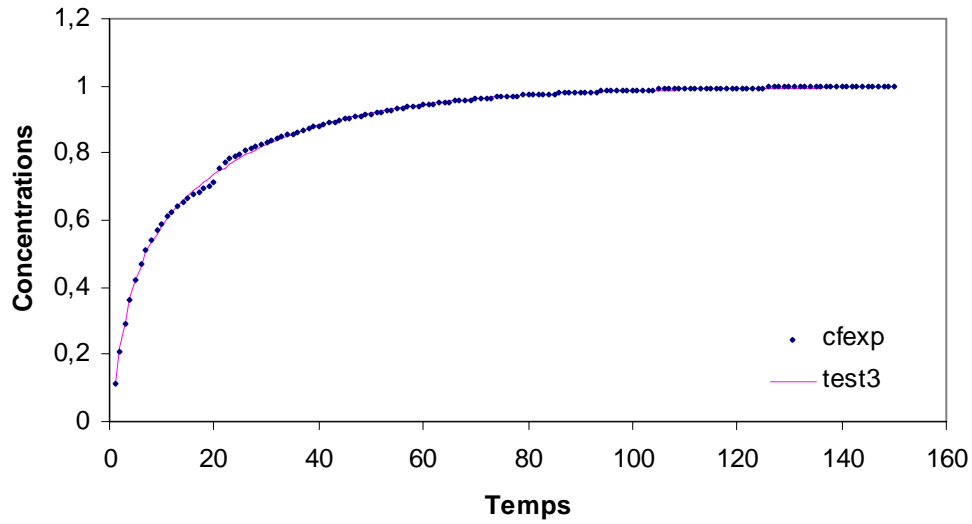


Modèle de référence	Formulation RAC intégrale
---------------------	---------------------------

$$Fct\_Obj = 1e05 * \sum_{i=1}^{i_{max}} (C_{f\ mod}^{(i)} - C_{exp}^{(i)})^2 + \sum_{j=1}^8 y_j$$

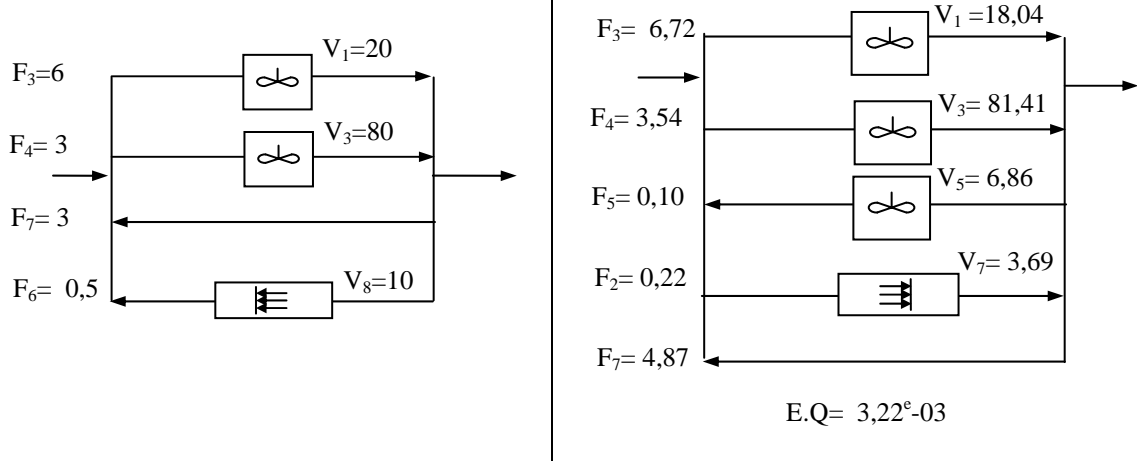


*DTS de 2 RAC en parallèle avec reflux et réacteur piston*

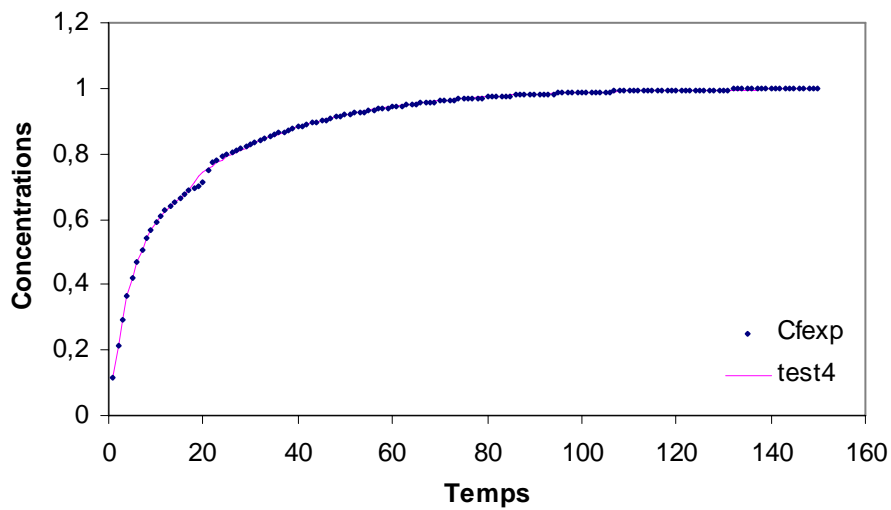


Modèle de référence	Formulation RAC intégrale
---------------------	---------------------------

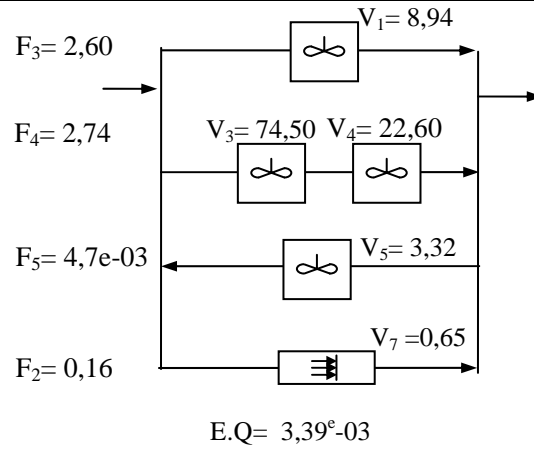
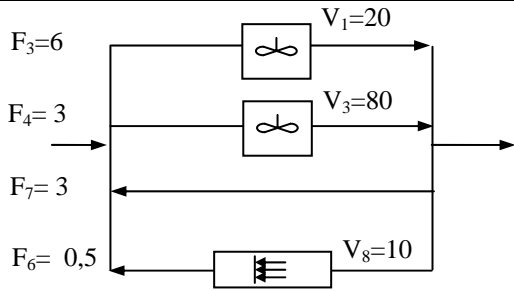
$$Fct\_Obj = 1e05 * \sum_{i=1}^{i_{max}} (C_{f\ mod}^{(i)} - C_{exp}^{(i)})^2 + 0,1 * \sum_{j=1}^8 y_j$$



*DTS de 2 RAC en parallèle avec reflux et réacteur piston*



$$Fct\_Obj = 1e05 * \sum_{i=1}^{i_{max}} (C_{f\ mod}^{(i)} - C_{exp}^{(i)})^2 + 10 * \sum_{j=1}^8 y_j$$



DTS de 2 RAC en parallèle avec reflux et réacteur piston

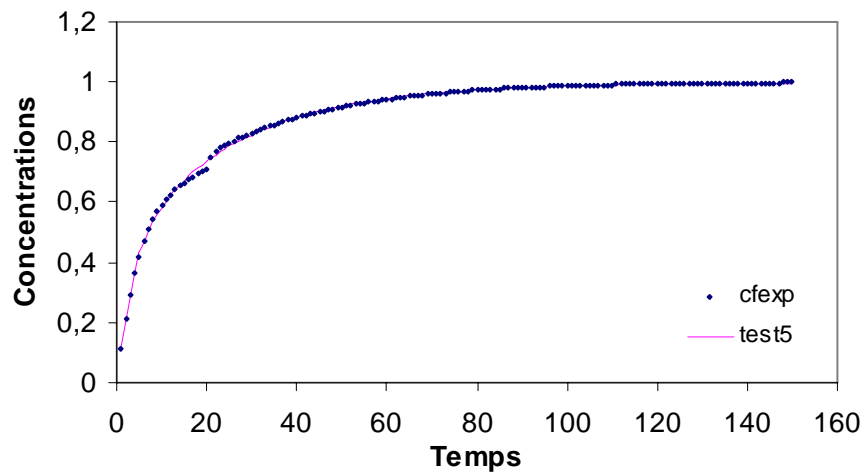
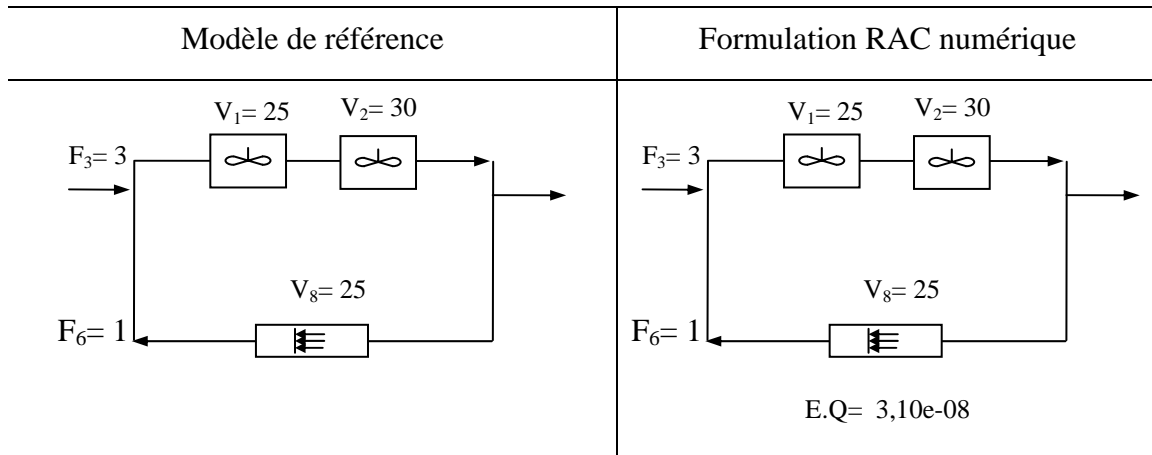


Tableau A6-3. Résultats pour une purge échelon.

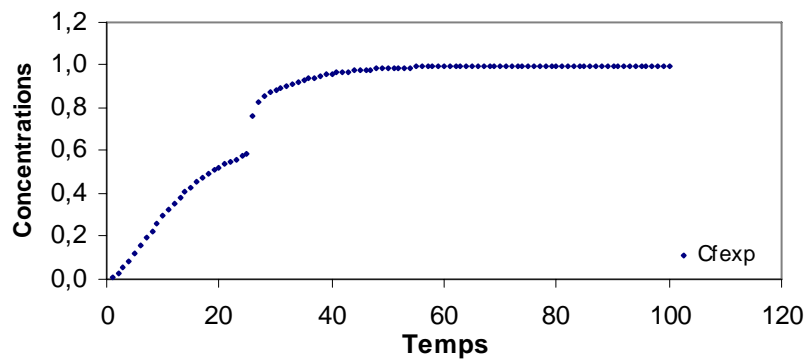
D'après les résultats du tableau A6-3, on constate que l'accroissement de la valeur du coefficient de pénalisation n'a aucun effet significatif sur les solutions obtenues.

## 2. RESULTATS SUIVANT FORMULATION BV DU REACTEUR PISTON

Dans cette partie, le réacteur piston est représenté par une formulation BV, les solutions sont données dans le tableau A6-4.

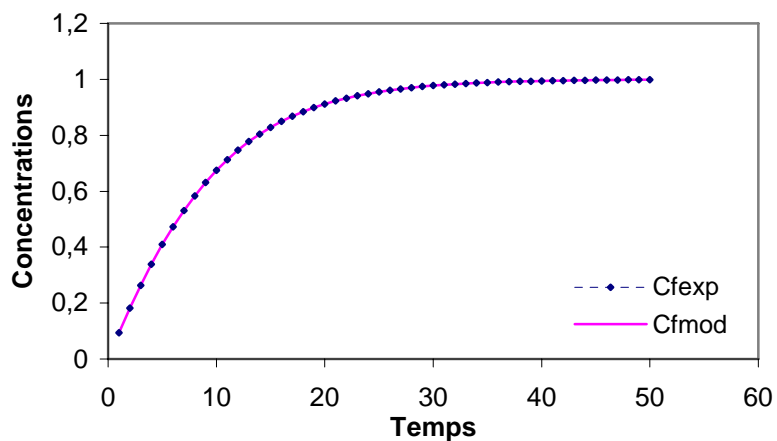


*DTS de 2 RAC en série avec réacteur piston*



Modèle de référence	Formulation RAC intégrale
	<p style="text-align: center;">E.Q= 1,89e-14</p>

*DTS de 2RAC en parallèle avec reflux*

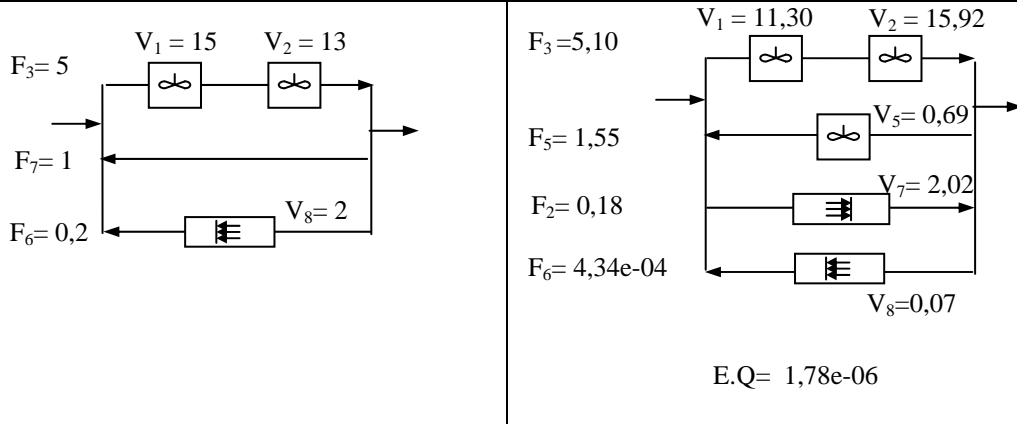


*Tableau A6-4. Résultats pour une purge échelon.*

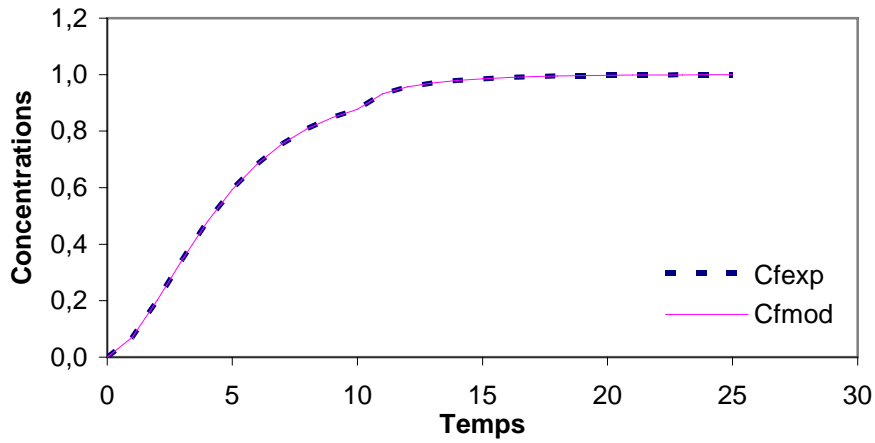
La même étude que précédemment où le paramètre pénalisant la fonction objectif avec les modules élémentaires est modifié, est présentée sur tableau A6-5

Modèle de référence	Formulation RAC intégrale
---------------------	---------------------------

$$FctObj = 1e05 * \sum_{i=1}^{i_{max}} (C_{f\ mod}^{(i)} - C_{exp}^{(i)})^2 + \sum_{j=1}^8 y_j$$

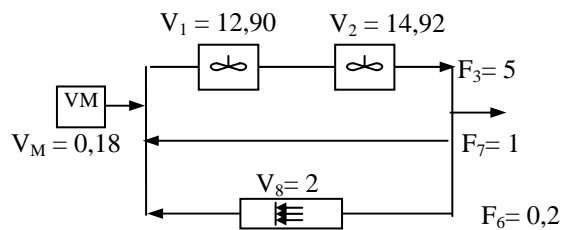
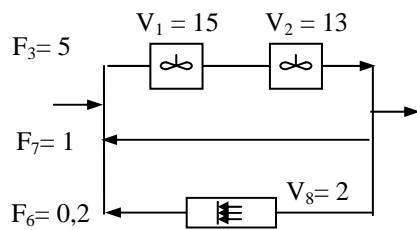


*DTS de 2 RAC en série avec reflux et réacteur piston*



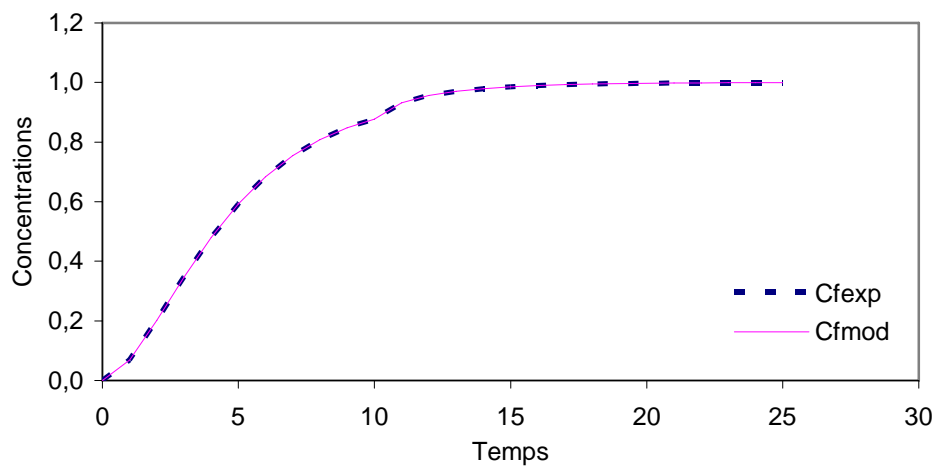
Modèle de référence	Formulation RAC intégrale
---------------------	---------------------------

$$Fct\_Obj = 1e04 * \sum_{i=1}^{i_{max}} (C_{f\ mod}^{(i)} - C_{f\ exp}^{(i)})^2 + \sum_{j=1}^8 y_j$$



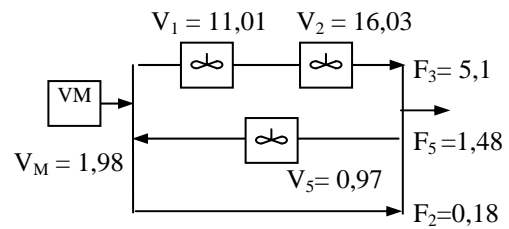
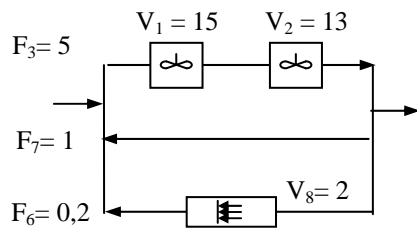
E.Q= 1,4e-08

*DTS de 2 RAC en série avec reflux et réacteur piston*



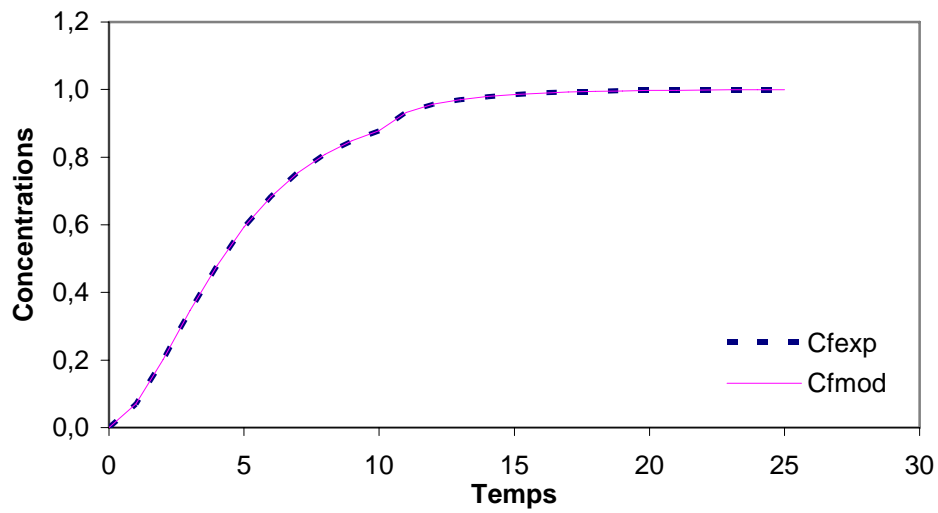
Modèle de référence	Formulation RAC intégrale
---------------------	---------------------------

$$Fct\_Obj = 1e04 * \sum_{i=1}^{i_{max}} (C_{f\ mod}^{(i)} - C_{f\ exp}^{(i)})^2 + 10 * \sum_{j=1}^8 y_j$$



E.Q= 3,78e-06

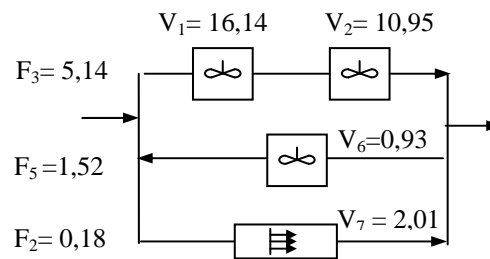
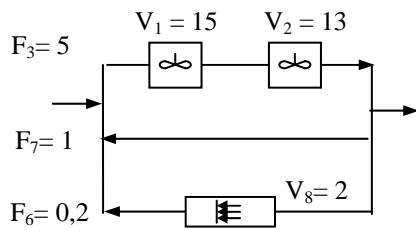
*DTS de 2 RAC en série avec reflux et réacteur piston*





Modèle de référence	Formulation RAC intégrale
---------------------	---------------------------

$$FctObj = 1e03 * \sum_{i=1}^{i_{max}} (C_{f\ mod}^{(i)} - C_{f\ exp}^{(i)})^2 + \sum_{j=1}^8 y_j$$



E.Q= 5,47e-06

#### DTS de 2 RAC en série avec reflux et réacteur piston

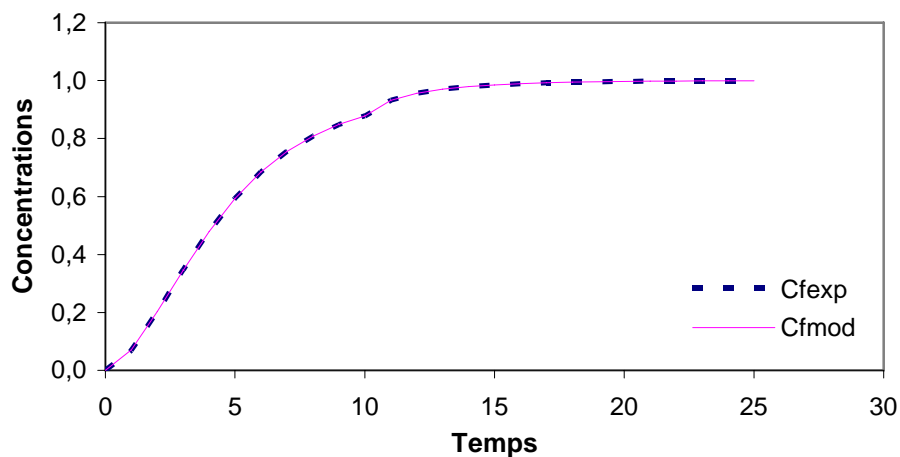


Tableau A6-5. Résultats pour une purge échelon.

Les résultats obtenus ne présentent pas de disparité particulière, le nombre de modules élémentaires est quasiment le même pour l'ensemble des simulations (4 ou 5). L'ordre de grandeur des différents écarts quadratiques indique bien que les structures sont très proches.

# Chapitre 7

## **IDENTIFICATION DE PROCÉDÉS EN RÉGIME DYNAMIQUE**

Études de cas



## **1. INTRODUCTION**

Ce chapitre 7 à trait à l'étude du comportement dynamique d'un ensemble de réacteurs. Compte tenu du très grand nombre de domaines d'applications, l'étude est restreinte à celle des écoulements dans des enceintes de confinement, et plus particulièrement dans des locaux ventilés.

Ce chapitre comporte trois grandes sections. La première est consacrée à la ventilation industrielle, en insistant tout particulièrement sur les différentes voies de modélisation utilisées. La seconde partie valide la méthode de modélisation, l'approche systémique, sur trois exemples issus de la littérature. Dans la dernière, un local expérimental du CEA, l'enceinte Mélanie, est modélisé à l'aide de trois superstructures et avec deux discrétisations différentes de l'horizon de temps. Les résultats sont comparés avec ceux obtenus lors de la précédente étude de Laquerbe (1999).

## **2. RAPPEL SUR LA VENTILATION INDUSTRIELLE**

### **2.1. RISQUES INDUSTRIELS ET ROLE DE LA VENTILATION**

La ventilation est devenue un outil majeur pour la maîtrise des risques lors de la conception d'unités industrielles. Son essor est fortement lié à la prise de conscience collective de la notion d'industries « propres » et « sûres ». La ventilation inhérente aux transferts d'aérocontaminants (espèces gazeuses ou particulières en suspension dans l'air) s'est développée dans deux secteurs bien distincts : la ventilation d'intérieurs pour l'industrie du bâtiment, et la ventilation industrielle au sens large. Cette dernière a été principalement initiée par l'industrie minière, et a ensuite suivi le développement d'autres secteurs tels l'agroalimentaire, l'industrie pharmaceutique, la micro-électronique et surtout l'industrie nucléaire.

Les principales différences entre l'ensemble des applications proviennent de la nature, de la toxicité et de la quantité de contaminant relâché ou susceptible de l'être, mais cependant une méthodologie identique peut être adoptée quelle que soit

l'application retenue lors des phases de conception et d'expertise des systèmes de ventilation. Il est toutefois nécessaire d'appréhender la spécificité de l'écoulement, car divers régimes peuvent être mis en œuvre en ventilation selon l'objectif visé.

### *2.1.1. Risques industriels liés à la dissémination d'aérocontaminants*

#### **2.1.1.1. Nature du risque**

La présence d'aérocontaminants dans un local est à la source de risques potentiels de différentes natures, et ce à divers niveaux :

- de l'installation : mise en danger des structures de l'installation par dégagement de gaz détonant ou inflammable, contamination du local par des produits incommodants ou pouvant être à l'origine d'un risque toxicologique ou radiologique rendant une intervention humaine délicate, voire impossible ;
- de l'environnement : dispersion atmosphérique de contaminants dans l'atmosphère mettant en danger les populations avoisinantes ;
- du personnel : nuisances à l'origine de mauvaises conditions de travail, inhalation de substances toxiques ou létales.

Par rapport à l'industrie classique, la lutte contre la dissémination de contaminants dans un local nucléaire impose des contraintes spécifiques :

- nécessité de maintenir au mieux le confinement pour limiter le plus possible le rejet de matières radioactives à l'extérieur de l'installation ;
- difficulté, voire impossibilité, d'accéder au local dans lequel se produit l'incident, pour des raisons évidentes liées au risque radiologique.

#### **2.1.1.2. Mesures de protection**

Les mesures de protection face au risque réel de transfert d'aérocontaminants dans une enceinte industrielle peuvent être orientées selon trois axes :

- la prévention ;
- la surveillance ;
- l'intervention.

La prévention vise à limiter aussi bien la probabilité d'occurrence d'un incident pouvant être à l'origine d'un dégagement d'aérocontaminants, que la gravité de l'incident. De facto, la prévention consiste à mettre en œuvre l'ensemble des moyens nécessaires à la réalisation de cet objectif. On y parvient notamment en créant divers secteurs à l'intérieur de l'installation, désignés par le vocable : zones de confinement.

La surveillance des installations doit permettre de détecter au plus tôt un dégagement d'un aérocontaminant ou le dépassement d'un seuil de concentration toléré, afin de prendre les dispositions prévues en cas d'alerte, et de limiter ainsi les conséquences en réduisant le temps d'intervention.

Après la détection d'un incident, il faut mettre en œuvre tous les moyens nécessaires à son éradication ou à sa maîtrise dans des conditions optimales de sûreté pour l'installation et pour l'environnement ; c'est le rôle de la troisième phase : l'intervention. Il apparaît alors capital de connaître les mécanismes réels de transfert d'un contaminant dans une installation ventilée afin d'établir l'ensemble des scénarios.

Avant de s'intéresser à ces mécanismes et de rechercher une méthodologie pour les représenter, il semble bon de préciser le rôle que joue le système de ventilation dans une installation.

### *2.1.2. Rôle du système de ventilation*

#### *2.1.2.1. Généralités sur la ventilation industrielle*

Même si à l'origine, la ventilation a été développée pour assurer un certain confort pour les ambiances de travail, elle a très rapidement joué un rôle privilégié dans la maîtrise des dispersions atmosphériques. L'essor de l'industrie nucléaire a été le principal moteur du développement de cette nouvelle application de la ventilation. D'autres industries s'intéressent également à cette application, en particulier : les industries pharmaceutiques, l'agroalimentaire ou encore la micro-électronique (salles blanches). Le souci commun dans tous ces secteurs industriels de réaliser des ambiances de travail saines et contrôlées constitue la principale motivation. Il est clair que les efforts de développement des systèmes de ventilation se sont poursuivis dans des secteurs d'activités où il paraît illusoire d'atteindre un risque « zéro » d'émission de contaminants.

Ainsi la ventilation industrielle ne se limite pas seulement à son rôle premier de conditionnement d'air en maintenant des conditions de travail confortables pour les opérateurs présents dans l'atelier, mais assure d'autres fonctions tout aussi essentielles :

- de protection des opérateurs, en retirant d'éventuels contaminants du poste de travail ou en diminuant leur exposition par simple effet de dilution ;
- d'épuration de l'air ambiant, en acheminant et en concentrant les contaminants vers des dispositifs de piégeage tels des filtres ou colonnes d'absorption. La ventilation participe également au confinement statique des aérocontaminants en les canalisant ;
- de confinement dynamique, en maintenant les diverses zones de confinement selon une hiérarchie de dépressions bien établie qui imposent ainsi un sens de transfert privilégié de la contamination ;
- de surveillance des installations, en permettant les transferts d'espèces vers des dispositifs de détection de la contamination placés en des points judicieusement choisis.

Parallèlement à l'étude des systèmes locaux de ventilation, plusieurs modes de ventilation ont été étudiés. Tout d'abord, le mode le plus simple est la ventilation naturelle, mais celui-ci devient inopérant lorsqu'un conditionnement d'air est indispensable. Deux autres régimes sont plus couramment utilisés (Grebenc et Goodfellow, 1995) :

- la ventilation par déplacement, où un régime d'écoulement de type piston est généré. Celui-ci est particulièrement approprié à des espaces de grandes dimensions, peu encombrés, où il existe de forts gradients thermiques comme dans l'industrie métallurgique (Skäret, 1985) ;
- la ventilation par dilution, pour laquelle des écoulements tourbillonnaires sont générés. Ce régime est approprié pour des enceintes closes de grandes dimensions et fortement encombrées. Ce type de ventilation est classiquement utilisé dans les secteurs du bâtiment, de l'industrie chimique ou nucléaire.

Enfin, la richesse de la bibliographie sur cette thématique et l'organisation de nombreux congrès internationaux, parmi lesquels on peut citer les symposiums 'Ventilation', 'Roomvent' ou 'Indoor Air', montrent l'intérêt que suscite cette problématique.

### **2.1.2.2. Spécificité de la ventilation dans l'industrie nucléaire**

#### **2.1.2.2.1. Confinement des matières radioactives**

De par la nature des matières traitées dans l'industrie nucléaire, on rencontre un agencement bien spécifique des locaux, aussi bien pour les laboratoires et usines que pour les réacteurs.

On désigne par laboratoires et usines nucléaires l'ensemble des installations nucléaires de base autres que les réacteurs et les installations destinées au stockage à long terme des déchets radioactifs. Ces installations comprennent notamment :

- les usines du cycle du combustible ;
- les laboratoires de recherche ;
- les installations de traitement des effluents radioactifs ;
- les usines de fabrication de radioéléments à usage industriel ou médical.

La prévention des dispersions atmosphériques difficilement contrôlables est un élément majeur de la sûreté des installations. Cette sûreté repose sur des systèmes de confinement concentriques qui constituent de réelles barrières à la contamination.

La norme NF 62-200 de Décembre 1982 classe les enceintes de confinement selon leur niveau d'étanchéité, défini en fonction du taux de fuite horaire ( $T_f$  : rapport entre le débit de fuite horaire et le volume de l'enceinte) ou du taux de renouvellement horaire de l'air ambiant ( $T_R$  : rapport entre le débit de ventilation et le volume de l'enceinte).

Lors de la conception d'installations nucléaires, le principe ALARA (As Low As Reasonably Achievable) prévaut. L'objectif de ce principe de radioprotection est de limiter l'exposition des opérateurs à des niveaux aussi faibles que possibles. En pratique, le nombre de personnes exposées au-dessus du dixième des limites des normes réglementaire doit être réduit au maximum. Cela conduit à dimensionner des écrans de protection biologique et des systèmes de confinement en incorporant des marges de sécurité importantes.

#### **2.1.2.2.2. Rôle de la ventilation dans l'industrie nucléaire**

Dans l'industrie nucléaire, le rôle principal de la ventilation est d'assurer le confinement dynamique des aérocontaminants en maintenant un sens de circulation préférentiel de l'air des zones à moindre risque radiologique vers les zones à risque radiologique plus élevé car les enceintes de confinement n'ont pas une étanchéité absolue.



Ainsi, on crée une cascade de dépression bien établie entre les différents volumes : il s'agit alors de barrières dynamiques. La pression dans une enceinte est fixée à une valeur d'autant plus faible qu'elle contient des matières de nuisance plus élevée. Ce principe doit également prévaloir en marche dégradée, à la suite par exemple d'une intervention sur le système de ventilation, mais aussi lors d'un incident dans une zone, comme un incendie qui peut être à l'origine d'une augmentation de pression dans un local.

En ce qui concerne les systèmes d'épuration disposés dans le réseau de ventilation, une règle communément appliquée dans l'industrie nucléaire à chaque niveau de confinement est celle de la double filtration en utilisant des filtres à très haute efficacité (THE) ; cette double filtration est constituée d'un premier niveau de filtration propre à chaque local et d'un second niveau commun à l'ensemble des locaux du bâtiment, avant le rejet dans l'atmosphère (figure 7-1). Les filtres THE réalisent une épuration de l'air par un facteur 1000 au moins ; selon le risque radiologique propre à chaque local, le premier niveau de filtration peut être constitué de plusieurs filtres THE en série.

Des registres et des clapets sont souvent disposés sur les gaines de soufflage ainsi que sur les gaines d'extraction afin de pouvoir confiner la contamination dans le local, si l'on estime que les systèmes d'épuration disposés en aval du réseau de ventilation ne suffisent pas à assurer la sûreté de l'installation. Pour des locaux dans lesquels un risque d'incendie a été identifié, les clapets jouent en outre le rôle de clapets coupe-feu (Espi, 1998).

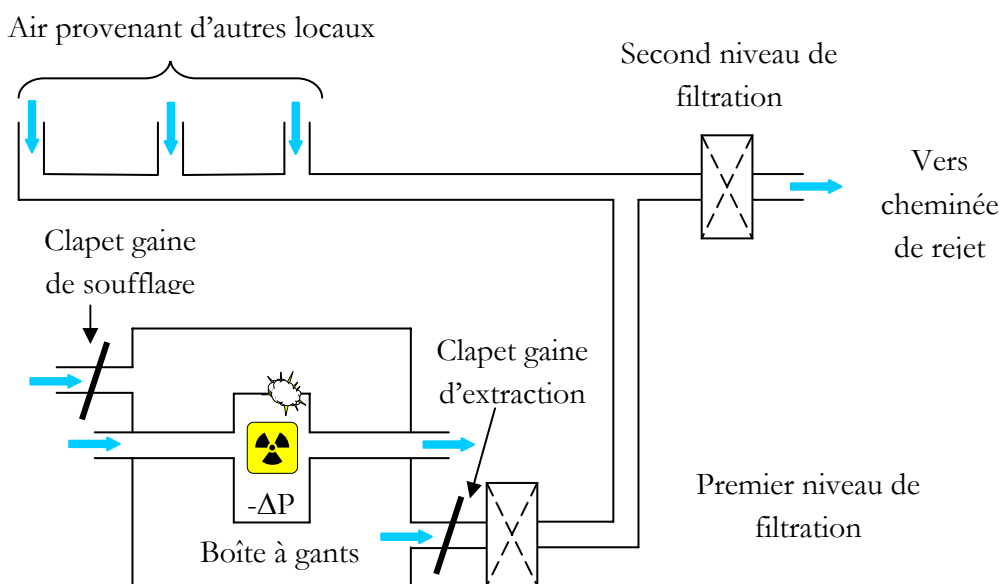


Figure 7-1 : Schéma général d'un réseau de ventilation en milieu nucléaire.

Lors de la détection d'un incident ou d'un accident dans un local, plusieurs stratégies peuvent être envisagées :

- maintien de la ventilation ;
- arrêt du soufflage et de l'extraction par fermeture des clapets ou registres ;
- fermeture du clapet de soufflage et maintien de l'extraction.

Il n'y a apparemment pas de stratégie optimale, applicable à tout incident ou accident. Il apparaît alors nécessaire de comprendre les mécanismes de transfert de la contamination au sein d'un local afin de pouvoir mieux appréhender le problème d'élaboration de stratégies de lutte contre la dispersion de contamination et de la mise en sûreté des installations.

### **2.1.2.3. *Evaluation du risque***

Dans l'industrie nucléaire, les conséquences d'un incident à l'origine d'un dégagement d'aérocontaminants se traduisent par plusieurs risques potentiels :

- radiologique : dispersion de radioéléments ;
- toxicologique : dégagement de produits présentant un risque par inhalation ;
- production de substances pouvant modifier les structures d'un local : produits inflammables ou détonants. On peut notamment citer le risque incendie et le risque hydrogène. Par exemple, lors de la fusion du cœur d'un réacteur, il peut se produire, outre le dégagement de produits de fission, un dégagement d'hydrogène qui, au-delà d'une certaine concentration limite dans l'air ambiant, peut devenir détonant et mettre ainsi en danger les structures de confinement.

Le risque radiologique est certainement le plus préoccupant. En effet, même le dégagement d'une très faible quantité d'un contaminant radioactif peut présenter un risque sérieux. Par exemple, la présence d'un milligramme d'oxyde de plutonium dilué dans un volume de 100 m<sup>3</sup> correspond à une dose de 10<sup>6</sup> LDCA (Limite Dérivée de Concentration Admissible). Dans un tel cas, les opérateurs éventuellement présents dans l'enceinte doivent l'évacuer au plus vite, après une alarme déclenchée extrêmement rapidement (Berne et Cassette, 1988). Ceci est un cas extrême, mais des systèmes spécifiques de capture et de détection doivent être prévus pour traiter cette éventualité.

Afin d'évaluer les risques que peut induire un incident, on se place généralement dans le cas le plus défavorable et on essaie de proposer des scénarios permettant de limiter le plus possible son incidence. Pour cela, il faut d'abord pouvoir caractériser la nature et la quantité de chaque élément susceptible d'être dégagé dans l'air ambiant, puis étudier les étapes successives de leur transfert depuis leur source jusqu'à leur relâchement dans l'environnement et leur impact. Ces différentes étapes peuvent être décomposées de la manière suivante :

- caractérisation du terme source à l'intérieur de l'enceinte ;
- transfert dans l'enceinte jusqu'aux bouches d'extraction, ce qui fournit le terme source au niveau du réseau de ventilation ;
- transfert dans le réseau de ventilation afin de caractériser les quantités rejetées;
- dispersion dans l'environnement ;
- impact sanitaire et environnemental.

Toutes ces étapes peuvent être étudiées de manière indépendante, même si, in fine, la chronologie présentée doit être respectée, excepté pour le dernier point qui doit être pris en compte à chaque étape des mécanismes de transfert.

La caractérisation du terme source à l'intérieur de l'enceinte est une étape très délicate et peu d'études théoriques y ont été consacrées. Une fois que le contaminant a été transféré au niveau des bouches d'extraction du local dans lequel se produit l'incident, le transfert dans le réseau de ventilation (transport, dépôt dans les conduits et colmatage des filtres) peut être simulé par des outils numériques tel que le code SIMEVENT (Perdriau, 1994 - Drecourt et al., 1997). Ensuite, la diffusion des aérocontaminants une fois relâchés dans l'atmosphère, relève de la simulation numérique par des codes de dispersion atmosphérique, tandis que l'impact sanitaire est étudié par la biologie nucléaire. La caractérisation des transferts d'aérocontaminants dans une enceinte ventilée s'avère donc être une étape incontournable, et c'est sur le mécanisme global de transfert que porte ce travail.

## 2.2. POSITION DU PROBLEME

### 2.2.1. Nature des aérocontaminants traités

Deux types d'aérocontaminants sont à prendre en considération, selon leur état physique :

- les contaminants gazeux ;
- les contaminants particulaires, désignés aérosols (liquides ou solides).

Il est a priori difficile de prévoir si les aérocontaminants vont se répartir de manière homogène au sein d'un local ventilé, en raison par exemple de la taille des locaux, de la topologie et des obstacles présents pouvant gêner l'efficacité de la ventilation générale. La connaissance de cette répartition s'avère donc nécessaire pour la maîtrise des risques précités. La répartition est intimement liée à l'aéraulique présente dans le local.

Ce problème se pose pour une enceinte isolée de confinement ou un local de grande taille (parfois plusieurs milliers de m<sup>3</sup>), plus ou moins encombré. Comme schématisé sur la figure 7-2, le local est muni d'un système général de ventilation, constitué par deux réseaux bien distincts : un réseau de soufflage et d'extraction. Ce local étant en dépression ou en surpression par rapport à d'autres qui lui sont adjacents, il peut s'y produire des fuites ou bien des infiltrations.

Une fuite qualifera une échappée non maîtrisée d'air du local vers un autre, alors qu'une infiltration qualifera une entrée d'air non maîtrisée dans celui-là.

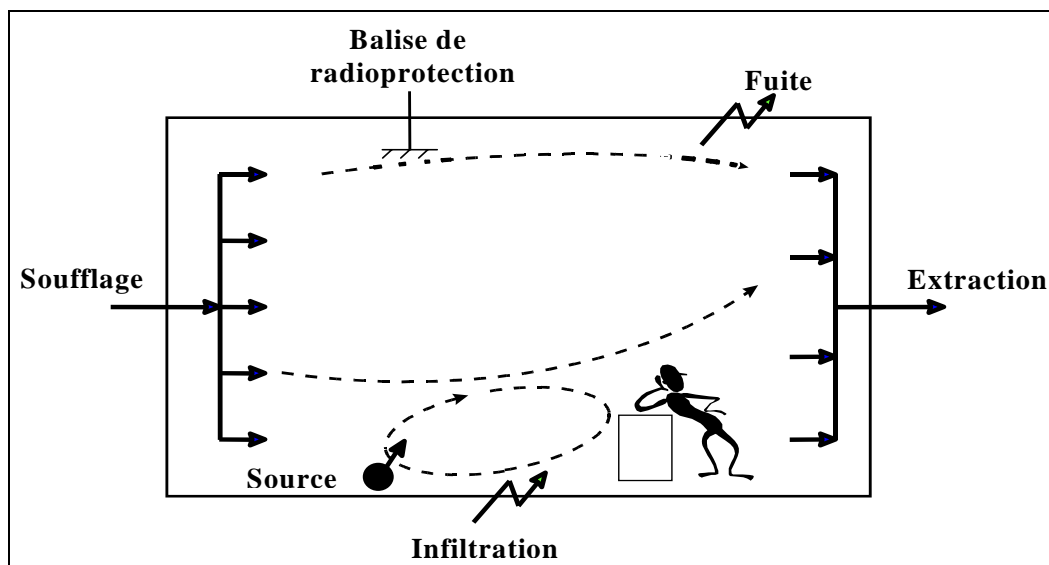


Figure 7-2. Situations propres à un local ventilé.

Le système de ventilation induit diverses zones d'écoulements dans l'enceinte. Il s'agit d'évaluer les quantités de contaminants transférées en tout point du local en fonction de la source. Le terme source peut aussi bien être localisé précisément dans l'espace étudié, qu'appartenir au système de soufflage dans le cas où un incident se serait produit en amont. On pourra ainsi :

- quantifier les doses de contaminants auxquelles peuvent être exposés les opérateurs présents dans l'enceinte ;
- évaluer l'efficacité du système de ventilation en mesurant les quantités de contaminants qui vont être extraites par les bouches d'extraction ;
- prévoir le risque de fuite de contamination vers un autre local ;
- juger de la représentativité des mesures effectuées par les balises de radioprotection .

Le régime de ventilation étudié est le régime permanent ; les phases d'écoulements transitoires suite au démarrage, à l'arrêt de la ventilation, à l'ouverture ou à la fermeture de clapets ne sont pas considérées.

### **2.3. CONNAISSANCES SUR LES ECOULEMENTS DANS LES ESPACES VENTILES**

L'intérêt d'étudier les transferts d'aérocontaminants est multiple ; on peut ainsi :

- prédire les risques de transferts de contaminants à d'autres espaces de l'installation ou dans son proche environnement ;
- connaître l'évolution des concentrations en contaminant en n'importe quel point du local ;
- juger l'aptitude du système de ventilation à extraire la contamination des zones à risques, et évaluer le temps nécessaire pour retrouver des conditions ambiantes acceptables pour une intervention humaine dans le cas d'une contamination radioactive par exemple ;
- vérifier la pertinence du positionnement des balises de détection.

On peut scinder l'ensemble des études effectuées selon deux axes thématiques :

- les études purement expérimentales ;

- les études mettant en œuvre des moyens numériques.

Les paragraphes suivants résument ces études sur les transferts d'aérocontaminants.

### *2.3.1. Etudes expérimentales*

Chronologiquement, les premières recherches sur les systèmes de ventilation ont toutes été expérimentales, alors qu'à partir des années 1980 elles se sont progressivement orientées vers des approches plus numériques. On peut classer les études expérimentales en deux catégories :

- les études sur les jets ;
- les études sur maquettes.

#### **2.3.1.1. Premiers pas vers une modélisation des phénomènes**

##### **2.3.1.1.1. Etablissement de corrélations**

Il est évident que les paramètres géométriques de l'espace étudié (longueur, largeur, hauteur, position des bouches de soufflage et d'extraction) jouent un rôle déterminant pour les mouvements d'air présents du local. Certains chercheurs ont étudié l'influence des paramètres géométriques sur la dispersion de l'air dans la pièce.

En faisant varier la longueur d'une pièce, plusieurs zones d'écoulements échangeant peu entre elles peuvent se créer. Des corrélations entre les paramètres géométriques et la position de ces différentes zones ont alors été établies (Ameur, 1983).

##### **2.3.1.1.2. Modèle à « 2 zones »**

Le premier modèle élaboré en ventilation repose sur une hypothèse d'homogénéisation instantanée en tout point de l'espace ; la concentration est partout la même dans le local. Ce modèle envisageable que pour des géométries extrêmement simples n'est pas fréquent en réalité. Compte tenu des limites de cette première représentation, d'autres modèles simples ont été proposés : modèle « piston-dispersion » (Levenspiel, 1972) et un autre plus couramment utilisé en ventilation, le modèle à « 2 zones », représenté sur la figure 7-3 (Ameur, 1983).

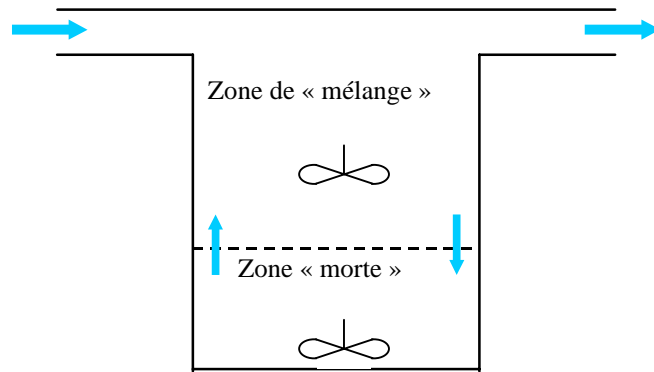


Figure 7-3. Modèle à « 2 zones »

Ce modèle est rencontré dans d'autres travaux (Vavasseur et al., 1985 - Skäret, 1985). Ici, l'idée fondamentale est le partage de l'installation en deux zones principales, chacune étant considérée comme homogène à l'intérieur de son propre volume, mais il existe un débit d'échange de fluide entre elles :

- une zone de mélange : zone bien ventilée dans laquelle se trouvent les bouches de soufflage et les bouches d'extraction ; le temps de séjour du fluide est généralement faible dans cette partie par rapport à celui de l'autre zone ;
- une zone dite « morte » : zone moins bien ventilée ; sa dénomination provient du fait que le temps de séjour y est généralement bien supérieur à celui de la zone de mélange.

Pour ce modèle, il est possible de disposer, dans chaque zone, de la réponse analytique à un dégagement constant en débit de contaminant dans l'une ou l'autre des deux zones.

L'avantage d'un tel modèle est que l'on dispose d'une réponse analytique ; il est donc aisé de prévoir les transferts de contaminants possibles et d'en évaluer les risques, mais d'importantes contraintes restreignent son champ d'application :

- le modèle impose que les bouches de soufflage et d'extraction se trouvent dans la même zone ;
- seules deux zones d'écoulement doivent être réellement présentes ; or, très souvent d'autres zones existent et le modèle n'est plus acceptable.

### **2.3.1.2. Conclusion sur les techniques expérimentales**

Les méthodes expérimentales sont parfois délicates à mettre en œuvre et nécessitent bien souvent d'importants moyens de mesure. Ces techniques requièrent beaucoup de temps car plusieurs essais sont souvent nécessaires.

Les premiers modèles qui peuvent être directement déduits de l'analyse de données expérimentales sont en général trop succincts, comparés à la complexité des écoulements présents dans une enceinte ventilée. C'est pour cela que l'on s'oriente de plus en plus vers des méthodes d'analyse numérique.

### **2.3.2. Approches numériques**

Parmi l'ensemble des approches faisant appel à l'outil numérique, on peut recenser deux catégories :

- les approches purement numériques, ne nécessitant que des moyens informatiques ;
- les approches mixtes, nécessitant aussi bien des ressources numériques qu'expérimentales. On retrouve parmi ces méthodes : les modélisations multi-zones et l'approche systémique qui s'appuient sur des données expérimentales afin d'identifier un modèle.

L'objet de l'ensemble des méthodes numériques est de proposer un modèle aussi représentatif que possible, et extrapolable, de l'écoulement que l'on cherche à étudier.

#### **2.3.2.1. Approche numérique prédictive**

Parmi toutes les techniques numériques de modélisation d'écoulements à l'intérieur d'enceintes ventilées, l'approche différentielle, ou approche numérique prédictive, semble incontournable compte tenu du nombre de travaux de recherche publiés actuellement. Cet engouement conduit au développement de très nombreux codes de mécanique des fluides (CMF), principal outil de cette approche.

##### **2.3.2.1.1. Généralités sur les codes de mécanique des fluides**

Le fondement de cette approche est la résolution des équations de Navier et Stokes en tout point du local étudié. Malgré l'intérêt que suscite cette technique, on constate



qu'elle comporte de nombreuses lacunes et incertitudes. Les principales difficultés rencontrées lors de ce type de modélisation proviennent de la nature même des phénomènes à modéliser :

- la taille des locaux est grande par rapport à l'échelle de modélisation ;
- l'espace est fortement encombré ;
- les écoulements présents sont souvent très complexes.

Bien que les lois fondamentales régissant la dynamique de fluides newtoniens, les équations de Navier et Stokes en régime transitoire, soient connues depuis plus de 150 ans (Bird et al., 1960), la résolution directe de celles-ci n'est pas envisageable. En effet, la résolution des équations de Navier et Stokes, des équations de continuité, et le respect des conditions limites représente un véritable enjeu numérique. Ces équations sont donc transformées en équations algébriques par une première discrétisation spatiale que constitue le maillage.

#### **2.3.2.1.2. Le problème du maillage**

Plusieurs techniques de maillage sont couramment utilisées dans les codes de mécanique des fluides :

- la méthode aux différences finies : c'est la méthode la plus simple, mais elle est délaissée au profit des deux méthodes suivantes qui sont conservatives ;
- la méthode des volumes finis ou des volumes de contrôle qui est la plus développée dans les codes de calcul ;
- la méthode aux éléments finis qui permet plus de souplesse pour le maillage ; elle est par conséquent privilégiée pour le traitement de géométries complexes. Cependant, sa mise en œuvre est lourde et nécessite des capacités de calcul importantes.

La réalisation du maillage est primordiale et peut affecter de manière très sensible la fiabilité et la précision du résultat final. Skalicky et al. (1992) montrent l'influence que peuvent avoir les trois techniques de maillage. Si les résultats sont similaires pour les trois et sont en bon accord avec les mesures expérimentales pour un écoulement simple (convection naturelle dans une pièce de géométrie cubique), des divergences apparaissent entre les méthodes lorsque l'écoulement étudié devient plus complexe (écoulement en convection forcée dans une pièce ventilée de plus grande taille).

### **2.3.2.1.3. Choix des modèles physiques**

Outre l'élaboration du maillage, les performances de la simulation vont dépendre de choix arbitraires effectués par l'utilisateur sur les modèles physiques mis en œuvre. En ventilation, le système d'équations le plus couramment utilisé est bâti sur le modèle de turbulence  $k-\varepsilon$  standard développé par Launder et Spalding (1974). Il a largement été utilisé et fait partie des modèles de turbulence à deux équations basés sur l'hypothèse que la turbulence est isotrope au sein de l'écoulement calculé. Les effets de la turbulence sont ainsi calculés à partir de deux quantités, l'énergie cinétique turbulente  $k$  et le taux de dissipation énergétique  $\varepsilon$ . Ces deux quantités sont obtenues à partir de la résolution des équations de modélisation du transport de  $k$  et de  $\varepsilon$ . Ces équations font intervenir des constantes du modèle qui sont déduites de manière empirique. Ce modèle est ainsi considéré comme semi-empirique.

De plus, en ce qui concerne le choix de modèles physiques, des difficultés peuvent être rencontrées. En particulier, dans des enceintes de grande taille et fortement encombrées, il peut exister des zones à faibles nombres de Reynolds, alors qu'ailleurs l'écoulement est turbulent ; ces zones ne peuvent être décrites par le même modèle. Plusieurs auteurs ont proposé des formes modifiées du modèle standard  $k-\varepsilon$  pour prendre en considération ces phénomènes (Shao et Riffat, 1994), mais celles-ci augmentent considérablement les temps de calcul sans faire preuve d'une grande fiabilité.

Enfin, le choix des conditions aux frontières fait partie des données du problème. Les conditions d'entrées/sorties sont représentées par des fonctions plus ou moins fidèles à la réalité. Les conditions limites aux parois sont traduites généralement par des fonctions d'approximation du comportement réel. Niu et Van Der Kooi (1992) montrent l'influence du choix de ces modèles physiques sur la qualité des résultats.

### **2.3.2.1.4. Analyse de la qualité des résultats**

Des revues (Fontaine et al., 1991 ; Kondjoyan et al., 1997 ; Rota et al., 1994) des articles concernant le développement de CMF en ventilation montre leurs domaines d'application ainsi que leurs limites.

La première observation est le constat d'un manque de validation expérimentale des résultats obtenus. Se pose alors le problème des techniques expérimentales de mesure des champs de vitesses : même l'anémométrie laser à effet Doppler, la technique non intrusive la plus performante à l'heure actuelle, peut s'avérer limitée comme instrument

de validation. Certains auteurs ont tenté de confronter les résultats de simulations à des valeurs expérimentales. Comme le montrent Robertson et al. (1986), la prédiction des écoulements globaux est en bon accord avec la réalité, mais pour les valeurs locales du champ de vitesses apparaissent alors de grandes divergences. En moyenne, on observe des écarts de 20% en amplitude et de 10° en direction, mais ces écarts sont plus importants dans les zones stagnantes, c'est-à-dire à faible Reynolds.

#### **2.3.2.1.5. Conclusions sur les CMF**

L'approche différentielle pour la modélisation des écoulements en ventilation laisse entrevoir de bonnes capacités pour la conception des systèmes de ventilation principalement. Elle ne peut pas toutefois se substituer totalement à une étude expérimentale qui reste indispensable à la qualification de ses résultats.

Enfin, en parallèle au développement de codes de mécanique des fluides très généraux, dont les plus connus FLUENT et ESTET, ont été appliqués à la modélisation d'écoulement en enceintes ventilées (Yamamoto et al., 1993 – Shao et Riffat, 1994), des codes spécifiques aux applications en ventilation industrielles ont vu le jour. On peut citer notamment le code EOL, développé par l'INRS, dont il existe deux versions, une pour des simulations en 2 D (Fontaine et al., 1991) et une autre en 3 D (Fontaine et al., 1994) et le code 3D FLOVENT développé par la société Flowmerics. Enfin, le Commissariat à l'Energie Atomique dispose d'un outil de recherche équivalent, le code CASTEM 2000, dans lequel a été intégrée une approche bi-fluide pour prendre en compte le transport d'espèces particulières dont le diamètre aérodynamique est supérieur à plusieurs micromètres (Armand, 1995).

#### **2.3.2.2. Modèles « multi-zones »**

Le local est ici considéré comme un ensemble de zones homogènes, échangeant des débits entre elles (Berne, 1994 ; Sandberg et Sjöberg, 1982 ; Crommelin et Buringh , 1985 ; Schaelin et al., 1993 ; Sohn et Small, 1999). Cette technique est similaire à l'approche prédictive numérique si les zones choisies coïncident avec le maillage utilisé pour la mise en œuvre de CMF, mais généralement cette technique est adoptée pour réduire le nombre de cellules nécessaires pour décrire le local étudié.

Ce concept de modélisation est adapté au traitement de problèmes de ventilation d'un ensemble de locaux pouvant être considérés comme homogènes et reliés par des

ouvertures (portes, fenêtres...). L'estimation des paramètres du modèle est réalisée par des techniques expérimentales. Sous l'impulsion de l'Agence Internationale pour l'Energie Atomique (AIEA), le Lawrence Berkeley National Laboratory a développé un code multi-zones dédié au traitement de problèmes de transport de contaminant dans un ensemble de pièces (Feustel, 1998).

### **2.3.2.3. Approche systémique**

#### **2.3.2.3.1. Applications de l'approche systémique en ventilation industrielle**

Ces principales applications de l'approche systémique pour la caractérisation des écoulements sont à porter au crédit de la modélisation des problèmes de mélange dans des réacteurs chimiques (Dagot et al., 1996 ; Hofmann, 1987). En ventilation, seulement quelques articles ont traité à la mise en œuvre de cette approche dans son ensemble. Certains modèles proposés, comme le modèle à « 2 zones », sont fondés sur ce concept de distribution de temps de séjour, mais ne constituent qu'une étape restrictive de la procédure de modélisation.

En revanche, les méthodes de traçage sont largement utilisées en vue d'étudier les écoulements dans les enceintes ventilées, car celles-ci sont faciles à mettre en œuvre, reproductibles, fiables et aisément interprétables. A partir de ces expériences de traçage, sont déduits plusieurs coefficients qui permettent d'évaluer les performances du système de ventilation parmi lesquels les plus fréquemment utilisés sont : le taux de renouvellement d'air, le taux de brassage, l'efficacité d'épuration des contaminants, le coefficient de capture (Dessagne et al., 1991 ; Li et al., 1992 ; Roulet et Cretton, 1992).

Dès 1969, Chen et al. se sont intéressés à l'application de l'approche systémique à un local ventilé, mais Hooper F.C. et Hooper J.T. (1985) furent les premiers à l'utiliser réellement pour la représentation d'un système de ventilation. Toutefois, deux projets en prouvent son applicabilité en ventilation industrielle.

Dans le premier, Dessagne et al. (1994) proposent de manière arbitraire un modèle comportant un grand nombre de paramètres par rapport à la complexité du local ventilé qui présente une géométrie simple et qu'ils tentent de modéliser. Le modèle perd alors toute signification physique.

Dans le second, Blet et al. (1997) mettent en œuvre des techniques de traçage radioactif à partir desquelles ils établissent un modèle de DTS pour un local ventilé. Les auteurs proposent d'appliquer la même structure de modèle à des configurations différentes du réseau de ventilation. Procédant uniquement à une identification de

paramètres dans les divers cas traités, ils donnent ainsi une certaine « universalité » au modèle retenu.

Des études complémentaires aux précédentes existent : celles de Olander et al. (1995), Bontoux et al. (1997), Bontoux et al. (1998), Blet et al.(1998), auxquelles on peut également associer les travaux de Bahmed et al. (1993) proposent un modèle fondé sur l'approche systémique pour la caractérisation d'un four à gaz.

Signalons une étude effectuée par Claudel (2002) qui propose un algorithme d'aide à la génération automatique de modèles à compartiments pour l'interprétation de traçage dans des réacteurs industriels en prenant en compte les informations des courbes de DTS mais aussi, et surtout, les caractéristiques physiques des procédés étudiés.

#### **2.3.2.3.2. Logiciels disponibles**

Il faut noter qu'il n'existe pas actuellement de logiciel commercial d'aide à la conception de modèles basés sur l'approche systémique. Seuls quelques logiciels de simulation et d'identification paramétrique de tels modèles sont disponibles. En effet, aucun ne permet de guider l'utilisateur dans le choix d'une structure de modèle, c'est-à-dire de l'agencement des modèles d'écoulements idéaux qui le constituent. De ce point de vue, l'originalité de ce travail paraît évidente.

Il faut néanmoins citer deux outils disponibles sur le marché :

- le logiciel DTS commercialisé par PROGEPI (Leclerc et al., 1995) permet la simulation de la réponse d'un modèle fourni par l'utilisateur à une perturbation quelconque, ainsi que l'identification d'un nombre de paramètres (6 maximum) ;
- le logiciel RTD développé par l'AIEA (AIEA, 1996), plus particulièrement lié au traitement spécifique de données issues de traçages radioactifs. Une bibliothèque de modèles standards est disponible dans ce logiciel qui comporte aussi une option d'identification de paramètres pour une structure fixée.

#### **2.3.2.3.3. Conclusions**

L'approche systémique peut être comparée à l'approche multi-zones. La différence réside dans le fait que l'approche multi-zones ne considère que des zones à homogénéisation instantanée, et ne prend pas en compte la présence d'éventuels écoulements de type piston. L'approche systémique possède néanmoins l'avantage de fournir un modèle plus simple, en caractérisant bien la nature des phénomènes constitutifs de l'écoulement.

L'approche systémique se révèle donc être une procédure intermédiaire, principalement dédiée à l'expertise des écoulements présents dans une enceinte ventilée et à la prédiction de la répartition de contaminants. Elle permet de représenter les écoulements par un modèle réaliste, aussi simple que possible. Elle repose sur des bases physiques solides, proposant des configurations s'inspirant de la réalité, tout en idéalisant les phénomènes faisant appel à un nombre réduit de paramètres. Si le modèle est effectivement réaliste, les résultats fournis par ce type de modélisation devraient être satisfaisants pour traiter la plupart des cas réels.

Les modèles de style « piston-dispersion », qui reposent sur une superposition d'un écoulement piston convectif et d'une dispersion aléatoire obéissant formellement à la loi de Fick, ne sont pas considérés dans cette étude car ils permettent de réaliser une interpolation continue entre les deux régimes extrêmes d'écoulements idéaux, tout comme le modèle de mélangeurs en cascade (Villiermaux, 1993).

### *2.3.3. Bilan des connaissances sur les écoulements dans les espaces ventilés*

Les diverses approches utilisées pour l'étude des transferts d'aérocontaminants dans des enceintes ventilées mettent en œuvre deux stratégies: l'une, purement numérique, et l'autre mixte, expérience/numérique. La démarche globale d'analyse d'un système de ventilation et des transferts de contaminants associés peut être schématisée par l'organigramme présenté figure 7-4. A titre d'exemple, certains logiciels disponibles pour les différentes phases sont cités (Thereska, 1998).

L'objet de toutes les approches est d'établir un modèle plus ou moins complexe afin de pouvoir évaluer les conditions de sécurité dans une enceinte ventilée. La démarche élémentaire est l'ajustement de modèles simples, tel le modèle à « 2 zones », ou le calcul de certaines grandeurs caractéristiques. Ceci permet de diagnostiquer certains dysfonctionnements du système de ventilation.

Une analyse plus fine est celle du 2<sup>ème</sup> niveau de traitement, avec l'approche « boîte noire » que constitue l'approche systémique. La méthode est basée sur l'interprétation d'un signal expérimental qui contient toute l'information sur l'aéroulque du système. L'utilisation de cette technique fait appel à l'art de l'ingénieur pour proposer des structures de modèles. C'est à ce niveau qu'il est proposé le développement d'un logiciel de conception, représenté en grisé sur la figure 7-4.

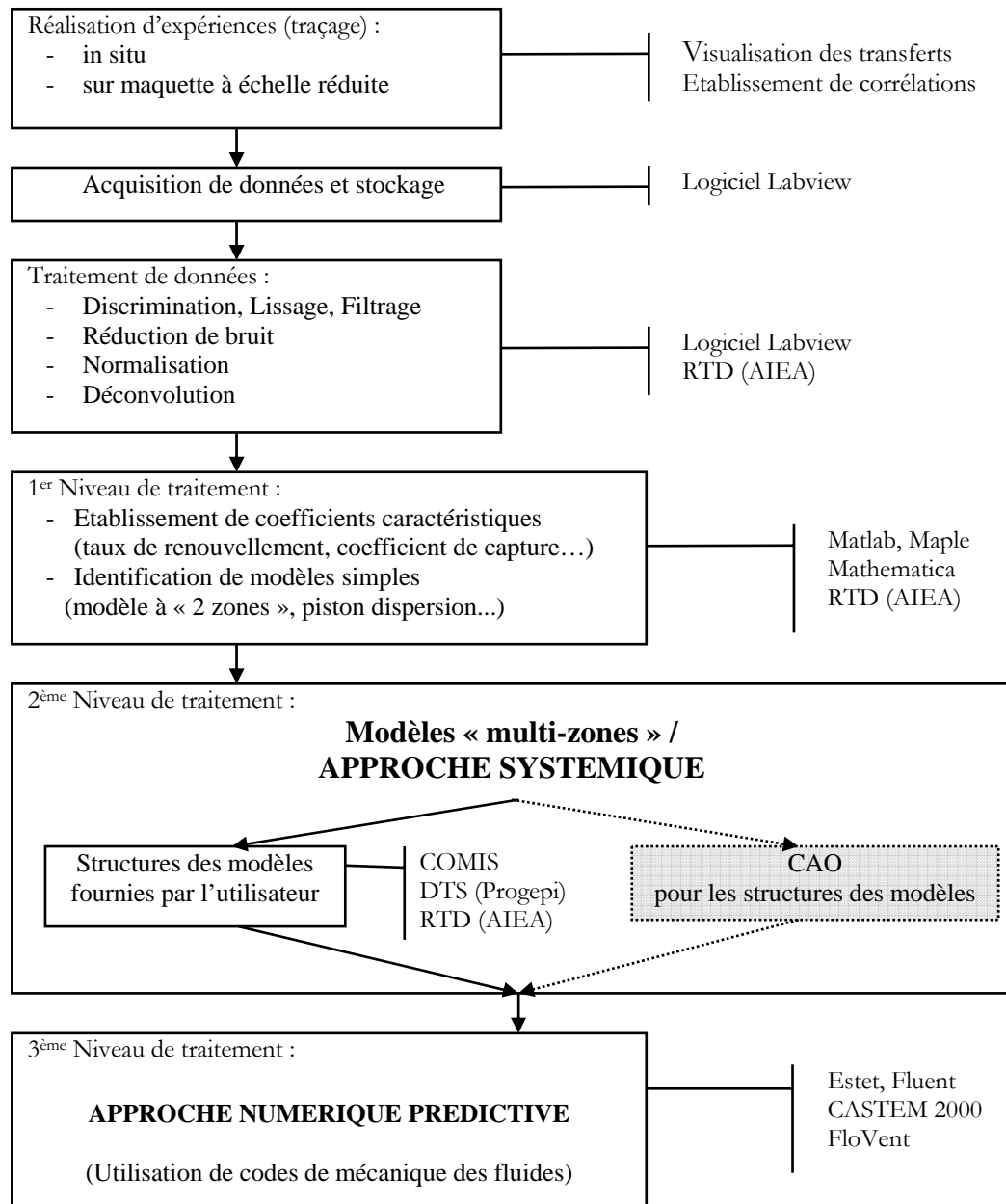


Figure 7-4. Organigramme des possibilités d'analyse d'un système de ventilation.

Le modèle « multi-zones » peut être considéré comme un cas limite d'un modèle de l'approche systémique, ne comportant que des modèles d'écoulement de type RAC. En conséquence, l'approche systémique doit permettre de traiter également des problèmes d'élaboration de modèles « multi-zones ».

### 3. VALIDATION DE LA METHODE SUR DES EXEMPLES TRAITES DANS LA LITTERATURE :

L'ensemble des exemples traités dans les travaux de Laquerbe est repris:

- exemple préliminaire,
- exemple d'Ameur,
- exemple de référence.

Les différents cas seront modélisés à partir de superstructures distinctes jusqu'à l'obtention d'une superstructure globale utilisée dans l'étape de caractérisation. Ces cas ont été traités pour deux discrétisations différentes de l'horizon de temps, chacune d'entre elle est présentée dans ce qui suit. Cette démarche est effectuée afin de vérifier la stabilité de *GAMS* pour traiter ce genre de problème suivant divers pas de temps.

#### 3.1. EXEMPLE PRELIMINAIRE

Une première étape de validation de la procédure d'identification paramétrique et structurelle est effectuée à partir de la réponse théorique du modèle dont la structure est présentée ci-dessous.

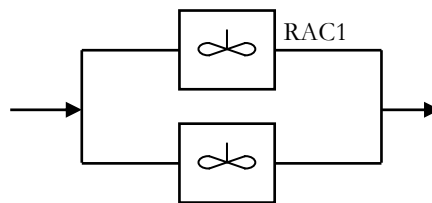


Figure 7-5. Exemple préliminaire.

Les paramètres du modèle sont :

$$\begin{cases} V_{RAC1} = 5 \text{ m}^3 \\ V_{RAC2} = 10 \text{ m}^3 \\ Q_1 = 0,6 \text{ m}^3 / \text{min} \\ Q_2 = 0,4 \text{ m}^3 / \text{min} \end{cases}$$



Une courbe expérimentale théorique, comportant 250 points d'échantillonnage, a été générée à partir de la réponse indicielle simulée (figure 7-6). On cherche donc à retrouver le modèle qui a permis d'établir cette courbe.

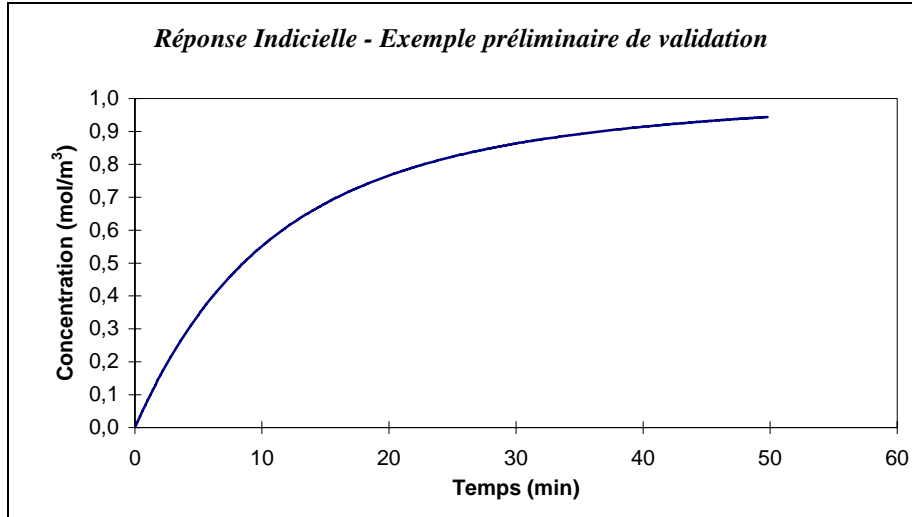


Figure 7-6. Réponse indicielle pour l'exemple de validation préliminaire.

Plusieurs superstructures ont été utilisées. Une structure simple de départ, a été modifiée avec des ajouts de modules élémentaires, jusqu'à l'obtention de la superstructure globale. Par la suite, et selon la nature du problème, des structures sont mises en place à partir d'une analyse expérimentale des courbes de DTS. Cette étude de superstructures est effectuée pour permettre à l'utilisateur de pouvoir en proposer une en accord aussi parfait que possible avec son dispositif expérimental.

Disposant uniquement de la réponse échelon pour l'exemple préliminaire et celui d'Ameur, les mêmes superstructures initiales ont été utilisées. Deux superstructures ont été utilisées, une comportant un ensemble de 6 RAC est mise en place en premier lieu. Cette superstructure est présentée dans la figure 7-7 :

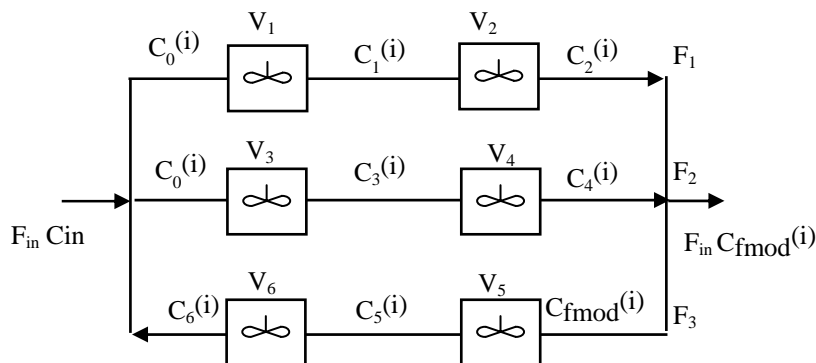


Figure 7-7. Superstructure 1.

La seconde superstructure correspond à la superstructure globale représentée sur la figure 6-6 du chapitre 6. Les bilans matières sont identiques à ceux du chapitre 6 et la méthode d’Euler est utilisée.

La DTS est obtenue sur un temps total de 50 min. La discrétisation est effectuée selon un pas de temps constant. Afin de vérifier les capacités de *GAMS* à résoudre des problèmes de grande taille, deux discrétisations vont être effectuées sur cet intervalle de temps, la première comporte un nombre total de points égal à 10 (chaque 5 min) et la seconde, 250 points (chaque 0,2 min). Le but de ce changement est de vérifier si *GAMS* arrive à retrouver les mêmes solutions dans les deux cas, pour s’assurer d’une certaine stabilité de la résolution numérique. On remarque que le nombre de variables de concentrations dépendant du temps, ainsi que les contraintes bilinéaires de bilans, croissent d’une manière importante. Suivant les deux superstructures utilisées, la taille du problème selon la discrétisation retenue est présentée dans le tableau 7-1 :

<b>Superstructure 1</b>			
Nombre de Points	Variables discrètes	Variables de concentrations	Contraintes bilinéaires
10	6	80	72
250	6	2000	1992
<b>Superstructure globale</b>			
	Variables discrètes	Variables de concentrations	Contraintes bilinéaires
10	8	90	90
250	8	2500	2490

**Tableau 7-1. Taille du problème associé à l’exemple préliminaire.**

Pour les deux structures, les résultats varient suivant la discrétisation de l’horizon de temps. Afin de ne pas engendrer de problème de résolution numérique pouvant amener à un échec de la procédure de résolution, l’initialisation des variables est effectuée pour les variables de volume au milieu des bornes, alors que les variables

représentant la concentration de sortie expérimentale ( $C_{f_{exp}}^{(i)}$ ) sont initialisées aux valeurs des concentrations de sortie du modèle  $C_{f_{mod}}^{(i)}$ . Les variables structurelles ( $y_i$ ) sont toutes initialisées à 1.

Des tests numériques ont montré qu’il ne fallait pas initialiser les variables de débit, sous peine d’un échec de la procédure. En effet les concentrations, les volumes et les débits étant reliés par diverses équations de contraintes, l’initialisation simultanée des trois types de variables peut engendrer des infaisabilités au niveau des contraintes.

Afin de comparer les résultats, ils sont présentés selon les deux cas de discrétisation dans les tableaux suivants.

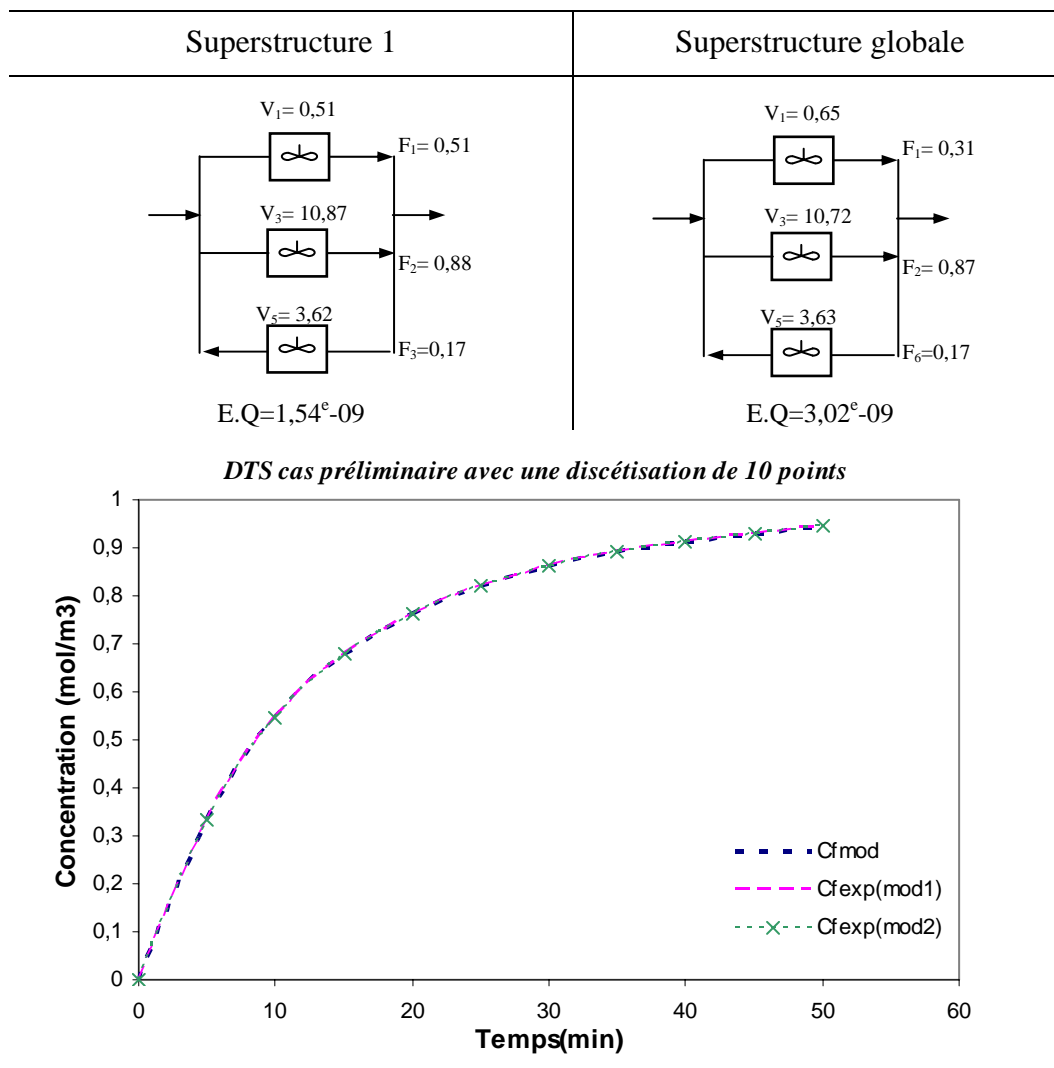
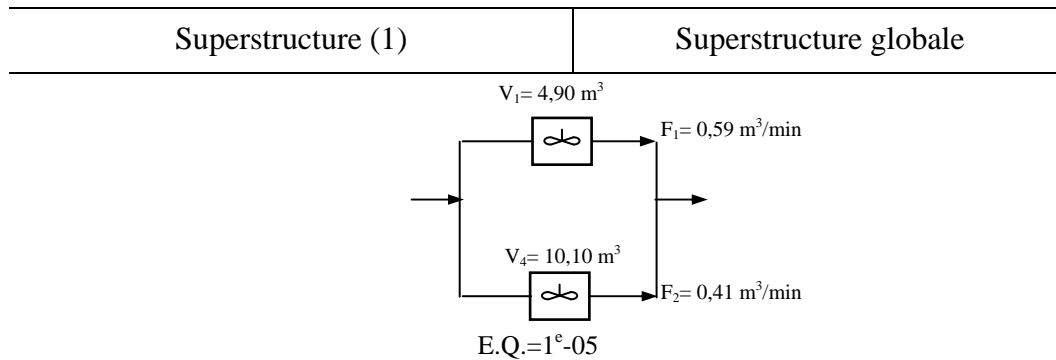
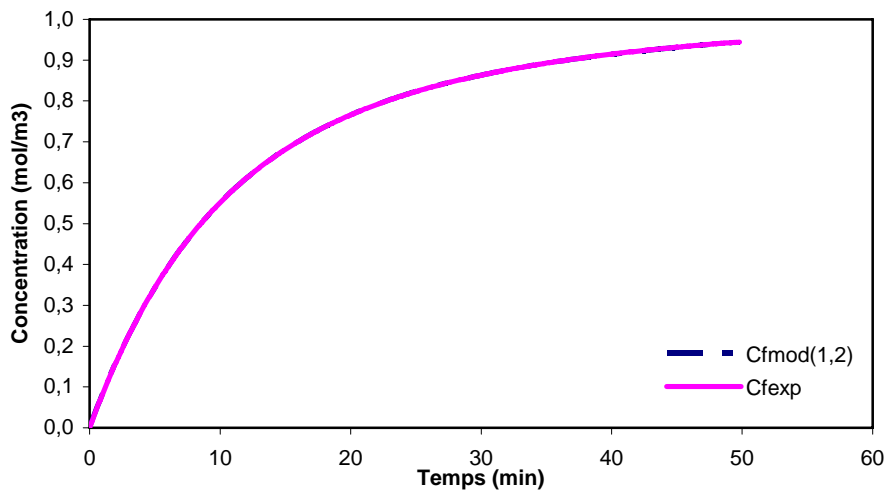


Tableau 7-2. Résultats suivant une discrétisation de 10 points.

Dans le cas d'une discrétisation avec 250 points, les résultats obtenus suivant les deux superstructures sont identiques (tableau 7-3).



*DTS cas préliminaire avec une discrétisation de 250 points*



**Tableau 7-3. Résultats suivant une discrétisation de 250 points.**

Pour une discrétisation de 10 points, les structures obtenues sont très proches mais différent de la structure simulée. Avec cette discrétisation pour l'horizon de temps, il existe plusieurs agencements de réacteurs conduisant à la même DTS (écart quadratique très faible, de l'ordre  $1^e-09$ ). Pour une discrétisation de 250 points, on retrouve la solution simulée, mais avec un écart quadratique un peu plus élevé.

### 3.2. EXEMPLE D'AMEUR

Cet exemple issu des travaux d'Ameur (1983), est présenté sur la figure 7-8. Une réponse analytique a été fournie pour un modèle à deux zones pour différents stimuli.

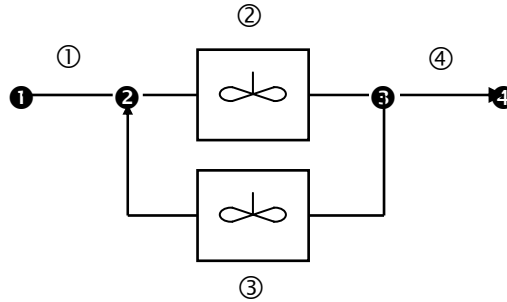


Figure 7-8. Exemple d'Ameur.

Les données sont les suivantes :

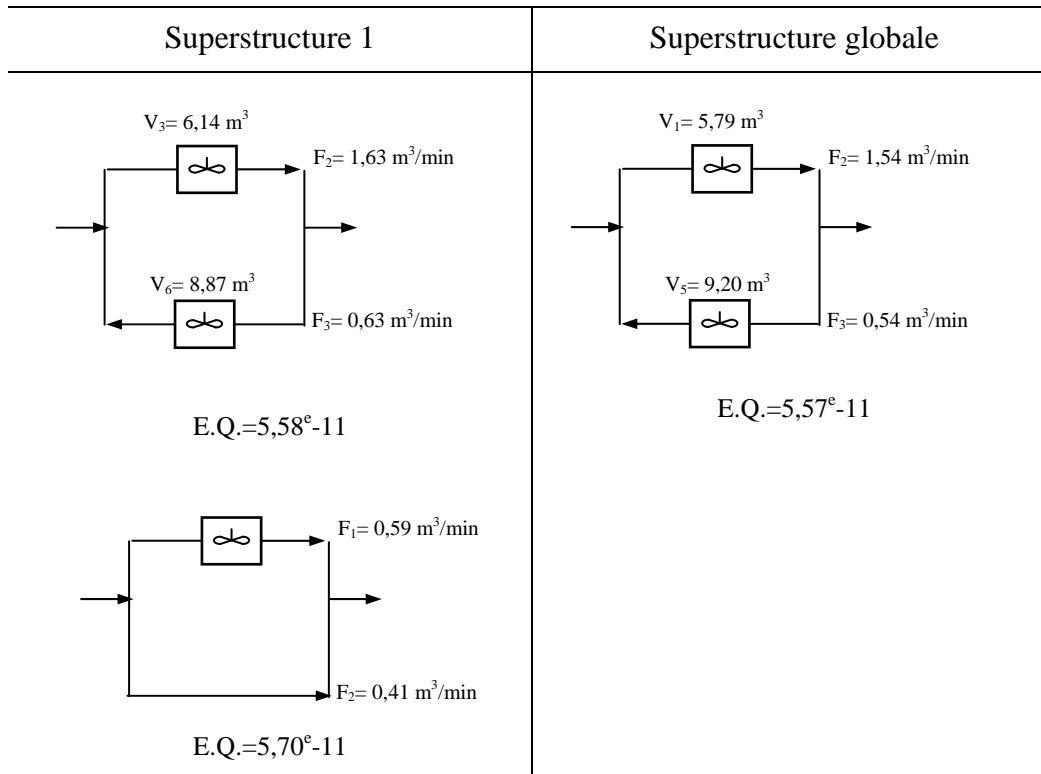
$$\begin{cases} Q_1 = Q_4 = 1 \text{ m}^3 / \text{min} \\ Q_2 = 3 \text{ m}^3 / \text{min} \\ Q_3 = 2 \text{ m}^3 / \text{min} \end{cases} \quad \text{et :} \quad \begin{cases} V_{RAC_2} = 5 \text{ m}^3 \\ V_{RAC_3} = 10 \text{ m}^3 \end{cases}$$

La réponse analytique à une perturbation de type échelon positif en concentration sur le courant de soufflage, d'intensité  $1 \text{ mol/m}^3$ , est donnée par la formule suivante :

$$C_{f,\text{mod}}(t) = [1 - 0,21133 \times \exp(-0,74641.t) - 0,78867 \times \exp(-0,05359.t)] \quad (7-1)$$

La même démarche est adoptée vis à vis de la discrétisation. Sur un horizon de temps de 125 min, une première discrétisation de 10 points est effectuée, puis la seconde avec 250 points. La taille du problème en terme de variables et de contraintes est la même pour les deux superstructures utilisées.

Dans le cas d'une discrétisation de 10 points, les résultats obtenus sont présentés dans le tableau 7-4. L'initialisation est effectuée uniquement sur deux types des trois variables continues : débit, volume ou concentration de sortie.



DTS cas AMEUR avec 10 points

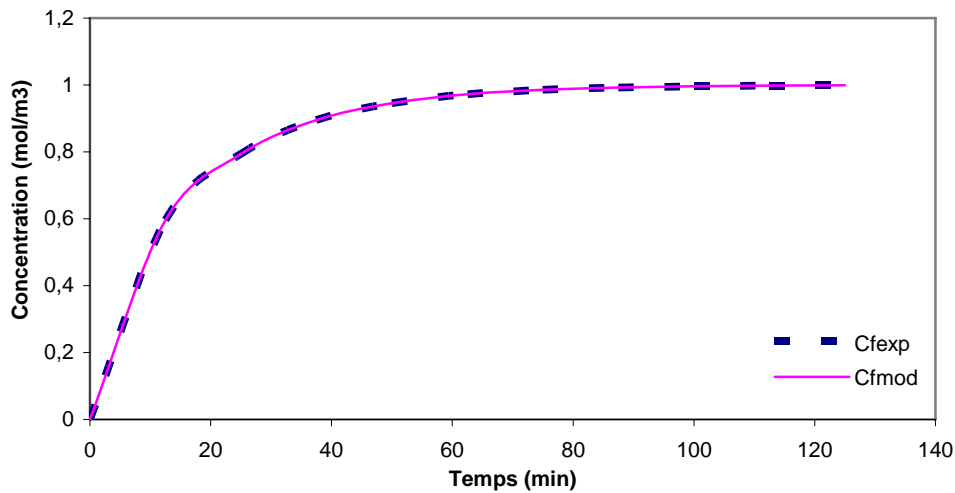


Tableau 7-4. Résultats suivant une discrétisation de 10 points.

Lors de l'utilisation de la superstructure 1, avec une discrétisation de 10 points, selon l'initialisation des variables, plusieurs solutions sont obtenues. Vu la faible valeur de l'écart quadratique, le faible écart de concentration pour les diverses solutions, une seule courbe de DTS calculée par le modèle est reportée. Les autres courbes de DTS obtenues pour les diverses solutions sont impossible à discerner.

Les résultats obtenus pour une discrétisation de 250 points (pas de temps 0,5) sont donnés dans le tableau 7-5.

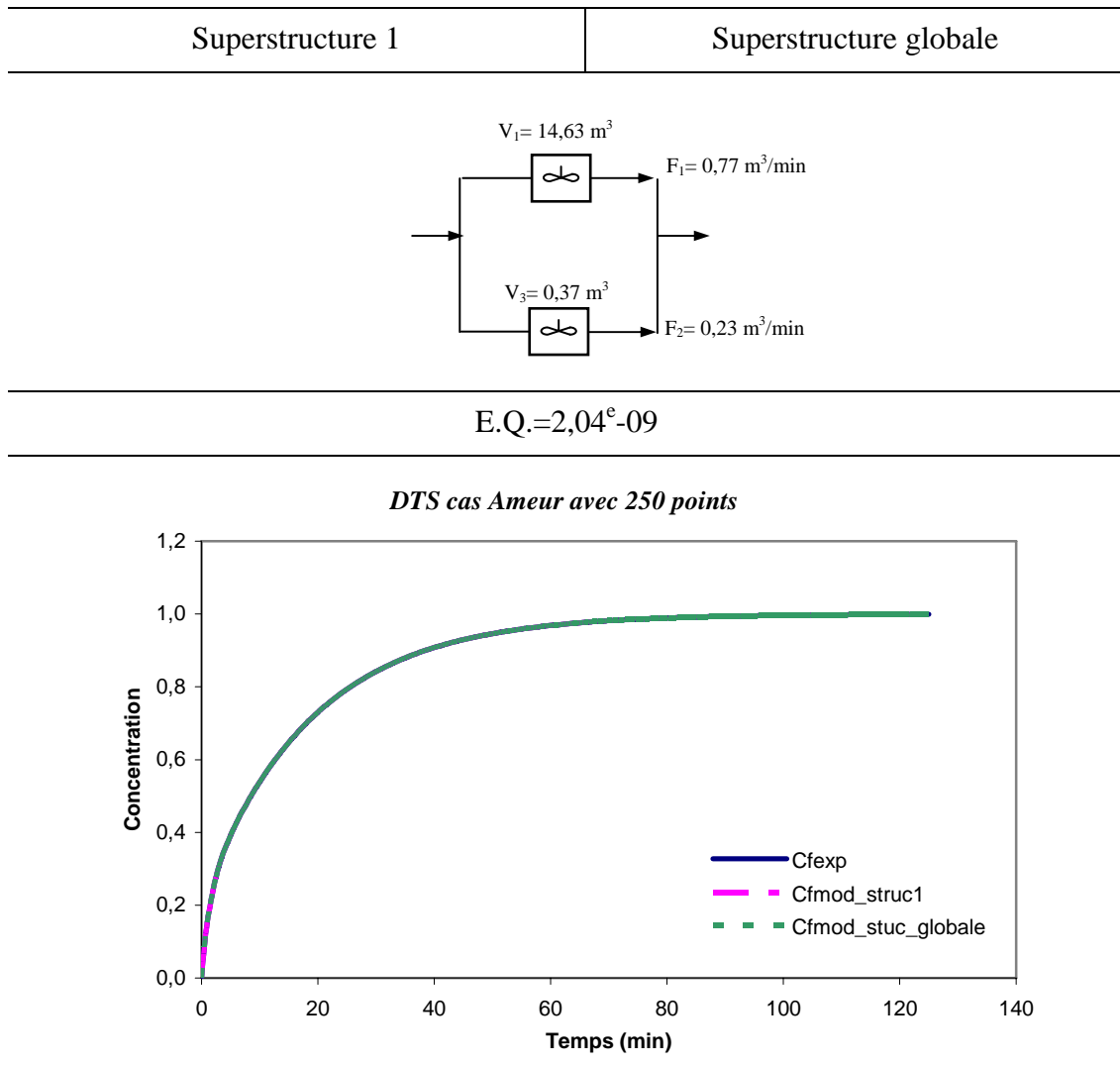


Tableau 7-5. Résultats suivant une discrétisation de 250 points.

Selon les deux superstructures, *GAMS* retrouve la même solution. On remarque que la direction du flux d'une branche n'est pas la même que celle du modèle initial. Le faible écart quadratique obtenu justifie l'existence de plusieurs solutions potentielles fournissant des DTS très proches numériquement de celle proposée par AMEUR.

Dans les deux exemples examinés, les solutions obtenues sont proches. Les structures sont différentes, mais les résultats sont numériquement équivalents. Tout porte à croire qu'il existe plusieurs solutions pouvant correspondre à une DTS donnée.

### 3.3. EXEMPLE DE REFERENCE

#### 3.3.1. Présentation du modèle

Le modèle de référence est schématisé sur la figure 7-9 ci-dessous.

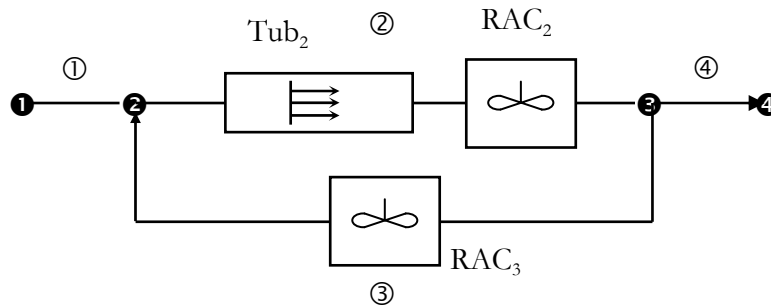


Figure 7-9. Exemple de référence.

Les paramètres choisis pour ce modèle sont les suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} Q_1=Q_4= 2 \text{ m}^3/\text{min} \\ Q_2=6 \text{ m}^3/\text{min} \\ Q_3=4 \text{ m}^3/\text{min} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} V_{RAC2} = 10 \text{ m}^3 \\ V_{RAC3} = 7,5 \text{ m}^3 \\ V_{piston2} = 7,5 \text{ m}^3 \end{array} \right.$$

Les indices associés aux modèles d'écoulements idéaux correspondent aux numéros de branches sur lesquelles ils se trouvent.

Cet exemple est traité suivant les deux types d'injections ; injection échelon et impulsion de Dirac. La courbe de DTS expérimentale du modèle est obtenue à partir de calculs effectués avec un logiciel de simulation développé Laquerbe (1999). Le but de ce logiciel est de pouvoir prédire la réponse à n'importe quel point du réseau, pour n'importe quel stimulus et ce quel que soit le point où est réalisée la perturbation. La résolution des équations représentant les RAC est effectuée en utilisant des intégrateurs qui permettent de traiter directement des systèmes algèbro-différentiels (Pantelides et Barton, 1993).

Pour les deux injections effectuées, la DTS du modèle est obtenue pour un temps total égal à 70 minutes avec une discrétisation de 70 points. Les DTS pour les deux types d'injections sont présentées figure 7-10:



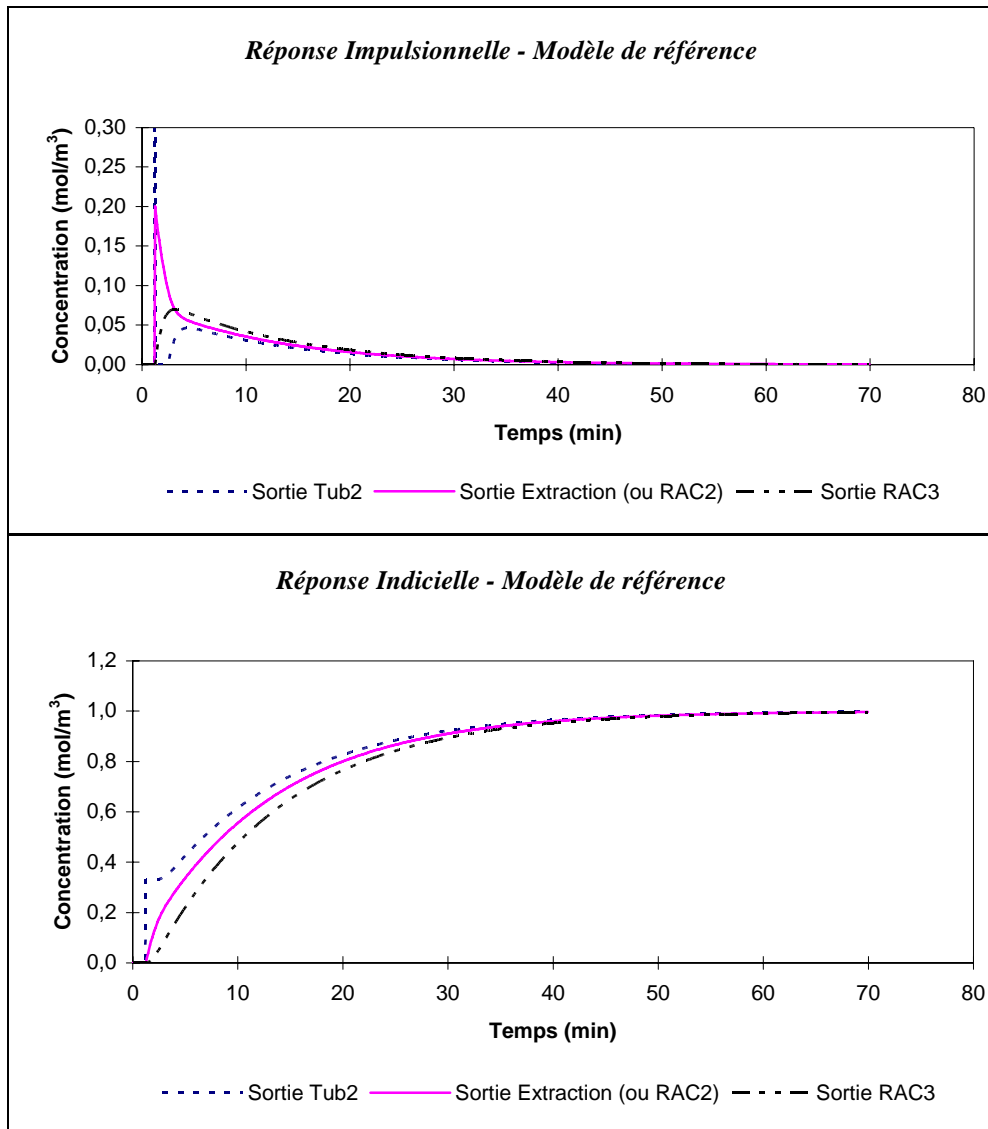


Figure 7-10. Exemple de réponses pour le modèle de référence.

### 3.3.2. Superstructures utilisées

Si l'on considère ces courbes comme issues d'une expérience de traçage, une première analyse qualitative permet de distinguer un retard au niveau de la réponse, ce qui est normal vu le choix de la structure pour ce modèle de référence. Cette analyse préliminaire des courbes de DTS paraît importante car elle influe sur le choix de la superstructure. Ce retard constaté induit l'existence de pistons ou de RAC en série. La mise en place d'une superstructure impliquant un piston en amont paraît donc réaliste.

Plusieurs superstructures ont été étudiées. La première superstructure, de taille relativement réduite est présentée sur la figure 7-11, alors que la seconde est plus complexe (figure 7-12).

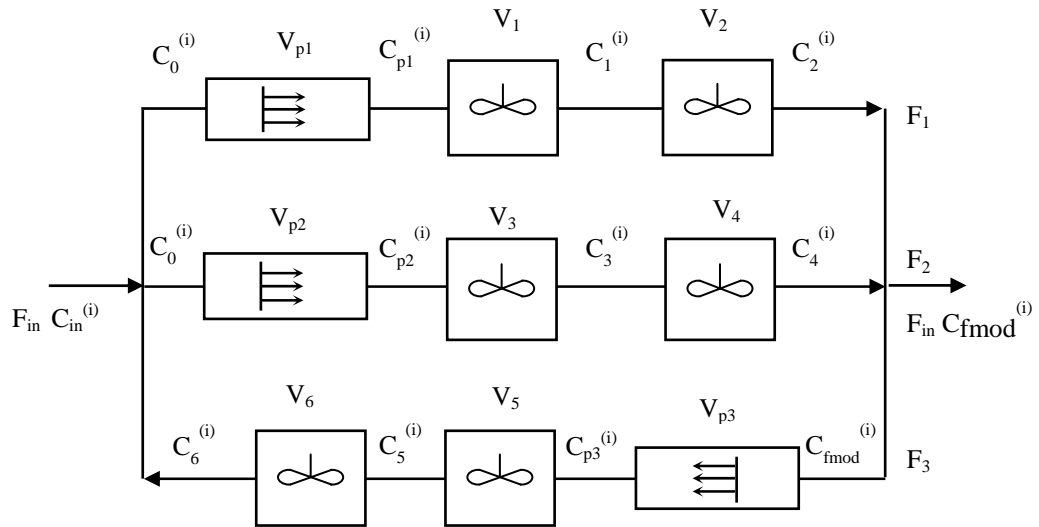


Figure 7-11. Superstructure 1.

La structure 1 comporte 9 variables de volumes, 3 de débits, 11 variables de concentrations associées aux 9 modules élémentaires. Le nombre de solutions potentielles est égal à  $2^9=512$ .

La seconde superstructure, plus complexe, est représentée sur la figure 7-12.

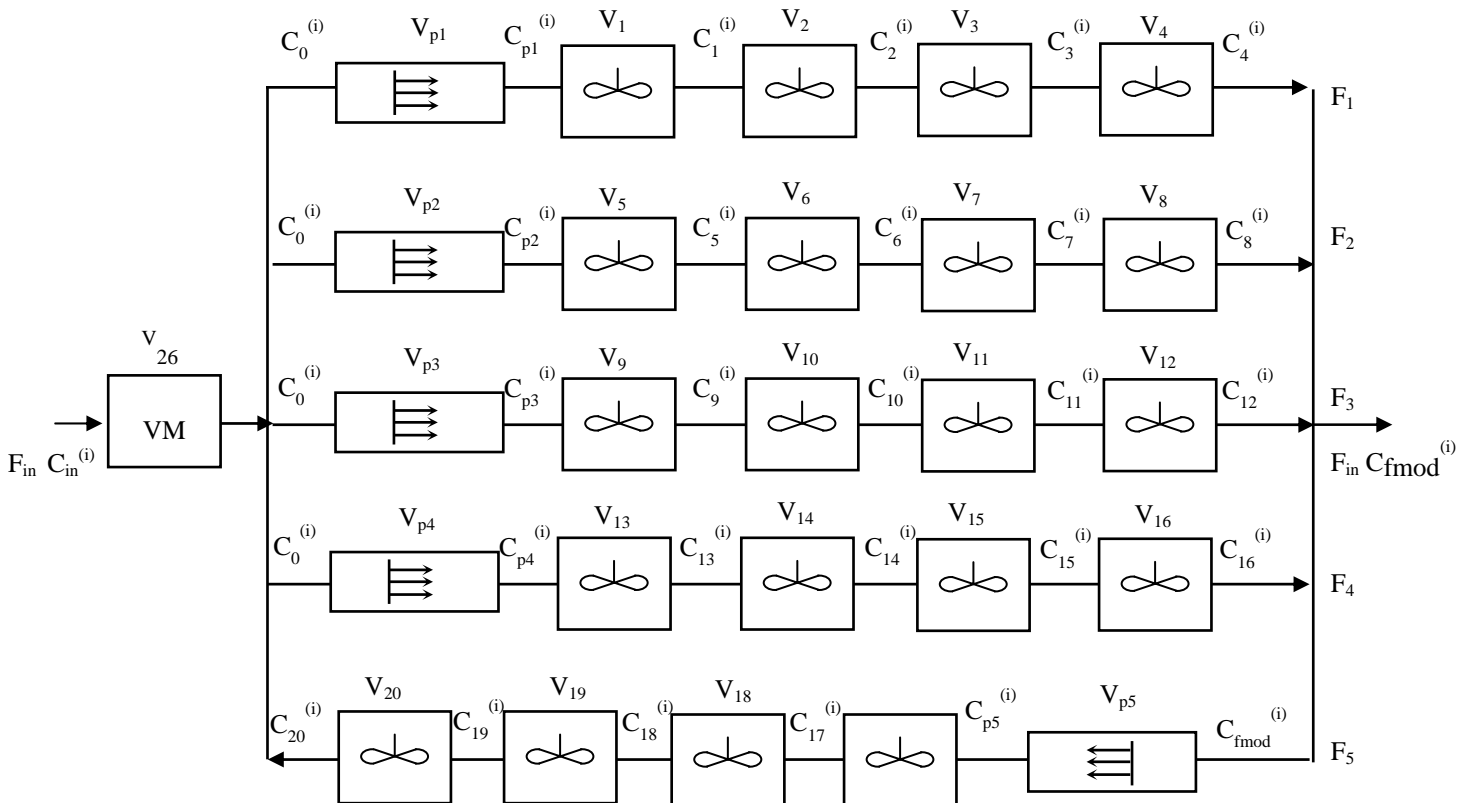


Figure 7-12. Superstructure 2.

La superstructure 2 donne naissance à un problème comportant 26 variables de volumes, 5 variables de débits, 26 variables de concentrations et 25 variables binaires associées aux réacteurs (on suppose que le volume mort existe toujours). Le nombre de solutions potentielles est égal à  $2^{26}=67\ 108\ 864$ .

**3.3.2.1. Purge échelon**

Les dimensions du problème présenté par la superstructure 1 (respectivement superstructure 2) en terme de variables et de contraintes suivant une purge échelon sont présentées dans le tableau 7-6 (respectivement 7-7).

Variables discrètes	Variables (concentrations)	Contraintes linéaires	Contraintes bilinéaires
9	770	14	350

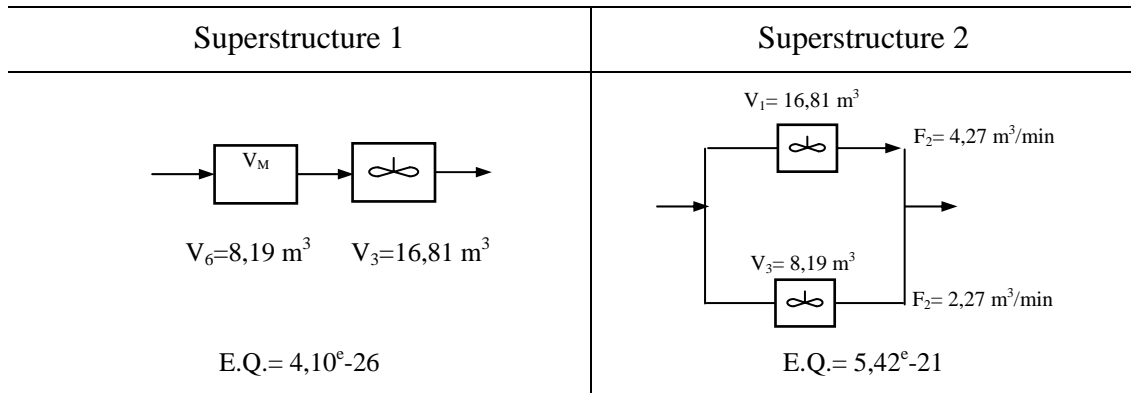
**Tableau 7-6. Dimension du problème de la superstructure 1 suivant le cas échelon**

Variables discrètes	Variables (concentrations)	Contraintes linéaires	Contraintes bilinéaires
26	1890	33	1610

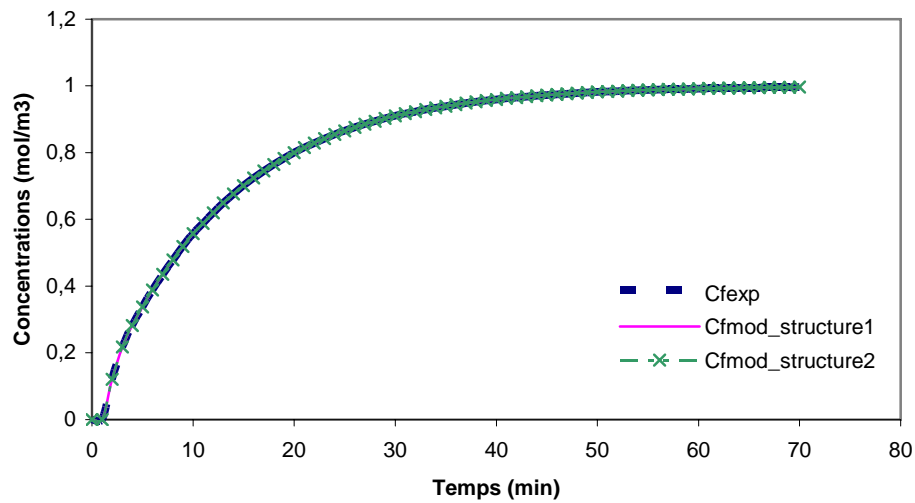
**Tableau 7-7. Dimension du problème de la superstructure 2 suivant le cas échelon.**

Dans les tableaux 7-6 et 7-7, le nombre de variables discrètes et les contraintes linéaires sont liés aux modules élémentaires. Les variables de concentrations et les contraintes bilinéaires sont définies à chaque pas de temps utilisé. Par exemple, dans le tableaux précédents, la valeur 770 (respectivement 1890), représente le nombre de variables de concentrations, 11 (respectivement 27), multiplié par le nombre de pas de temps 70.

Les solutions obtenues dans le cas d’une purge échelon sont présentées pour les deux superstructures dans le tableau 7-8.



*DTS cas exemple de référence suivant une purge échelon*



**Tableau 7-8. Résultats pour les deux superstructures avec une purge échelon.**

Les résultats obtenus sont également très proches, dans le premier cas, l'existence d'un volume mort est due à la présence d'un RAC (6) avec un débit le traversant nul. L'écart quadratique très faible indique que les deux solutions sont équivalentes au niveau de leurs réponses.

### 3.3.2.2. Impulsion de Dirac

Les dimensions du problème présenté par la superstructure 1 (respectivement 2) en terme de variables et de contraintes suivant une impulsion de Dirac sont présentées dans tableau 7-9 (respectivement 7-10).

Variables discrètes	Variables (concentrations)	Contraintes linéaires	Contraintes bilinéaires
219	770	28	770

**Tableau 7-9. Dimension du problème suivant la superstructure 1.**

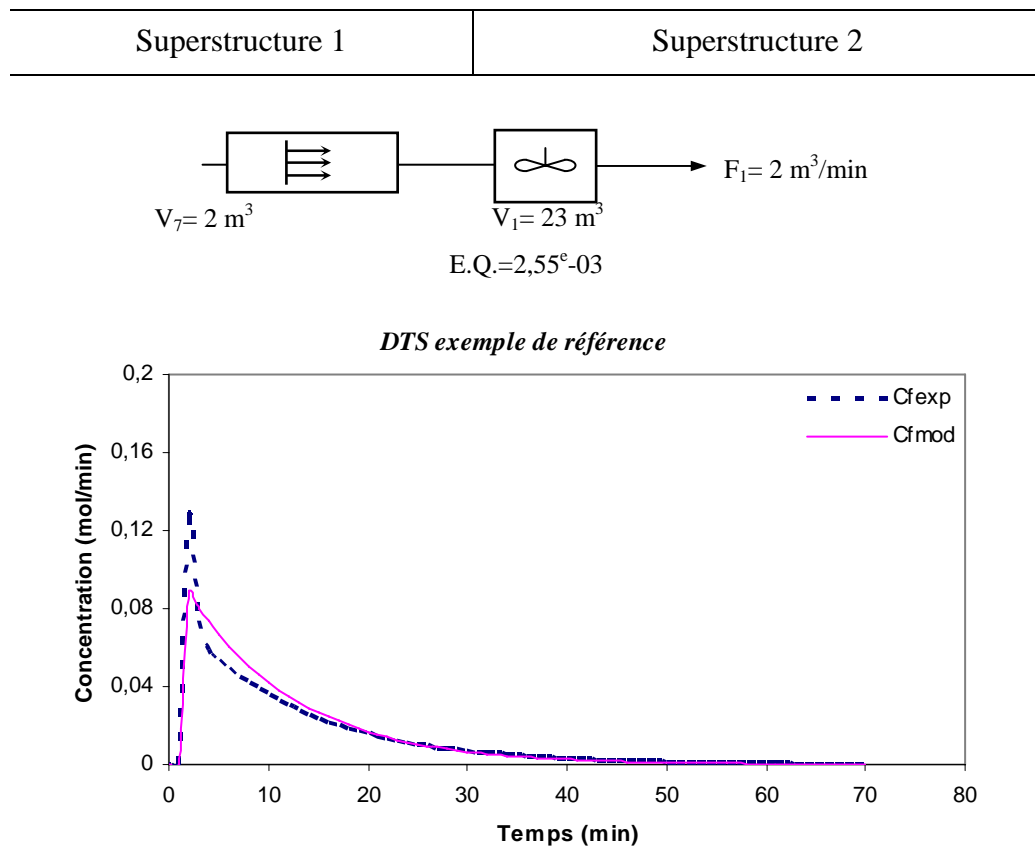
Variables discrètes	Variables (concentrations)	Contraintes linéaires	Contraintes bilinéaires
376	1890	1431	1890

**Tableau 7-10. Dimension du problème suivant la superstructure 2.**

Si on compare les tableaux 7-6 (respectivement 7-7) avec les tableaux 7-9 (respectivement 7-10), on constate une évolution des nombres de variables discrètes ainsi que des contraintes bilinéaires, due à la formulation du réacteur piston induisant des variables binaires supplémentaires en nombre proportionnel au pas de temps

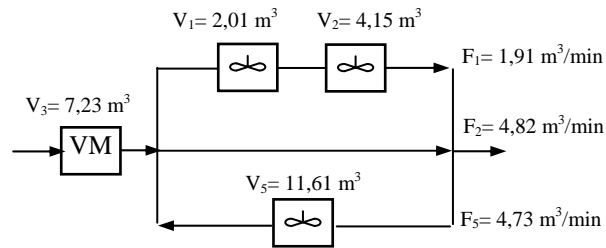
Cette formulation est effectuée à partir d'un ensemble de 4 équations linéaires et 1 équation bilinéaire présentées dans le chapitre 6 par les équations (6-16) à (6-20). Les contraintes linéaires représentent l'ensemble de la structure dans le tableau 7-8, alors qu'elles sont variables dans le tableau 7-9 suivant la formulation des réacteurs pistons utilisées.

Les résultats obtenus pour le cas d'une impulsion de Dirac pour les deux superstructures sont présentés dans le tableau 7-11.



**Tableau 7-11. Résultats pour les deux superstructures avec une impulsion de Dirac.**

D’après la modélisation du réacteur piston soumis à une impulsion de Dirac, présentée au chapitre précédent, chaque réacteur piston de la superstructure crée une variable binaire à chaque pas de temps. Dans les deux superstructures le nombre de variables binaires est de l’ordre de quelques centaines, ce qui rend plus ardue la résolution numérique du problème. De plus l’impulsion de Dirac associée à des réacteurs pistons génère une discontinuité au niveau de la réponse, ce qui peut également engendrer des difficultés lors de la résolution numérique des équations différentielles par la méthode d’Euler. Pour ces raisons, l’étude a été reprise à partir de la superstructure globale utilisée dans le chapitre 6 (figure 6-5) en remplaçant les réacteurs pistons par des RAC. Les résultats obtenus sont indiqués dans le tableau 7-12.



E.Q.=6<sup>e</sup>-05

*DTS exemple de référence*

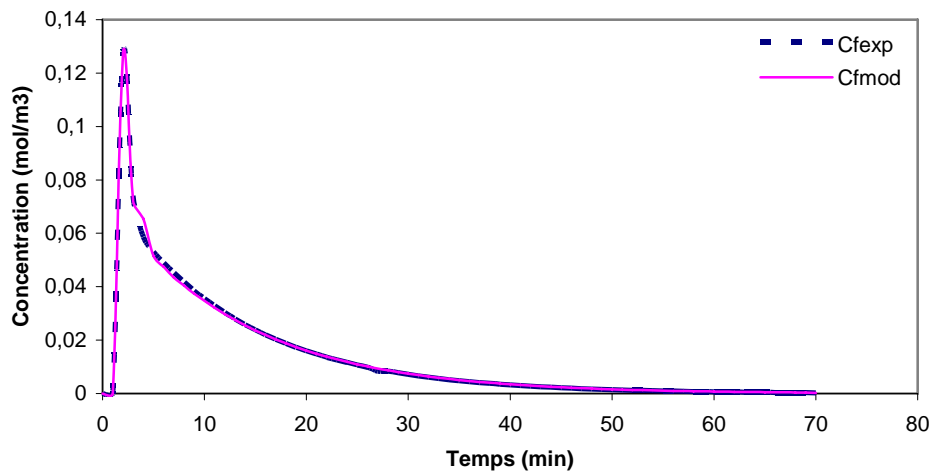


Tableau 7-12. Résultats pour la superstructure globale modifiée avec une impulsion de Dirac.

Cette dernière étude confirme bien que le modèle d’écoulement piston présenté au chapitre 6, peut entraîner des difficultés de résolution numériques, probablement dues à un nombre très important de variables binaires (nombre proportionnel au nombre de réacteurs pistons et au pas de temps utilisés).

## 4. ETUDE LOCAL DE MELANIE

### 4.1. PRESENTATION DE L'INSTALLATION

La cellule MELANIE (Moyens d'Essais Liés Aux Nuisances Incendie) est un local implanté au CEA de Grenoble dédié jadis aux expériences de feu. Cette installation est constituée d'un local en béton de forme parallélépipédique de volume  $100 \text{ m}^3$  dotée d'un système de ventilation facilement reconfigurable. Les conduits de soufflage et d'extraction de section rectangulaire de  $0,4 \times 0,5 \text{ m}$  comportent chacun deux bouches (l'une en position haute, proche du plafond et l'autre en position basse, à proximité du plancher), qui peuvent être ouvertes ou fermées arbitrairement. Les bouches de soufflage mesurent  $0,4 \times 0,6 \text{ m}$  tandis que les bouches d'extraction mesurent  $0,4 \times 0,8 \text{ m}$  (figure 7-13).

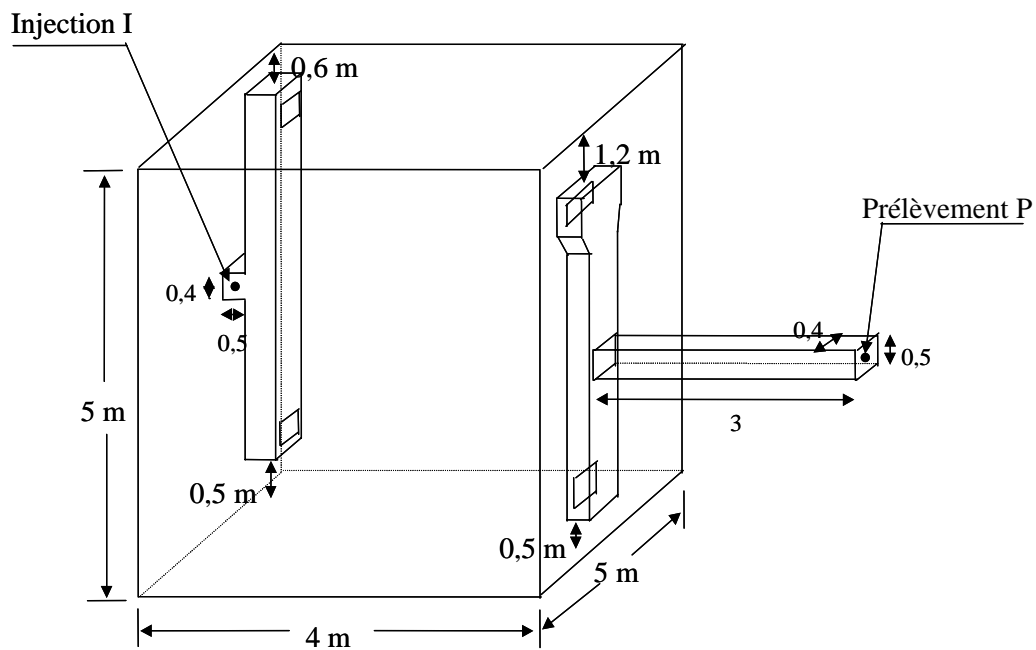


Figure 7-13. Schéma du banc d'essai MELANIE.

L'expérience retenue correspond à un traçage à l'hélium réalisé à froid pour une configuration possédant uniquement la bouche de soufflage (dans la partie basse) et la bouche d'extraction (dans la partie haute opposée) ouvertes.

Les expériences sont issues d'une série de mesures effectuées à froid par Eric Espi (1998). Le débit de soufflage est de 1000 m<sup>3</sup>/h CNTP (Conditions Normales de Température et de Pression) soit 1100 m<sup>3</sup>/h à 20°C, température à laquelle l'expérience a été menée. Seule la purge échelon est examinée. En effet la simulation numérique dans le cas d'une impulsion de Dirac, nécessite des informations, telles que le temps réel correspondant à l'injection, la quantité de traceur injectée, qui peuvent paraître secondaires lors d'une expérimentation, mais qui sont indispensables pour effectuer une simulation numérique dans des conditions correctes.

#### 4.2. REPONSE A UNE INJECTION ECHELON

La réponse expérimentale à une injection échelon est présentée sur la figure 7-14, avec 451 points d'échantillonnage recueillis sur une durée totale de 15 min (900 s), soit une période moyenne d'échantillonnage de 2 secondes. Les points d'échantillonnage n'étant pas uniformément répartis sur l'horizon de temps, un lissage de la courbe a été effectué afin de générer des points équidistants. Afin d'obtenir des problèmes de tailles raisonnables, 45 points (pas de temps de 20 secondes) et 180 points (pas de temps de 5 secondes) ont été utilisés dans cette étude.

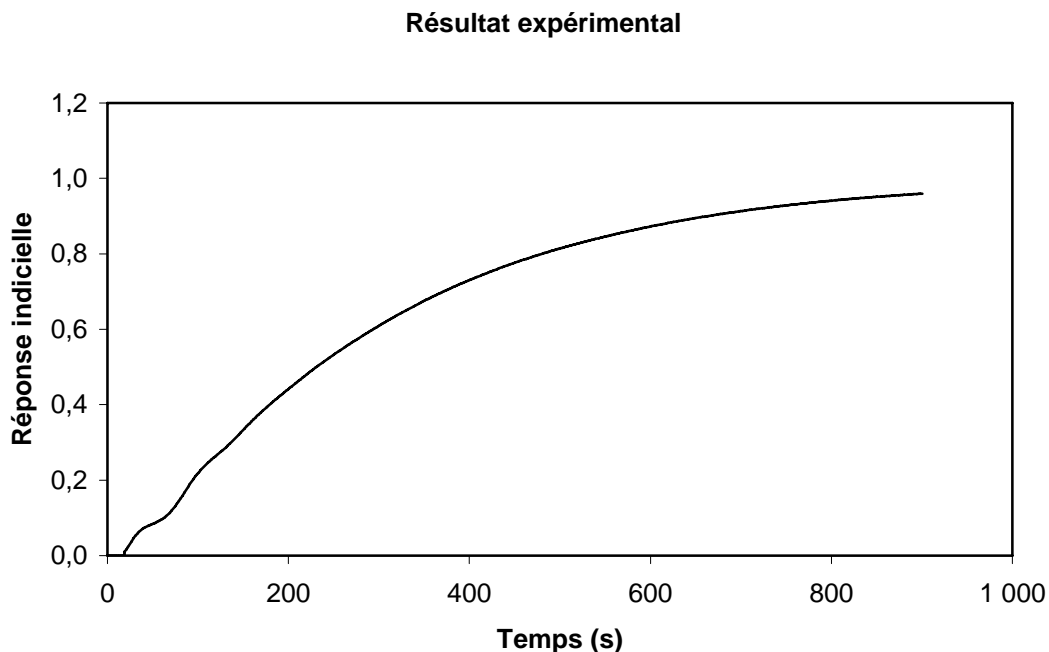


Figure 7-14. DTS expérimentale du local de Mélanie suivant une injection échelon.



### 4.3. MODELISATION DU LOCAL MELANIE

Deux superstructures sont traitées, la première correspond à la structure globale décrite dans le chapitre 6 (figure 6-5). Puis, une variante de la structure proposée par brienne et al. (2006) est utilisée afin de comparer les résultats obtenus. La superstructure proposée par brienne et al. (2006) a été développée, en s’inspirant des travaux de Laquerbe, pour traiter un problème de distribution de gaz au sein d’un liquide dans un bioréacteur à agitateurs multiples.

Pour mieux représenter le réacteur piston, une nouvelle formulation dénommée BV est mise en place. Cette seconde formulation dans le cas d’une injection échelon est dicté par une logique d’adaptabilité au problème réel. En effet, le réalisme physique et les formules mathématiques de modélisation peuvent révéler certains antagonismes, pour la représentation d’un réacteur piston. Cette seconde formulation dans le cas d’un échelon implique l’ajout de variables discrètes supplémentaires à chaque pas de temps utilisé. Cette nouvelle formulation est testée sur les deux superstructures, et permet également d’analyser la capacité de *GAMS* à traiter des problèmes comportant un nombre important de variables binaires.

La formulation BV est explicitée ci-dessous.

$$U B_v^{(i)} \geq t - \frac{V}{Q} \geq U (B_v^{(i)} - 1) \quad (7-2)$$

$$-U (1 - B_v^{(i)}) \leq C_{out}^{(i)} - C_{in}^{(i)} \leq U (1 - B_v^{(i)}) \quad (7-3)$$

$$C_{out}^{(i)} \leq U B_v^{(i)} \quad (7-4)$$

où  $U$  : borne maximale positive =  $\left( \text{Max} \left( t^{(i)} - \frac{V}{Q} \right) \right)$

$B_v^{(i)}$ : variable binaire pour le pas de temps  $i$

$C_{in}^{(i)}, C_{out}^{(i)}$  : concentration d’entrée et de sortie du réacteur piston comprise entre 0 et 1, pour le pas de temps  $i$

$V, Q$  : variable de volume et de débit.

La résolution de cet ensemble d'équations dépend de la valeur des variables binaires :

si  $B_v^{(i)} = 0$  :

$$\text{on trouve d'après (7-4) : } C_{out}^{(i)} \leq 0 \Leftrightarrow C_{out}^{(i)} = 0 \quad (7-5)$$

$$(7-2) : t - \frac{V}{Q} \geq -U \quad (7-6)$$

$$(7-3) \text{ et (7-5) : } -U \leq C_{in}^{(i)} \leq U \quad (7-7)$$

si  $B_v^{(i)} = 1$  :

$$\text{on trouve d'après (7-4) : } C_{out}^{(i)} \leq U \quad (7-8)$$

$$(7-2) : t - \frac{V}{Q} \leq U \quad (7-9)$$

$$(7-3) : 0 \leq C_{out}^{(i)} - C_{in}^{(i)} \leq 0 \Leftrightarrow C_{out}^{(i)} = C_{in}^{(i)} \quad (7-10)$$

La formulation proposée répond au problème physique représentant la réponse fournie par un réacteur piston dans le cas d'une injection échelon (voir chapitre 6-2.2.1.1-).

#### **4.4. RESULTATS SUIVANT LA SUPERSTRUCTURE GLOBALE**

La dimension du problème en terme de variables et de contraintes suivant la formulation du réacteur piston est présentée dans les tableaux (7-13) et (7-14).

Pas de temps	Variables discrètes	Variables (concentrations)	Contraintes linéaires	Contraintes bilinéaires
45	10	450	19	450
180	10	1800	19	1800

**Tableau 7-13. Dimension du problème suivant une formulation du réacteur piston sigmoïde pour la superstructure globale.**

Pas de temps	Variables discrètes	Variables (concentrations)	Contraintes linéaires	Contraintes bilinéaires
45	100	450	270	540
180	370	1800	1080	2160

**Tableau 7-14. Dimension du problème suivant une formulation du réacteur piston BV pour la superstructure globale.**

i correspond au nombre de pas de temps utilisé. D’après le tableau 7-13, on remarque que le nombre de variables discrètes et de contraintes linéaires sont fixes, car ils représentent les variables et les contraintes structurelles de la superstructure globale. Les variations du nombre des variables de concentrations et de contraintes bilinéaires sont liées à la discrétisation de l’horizon de temps utilisé. Les bilinéarités sont constituées par les équations numériques représentant les RAC, les bilans de matière entrée-sortie du constituant, et les formulations utilisées pour décrire les réacteurs.

Si l’on compare l’évolution des variables discrètes et des contraintes dans les tableaux 7-13 et 7-14, on remarque des changements considérables. Cette différence s’explique dans le second tableau par l’utilisation de la formulation BV pour les deux réacteurs piston. En effet contrairement à la représentation d’un réacteur piston sous forme sigmoïde, qui ne fait intervenir à chaque pas de temps, qu’une contrainte bilinéaire, la formulation BV fait apparaître deux contraintes linéaires et deux contraintes bilinéaires supplémentaires à chaque pas de temps. L’évolution du nombre de contraintes linéaires et bilinéaires s’en trouve donc fortement affectée.

#### 4.4.1. Résultats avec 45 points

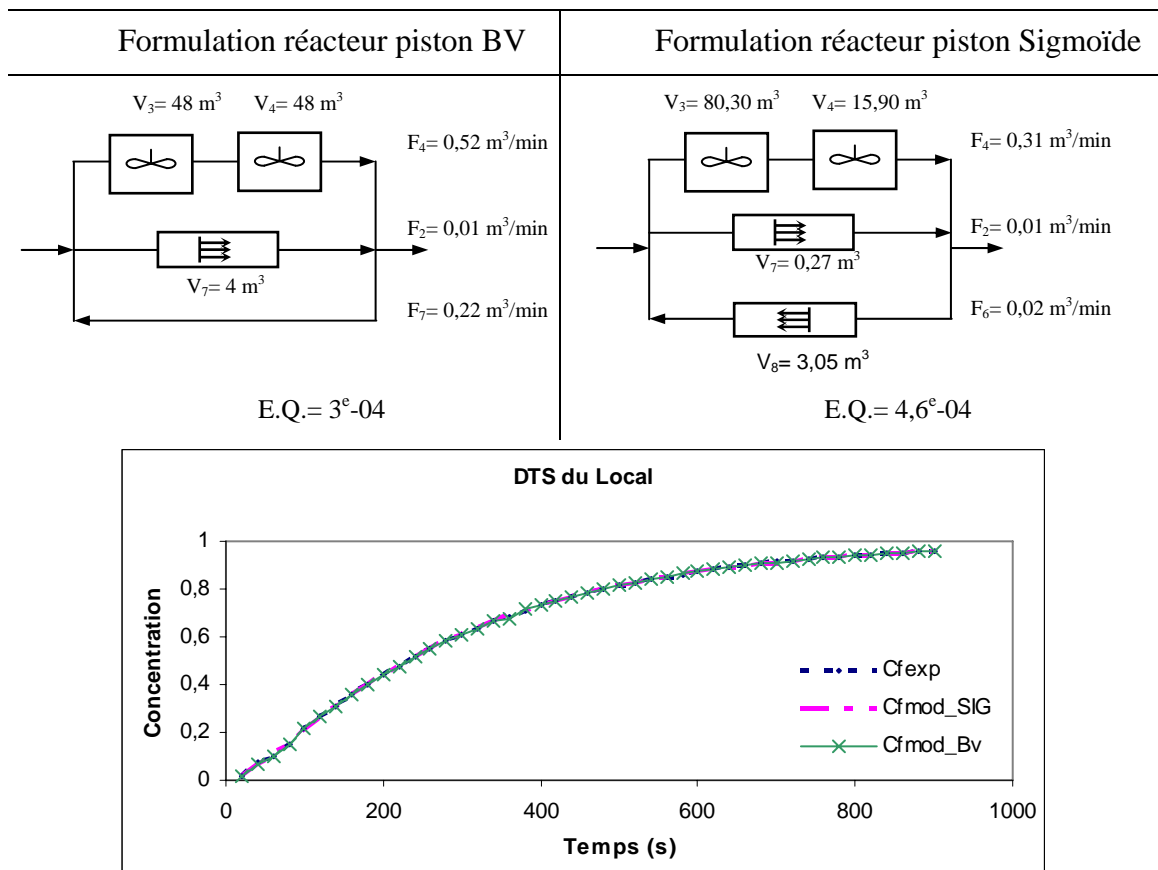
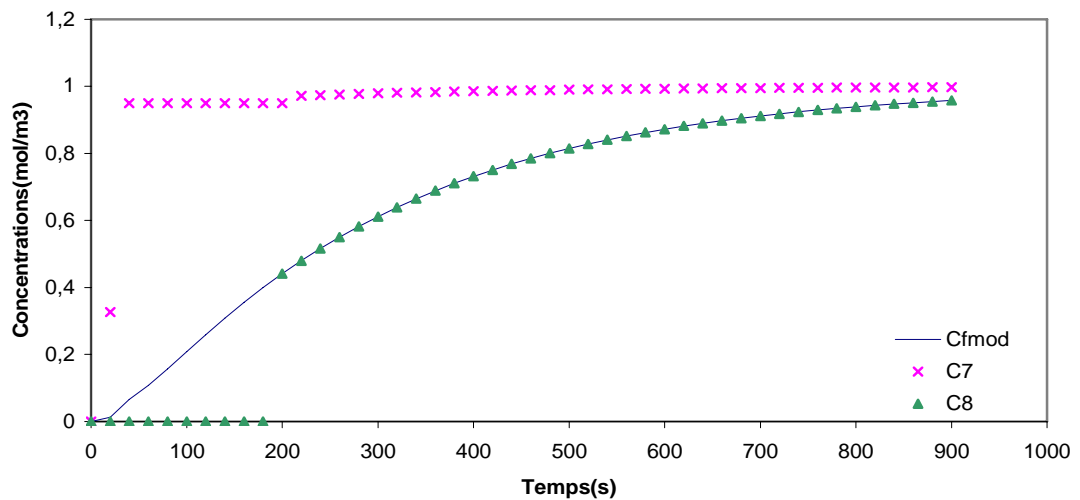


Tableau 7-15. Résultats local Mélanie avec injection échelon pour 45 points.

Les structures obtenues sont différentes mais l'écart quadratique est du même ordre de grandeur, ce qui traduit des résultats très proches. A noter que le temps de calcul selon la formulation BV est de l'ordre de 2837 secondes pour 43900 itérations alors que celui pour une formulation sigmoïde est de 64 secondes pour 2332 itérations. Cet écart considérable démontre bien les difficultés rencontrées par GAMS lors de la résolution de problèmes comportant un nombre élevé de variables binaires.

Pour vérifier la sensibilité de la réponse fournie par le modèle utilisant une forme sigmoïde pour représenter le réacteur piston, les réponses des deux pistons de la structure ainsi que la concentration de sortie du modèle sont présentées dans la figure 7-15.

*DTS du modèle obtenue et des réacteurs pistons*



*Figure 7-15. Concentrations de sortie du modèle et des réacteurs pistons.*

D'après les réponses obtenues pour les débits et les volumes des réacteurs pistons ( $V_7=0,30 \text{ m}^3$ ,  $F_2=0,01 \text{ m}^3/\text{min}$ ,  $V_8=3,05 \text{ m}^3$  et  $F_6=0,02 \text{ m}^3/\text{min}$ ), on constate que la courbe représentant la concentration de sortie du réacteur piston 7 ( $C_7$ ) présente un décrochage dès le premier pas de temps (à 20 secondes), le temps de séjour correspondant au rapport du volume sur le débit pour le réacteur piston est égal à 21, la réponse obtenue est tout à fait satisfaisante car la concentration de sortie est égale à celle de l'entrée dès l'instant du décrochage.

Les résultats obtenus pour le réacteur piston 8 confirment l'aptitude d'une formulation sigmoïde à présenter correctement un réacteur piston parfait. Le décrochage de la courbe est obtenu à partir de 180 secondes, correspondant sensiblement au rapport du temps de séjour moyen obtenu, égal à 191. Si on examine de plus près la valeur de la

concentration de sortie à 180 secondes, elle est égale à  $5,37 \cdot 10^{-5}$  mole/m<sup>3</sup>. Ce résultat indique que le décrochage de la courbe s'effectue sur un intervalle de temps très faible. D'après la définition d'un réacteur piston parfait, le décrochage doit s'effectuer instantanément. Cependant, vu le faible écart de temps, il peut être négligé ce qui conduit à conclure que la formulation sigmoïde peut être utilisée pour représenter correctement un réacteur piston, sans générer autant de complexité mathématique que la formulation BV.

#### 4.4.2. Résultats avec 180 points

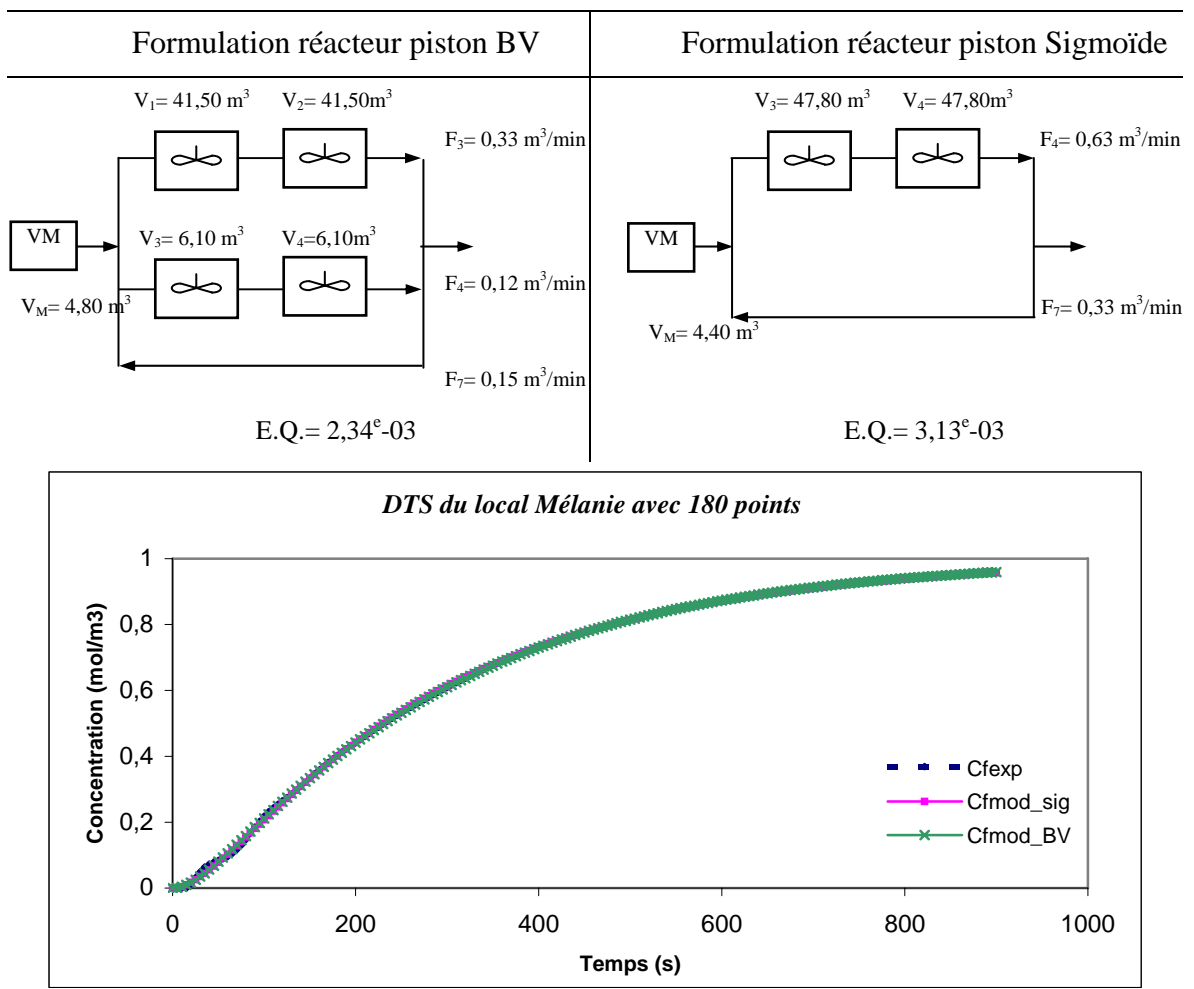


Tableau 7-16. Résultats du local Mélanie avec injection échelon pour 180 points.

On constate que les structures sont différentes de celles obtenues avec un pas de temps égal à 45. Avec un nombre de 180 pas de temps, l'écart au niveau des concentrations devient plus faible, les courbes du modèle ont tendance à suivre une allure correspondant beaucoup plus à une évolution de RAC que de réacteur piston.

4.5. RESULTATS OBTENUS SUIVANT LA SUPERSTRUCTURE 2

La superstructure utilisée, inspirée de celle de brienne et al. (2006), est légèrement différente de la seconde superstructure de l'exemple de référence (figure7-12). Elle comporte une branche en moins, car une étude préliminaire a montré que l'ajout de branches n'apportait rien au niveau de la précision des résultats.

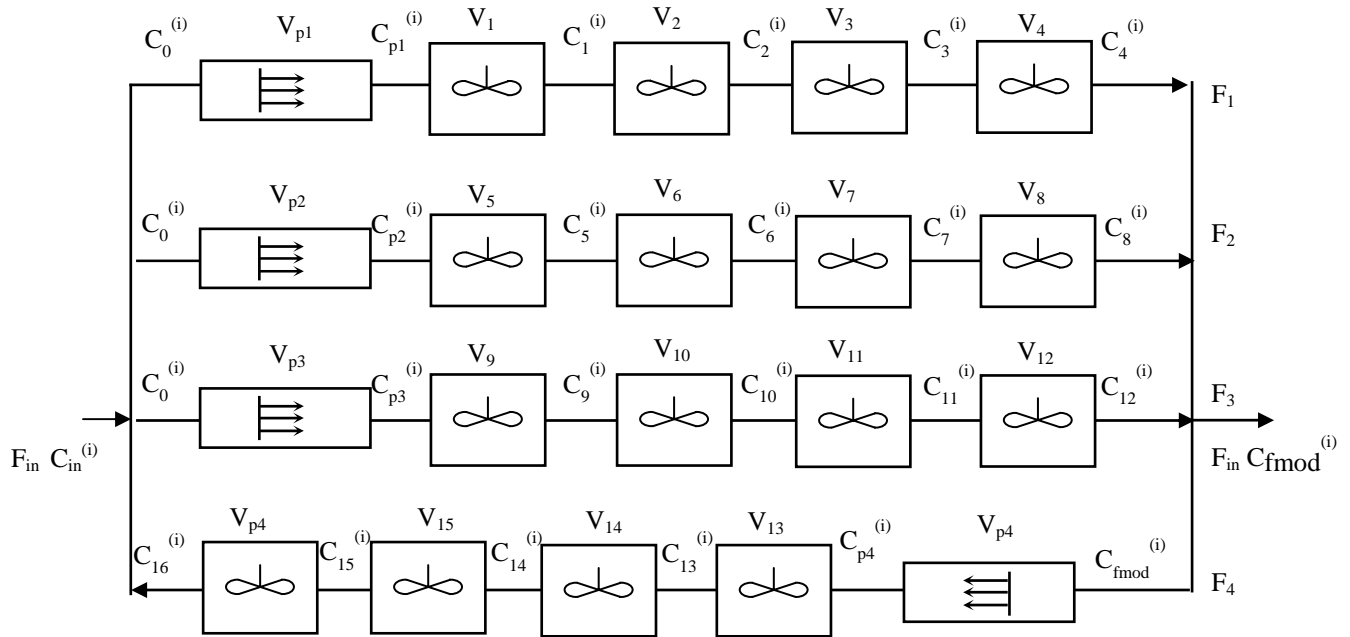


Figure 7-16. Superstructure 2.

La dimension du problème en terme de variables et de contraintes suivant la formulation du réacteur piston est présentée dans les tableaux 7-17 et 7-18.

Pas de temps	Variables discrètes	Variables (concentrations)	Contraintes linéaires	Contraintes bilinéaires
45	20	945	26	990
180	20	3780	26	3960

Tableau 7-17. Dimension du problème suivant une formulation du réacteur piston sigmoïde pour la superstructure 2.

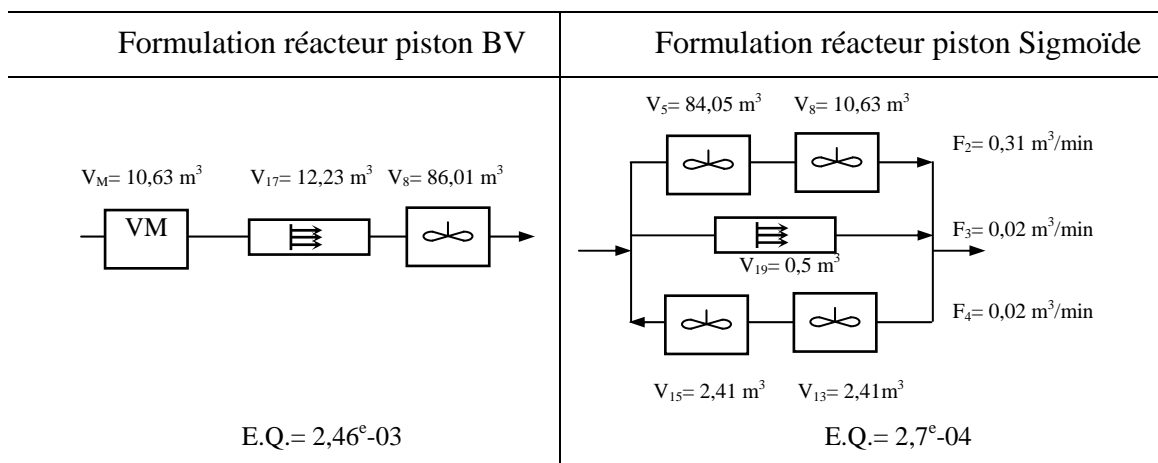
Pas de temps	Variables discrètes	Variables (concentrations)	Contraintes linéaires	Contraintes bilinéaires
45	200	945	556	1170
180	740	3780	2186	4680

Tableau 7-18. Dimension du problème suivant une formulation du réacteur piston BV pour la superstructure 2.

Les variables et les contraintes sont dénombrées de la même manière que dans le cas de la superstructure globale. Pour les variables discrètes, (tableau 7-17), 20 variables représentant l'existence des différents modules élémentaires. L'utilisation de variables binaires supplémentaires avec la formulation piston BV induit l'ajout de 4 variables binaires à chaque pas de temps utilisé, d'où cette différence au niveau des tableaux 7-17 et 7-18.

Comme dans le cas précédent, les variables de concentrations sont définies à chaque pas de temps, alors que pour la formulation sigmoïde le nombre de contraintes linéaires est indépendant de la discrétisation, ce qui n'est pas le cas pour la formulation BV. Le nombre de contraintes bilinéaires est différent entre les deux tableaux, car dans la formulation sigmoïde, il y a 22 contraintes à chaque pas de temps, alors que dans la formulation BV, leur nombre passe à 26.

#### 4.5.1. Résultats avec 45 points



DTS du local de Mélanie avec 45 points

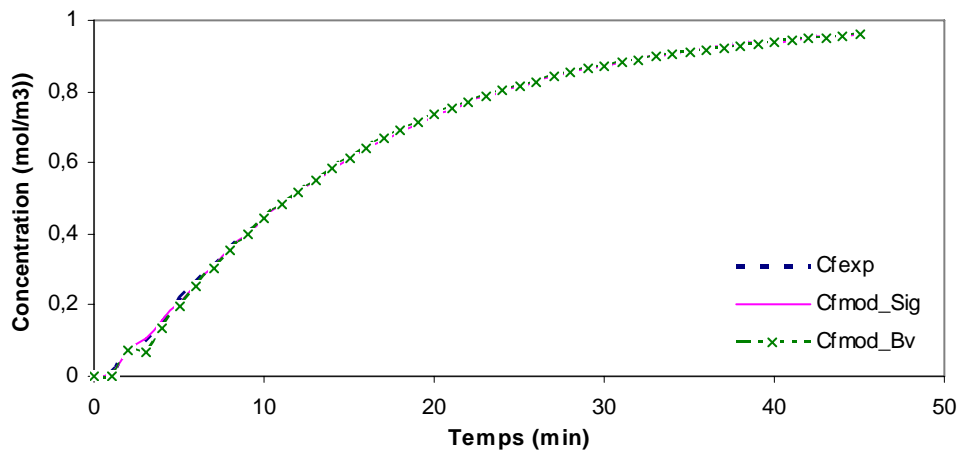


Tableau 7-19. Résultats du local de Mélanie avec injection échelon et 45 points.

L'utilisation de la formulation sigmoïde conduit à une structure légèrement différente de celle obtenue avec la superstructure globale. Certes la branche du débit 4 avec les RAC 13 et 15, ne pouvait pas exister dans le résultat précédent, néanmoins, les différents ordres de grandeur sont quasiment identiques pour les variables de débits et de volumes.

La solution obtenue par une formulation BV paraît moins bonne à la lueur des écarts quadratiques, par contre le nombre de réacteurs est inférieur à celui de la formulation sigmoïde. Tout porte à croire que la solution donnée par la formulation BV est de moins bonne qualité, ce qui est certainement dû à l'utilisation de variables supplémentaires engendrées par cette formulation.

4.5.2. Résultats suivant 180 points

Formulation réacteur piston BV	Formulation réacteur piston Sigmoïde
échec	

DTS du local Mélanie avec 180 points

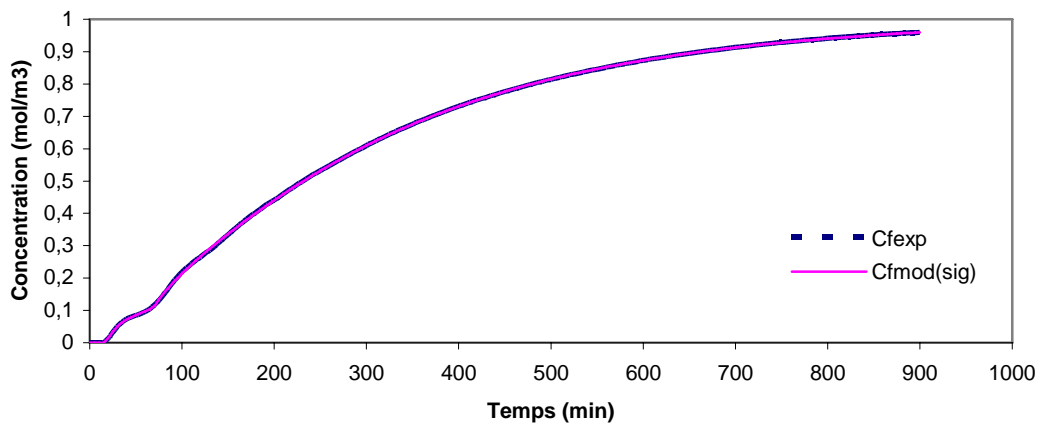


Tableau 7-19. Résultats du local de Mélanie avec injection échelon et 180 points.



La formulation sigmoïde trouve une structure avec un nombre de modules élémentaires plus important. Compte tenu du nombre de pas de temps plus important, GAMS semble rencontrer des difficultés pour obtenir cette solution, bien que l'écart quadratique demeure faible.

L'échec de résolution pour la formulation BV est certainement dû à la taille importante du problème.

Les résultats obtenus sur ces deux superstructures de tailles différentes montrent qu'il n'est pas nécessaire d'augmenter le nombre de réacteurs pistons dans la superstructure. Ainsi, une troisième superstructure ne comportant que des RAC, avec seulement un réacteur piston en entrée est étudiée dans la section suivante.

#### 4.6. RESULTATS OBTENUS SUIVANT LA SUPERSTRUCTURE 3

La superstructure testée est présentée dans la figure 7-17.

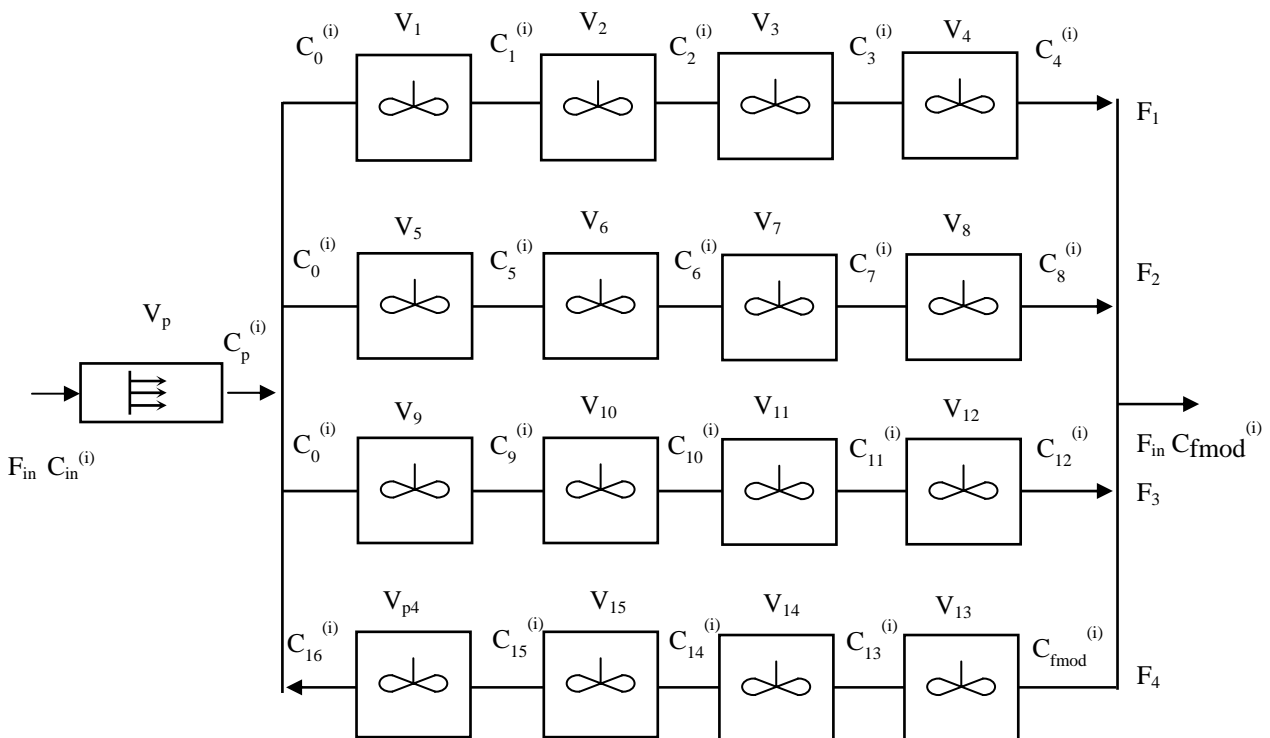


Figure 7-17. Superstructure 3.

La dimension du problème en terme de variables et de contraintes pour les deux formulations du réacteur piston est présentée dans les tableaux 7-21 et 7-22.

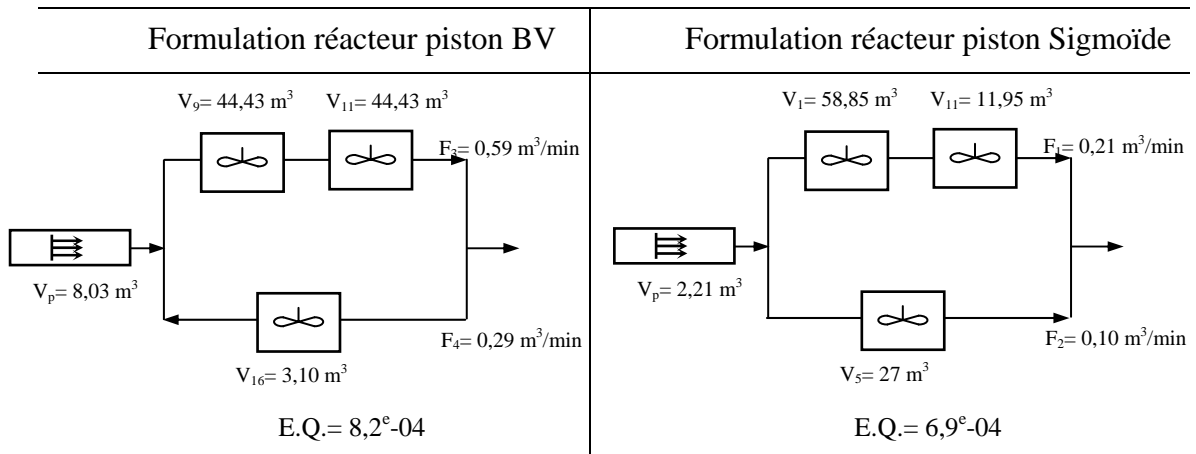
Pas de temps	Variables discrètes	Variables (concentrations)	Contraintes linéaires	Contraintes bilinéaires
45	17	765	23	855
180	17	3060	23	3420

Tableau 7-21. Dimension du problème suivant une formulation du réacteur piston sigmoïde pour la superstructure 3.

Pas de temps	Variables discrètes	Variables (concentrations)	Contraintes linéaires	Contraintes bilinéaires
45	62	765	158	900
180	197	3060	563	3600

Tableau 7-22. Dimension du problème suivant une formulation du réacteur piston BV pour la superstructure3.

4.6.1. Résultats avec 45 points



DTS du local Mélanie avec 45 points

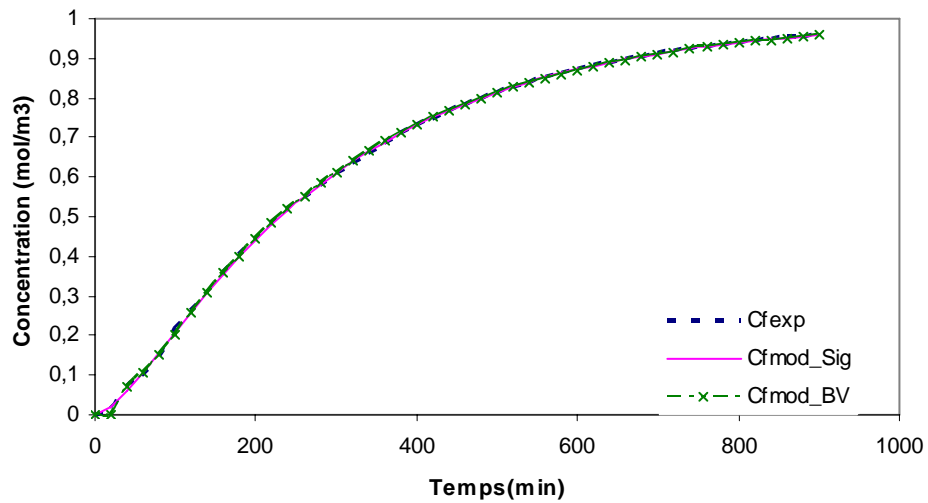


Tableau 7-23. Résultats du local Résultats du local de Mélanie avec injection échelon et 180 points.

Les solutions obtenues sont assez proches structurellement, sauf que la disposition des RAC est différente. Cependant, l'ensemble des résultats est quasiment identique. Compte tenu des écarts quadratiques obtenus, les résultats se révèlent plus intéressants que ceux fournis par la superstructure 2.

4.6.2. Résultats avec 180 points

Formulation réacteur piston BV	Formulation réacteur piston Sigmoide
échec	

DTS du local Mélanie avec 180 points

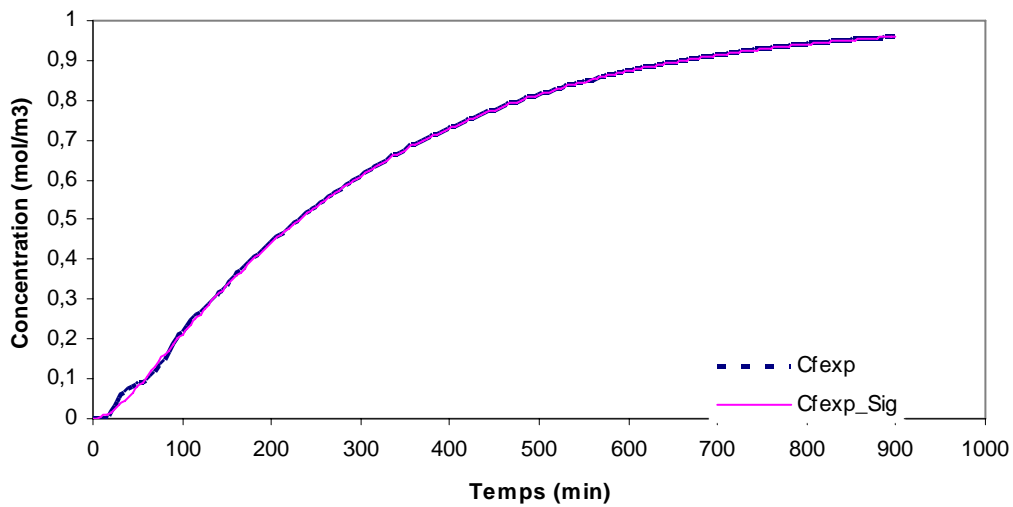


Tableau 7-24. Résultats du local de Mélanie avec injection échelon et 180 points.

La structure obtenue suivant la formulation sigmoïde est moins complexe que celle obtenue dans le tableau 7-20. GAMS arrive à obtenir une structure de taille correcte vis-à-vis des autres, ce qui peut être intéressant dans le cas où un grand nombre de pas de temps est utilisé. On constate aussi, comme dans le cas précédent, l'échec de la résolution de la fonction BV engendré par la taille du problème. Comparativement à la première superstructure, les résultats obtenus sont globalement équivalents.

Cette étude des superstructures conduit à penser qu'il n'est pas nécessaire d'utiliser des superstructures très complexes pour obtenir des solutions de qualité, comme celles fournies par la superstructure relativement simple de la figure 6-5.

A titre de comparaison, la solution identifiée par Laquerbe (1999) est rappelée sur la figure suivante.

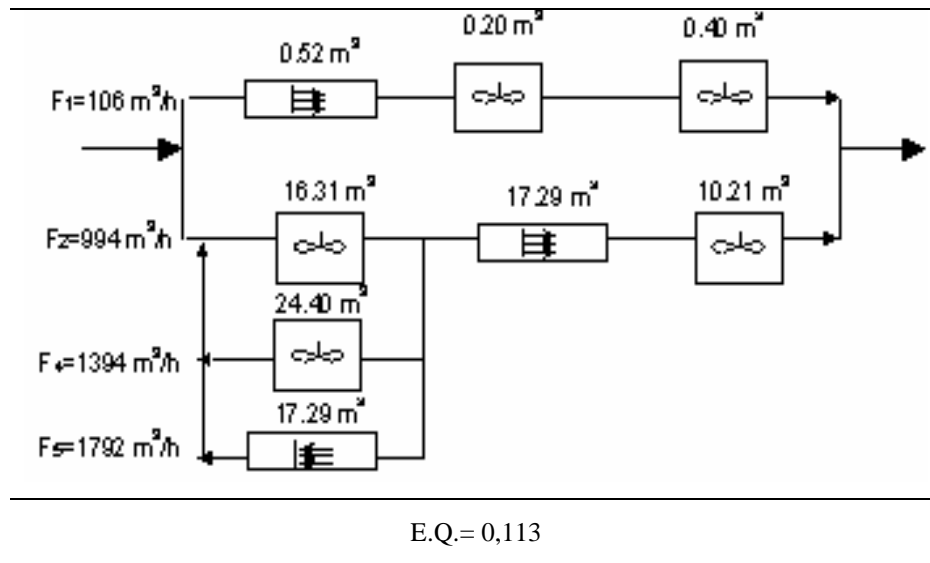


Tableau 7-25. Solution optimale de Laquerbe (1999).

En se plaçant dans le cas de la première superstructure qui fournit les meilleurs résultats, les différentes solutions obtenues avec 45 et 180 points sont proches entre elles (nombre de modules élémentaires égal à 4 et 5) et sont nettement moins complexes que celles reportées par Laquerbe (nombre de modules élémentaires est égal à 8). En plus, d'après l'écart quadratique obtenu par Laquerbe égal à 0,113 (écart quadratique moyen égal à  $2,51 \times 10^{-4}$ ) et celui de la structure avec 180 points qui est égal à  $3,13 \times 10^{-3}$  (écart quadratique moyen égal à  $1,7 \times 10^{-5}$ ), l'écart relatif moyen entre les concentrations des variables obtenus est plus faible dans cette étude.

## 5. CONCLUSION

Dans cette seconde partie l'identification de modèles d'écoulement en régime dynamique a porté sur la modélisation de locaux ventilés. Par manque d'informations expérimentales sur les réponses à une impulsion de Dirac, seules des purges échelons, hormis un seul cas pour un exemple, ont été traitées.

Dans la première partie, le traitement de trois exemples préliminaires a permis de vérifier la capacité du solveur SBB pour résoudre des problèmes MINLP dynamiques. En effet, de nombreux essais ont été effectués sur des superstructures différentes et des horizons de temps distincts. Les résultats obtenus se sont révélés pertinents et ont eu une large influence sur les démarches adoptées dans le cas du local de ventilation.

Dans le cadre des préliminaires, il s'est avéré que plusieurs solutions pouvaient correspondre, avec des écarts quadratiques très faibles, à une même courbe de DTS.

Dans la seconde partie, un local expérimental du CEA, l'enceinte Mélanie, est modélisé. Différents cas de figures relevant de la nature, la taille et la complexité de la superstructure ont été traités. Il est apparu que le choix de la superstructure n'était pas trivial, car il conditionne l'agencement des modules élémentaires composant la solution trouvée, bien que dans tous les cas l'écart quadratique soit toujours très faible. Une analyse fine de la courbe de distribution de temps de séjours devrait permettre d'orienter le choix de la superstructure.

Dans les exemples préliminaires, aussi bien que dans le traitement du local Mélanie, une représentation du réacteur piston, qui pouvait apparaître très satisfaisante vis-à-vis de leur fonctionnement réel, n'a fait qu'accroître considérablement le nombre de variables binaires du problème, et donc rendre sa résolution beaucoup plus délicate, qu'avec une formulation sigmoïde habituelle.

Dans tous les cas, les solutions obtenues sont plus simples et paraissent meilleures au vu de l'écart quadratique par rapport aux courbes de DTS expérimentales que celle antérieures de Laquerbe.

**CONCLUSIONS  
ET  
PERSPECTIVES**



Au terme de cette étude dédiée à l'identification de modèles, en particulier de modèles d'écoulements par une approche d'optimisation mixte déterministe, plusieurs points se doivent d'être soulignés.

L'analyse bibliographique effectuée en début du mémoire, a conduit au constat que les méthodes stochastiques couplées avec un algorithme d'optimisation continue de type NLP, fréquemment mises en œuvre en Génie des Procédés pour aborder ce problème de nature MINLP, mais également celui de la conception des procédés, peuvent rencontrer certaines difficultés. La première est intimement liée à la nature même de ces procédures, qui de par leur démarche stochastique fournissent des solutions dont on ne peut évaluer théoriquement la qualité. La seconde, plus technique mais fortement pénalisante, réside dans les difficultés d'initialisation de la procédure de résolution continue à chaque itération de la méthode stochastique. Ces constats ont orienté le choix de méthodes de résolution MINLP déterministes. Plus précisément, l'environnement de modélisation *GAMS* (General Algebraic Modelling System) a été adopté, car malgré ses imperfections, il s'agit de l'un des rares outils commerciaux dans ce domaine, issu d'une compilation de résultats dans le secteur de l'optimisation provenant de diverses universités et laboratoires, et qui tend à s'imposer comme un standard en Génie des Procédés.

L'environnement *GAMS* comporte deux solveurs de problèmes MINLP, *DICOPT++* reposant sur le principe de l'approximation externe, égalité, relaxation et pénalisation, et *SBB* qui est fondé sur une méthode Branch and Bound. Une étude préliminaire des deux codes effectuée sur des exemples « fabriqués » à solutions connues, ainsi que sur un problème de conception d'un réseau de transport de gaz naturel, a montré un avantage en faveur du code *SBB*, en particulier en ce qui concerne l'initialisation des variables, en dépit des temps de calcul parfois plus importants que *DICOPT++*, mais qui n'en demeurent pas moins très acceptables pour le domaine d'application concerné.

Cette étude comparative de deux procédures de résolution est poursuivie par la modélisation dans le cas stationnaire d'un bassin de décantation, ainsi que celle d'un réacteur à lit fluidisé de déphosphatation d'effluents aqueux, problèmes traités antérieurement dans la bibliographie. Bien que dans les deux cas, les solutions obtenues soient de meilleure qualité que celles publiées auparavant, *DICOPT++* semble moins performant que *SBB* en ce qui concerne la qualité de la solution, mais également en regard de sa forte dépendance vis-à-vis de l'initialisation des variables. Afin de s'assurer de l'indépendance de cette conclusion par rapport à la superstructure utilisée, pour la modélisation du réacteur de déphosphatation, deux autres superstructures plus



complexes que celle présentée dans la littérature ont été étudiées, et font toujours ressortir la supériorité de *SBB* sur *DICOPT++*. Cette analyse de superstructures montre également qu'il n'est pas nécessaire de mettre en place des superstructures de très grandes tailles, qui ne font qu'augmenter la complexité du problème au regard de sa dimension, sans toutefois apporter un gain significatif quant à la qualité des solutions obtenues.

L'étude de problèmes en régime dynamique, menée dans la dernière partie du mémoire s'est donc poursuivie avec la procédure *SBB*. Contrairement au cas stationnaire où le problème consistait à déterminer un modèle permettant de retrouver au mieux une consigne de sortie, en l'occurrence une concentration, dans un problème dynamique, l'objectif est d'extraire d'une superstructure le modèle qui fournisse une courbe de Distribution de Temps de Séjour (DTS) s'approchant le plus possible d'une courbe de DTS expérimentale. Sur le plan numérique, l'horizon de temps où est définie la courbe de DTS est discrétisé, et le problème se transforme en minimisation des écarts quadratiques entre points expérimentaux situés sur la courbe issue de l'expérience et des points fournis par le modèle identifié. Les courbes de DTS expérimentales sont reprises de la littérature, plus précisément de travaux effectués récemment dans l'équipe de recherche. Dans le chapitre six, le premier de la partie dynamique, la procédure est validée sur des exemples dont les courbes de DTS sont simulées sous Excel et qui servent de référence, où deux types de stimuli, la purge échelon et l'impulsion de Dirac, sont étudiés. Dans le cas de la purge échelon, les réacteurs à cuves idéaux sont modélisés suivant une approche intégrale et une procédure d'intégration numérique. Il ressort de la comparaison de ces deux techniques de modélisation que la méthode numérique d'Euler, plus simple à mettre en œuvre dans des superstructures complexes, fournit d'excellents résultats, alliant qualité des résultats et précision de l'intégration, qui évite d'avoir recours à des méthodes d'ordres plus élevés, telles que les techniques de Runge Kutta. Avec une modélisation numérique des réacteurs à cuves agités continus, car l'approche intégrale serait trop complexe à utiliser, et une impulsion de Dirac, la courbe de DTS de la référence est retrouvée avec un écart quadratique très faible, ce qui atteste de la validité de la méthode proposée.

Enfin, dans le dernier chapitre du mémoire, consacré à la modélisation de procédés de ventilation industrielle, les objectifs de la ventilation, ses principes généraux et ses diverses approches de modélisation, sont rappelés, puis trois exemples simples issus de la littérature permettent de juger de l'efficacité de l'approche proposée, en utilisant diverses discrétisations de l'horizon de temps et plusieurs superstructures, dans le cas d'une purge échelon et d'une impulsion de Dirac. Le chapitre se termine par la modélisation du local Mélanie, enceinte expérimentale utilisée au Commissariat à l'Énergie Atomique, présentée précédemment par Laquerbe (1999). L'étude est

effectuée avec deux discrétisations de l'horizon de temps, deux superstructures et deux modélisations, sigmoïde et BV, pour les réacteurs pistons. Les résultats obtenus, notamment avec la modélisation de type sigmoïde, sont nettement améliorés par rapport à ceux de Laquerbe, en ce qui concerne en particulier l'écart quadratique entre la réponse expérimentale et la réponse fournie par le modèle, mais également en regard de la simplicité de la solution identifiée.

Dans cette étude d'identification de modèles d'écoulement où des exemples déjà traités dans la bibliographie ont été repris, les résultats obtenus sont clairement améliorés par rapport à ceux reportés par les divers auteurs, ce qui montre la pertinence de l'approche proposée. Toutefois, il subsiste quelques zones d'ombre, en particulier en ce qui concerne les logiciels de *GAMS*, qui mériteraient d'être plus conviviaux, et dont des options d'affichage et de débogage améliorées pourraient considérablement aider à l'explication de certains échecs de résolution. De plus, la nature orientée-équations du fichier d'entrée de *GAMS*, ne permet pas de traiter à l'heure actuelle des problèmes dont certaines parties sont formulées directement en langage de programmation, Fortran ou C par exemple, ce qui étendrait considérablement les possibilités d'utilisation de *GAMS*. Un autre point qui mériterait d'être éclairci est celui du choix de la superstructure, dont dépend la solution. En effet, bien que les solutions identifiées en utilisant des superstructures différentes, soient toujours très bonnes vis-à-vis de l'écart par rapport à l'expérience, elles varient néanmoins selon la superstructure.

A l'issue de ce travail, on peut suggérer quelques orientations des recherches futures dans le domaine de l'identification des procédés.

En premier lieu, l'utilisation d'une version récente de *GAMS*, implantée dans le code LOGMIP (Vechietti et Grossmann, 1999), qui permet une formulation des problèmes en présence de contraintes définies à partir de la logique booléenne, et pouvant comporter de plus des variables logiques, pourrait simplifier l'expression et le traitement de certains problèmes.

Ensuite, il serait bon d'établir, peut être à partir de bases de données correctement renseignées, une stratégie générale de génération de superstructures. En effet, une superstructure trop simple, peut conduire à une solution assez éloignée d'un optimum local déterminé au sein d'une superstructure plus complexe. Toutefois, on peut penser à juste titre qu'augmenter sans cesse la complexité de la superstructure, ne se traduise pas

par un gain significatif au niveau de la qualité de la solution. Par ailleurs, à cet objectif de génération de superstructures, pourrait se superposer celui du choix des variables à initialiser.

Des procédés autres que les écoulements pourraient être concernés par ce type d'étude, afin de définir des modèles de complexité intermédiaire entre les classiques procédures short-cut du Génie des Procédés et les modèles de simulation beaucoup plus rigoureux. Ceci pourrait intéresser tout le grand domaine du génie des séparations. La modélisation de grands ensembles constitués d'un nombre important d'opérations unitaires de nature différente, ne paraît pas relever actuellement d'études menées dans un futur assez proche.

Enfin, sous la pression d'un environnement de plus en plus contraignant sur les plans économique, de la sécurité des installations et des normes de rejet, l'optimisation au sens large s'oriente de plus en plus fréquemment vers le traitement de problèmes multicritères. Il s'agit là d'une orientation de recherche qu'il faudra envisager, car l'identification d'un modèle devra être effectuée, non seulement vis-à-vis des sorties expérimentales à retrouver, mais également en fonction d'objectifs économiques, environnementaux et de sûreté de fonctionnement.

**RÉFÉRENCES  
BIBLIOGRAPHIQUES**



Abadie J., Carpentier J., *Generalization of the wolfe reduced gradient method to the case of non-linear constraints*. Optimization, R. Fletcher (éd.), Academic Press, New York, 37-47, 1969.

AIEA, *RTD Software analysis – User's Manual*, Computer Manual Series, n°11, AIEA, 1996.

Alliot J.M et Scheix T., *Intelligence artificielle et Informatique théorique*, Editions Cépadues, 1993.

Ameur A.B., *La ventilation d'un local nucléaire – Modélisation, validation expérimentale, conséquences*, Thèse de l'INSTN, 1983.

Armand P., *Analyse physique et modélisation du transport d'aérosols. Intégration dans un programme de calcul aux éléments finis. Validation expérimentale en écoulements laminaires et turbulents*. Thèse de Doctorat, Université Pierre et Marie Curie (Paris VI), France, 1995.

Attaviriyap P., Eua-Arporn B., *Optimal power flow using genetic algorithm*, 12 CEPSI, Pattaya, Thaïland, 2-6 November, 1998.

Back T., Hammel U., Schwefel H. P., *Evolutionary computation : comments on the history and current state*, IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 1, 3-17, 1997.

Bahmed A., Sajet P., Antonini G., Hennig P., Copin C., *Caractérisation de l'hydrodynamique interne d'un four à gaz par analyse de DTS*, 4<sup>ème</sup> congrès du GFPG, Grenoble, Récents Progrès en Génie des Procédés, Etude et conception d'équipements, 109-114, Septembre 1993.

Bazaraa M., Sherali H. D., Shetty C. M., *Nonlinear Programming*, 2<sup>nd</sup> edition, Wiley, Chichester, UK, 1993.

Beasley D., Bull D. R., Martin R. R., *An overview of genetic algorithms : Part 2. reseach topics*. University Computing, 15, 170-181, 1993.

Benders J. F., *Partitioning procedures for solving mixed-variables programming problems*. Numer. Math., 4 :238, 1962.

Bernard L., *Maîtrise des caractéristiques des particules dans la chaîne précipitation-séchage : cas des hydroxyapites*. Thèse de doctorat, INP ENSIGC, 1999.

Berne P., Cassette P., *Control of air transfers in a nuclear laboratory by means of air jets*, Ventilation'88, Londres, Angleterre, 279-287, 20-23 Septembre 1988.

Berne P., *Réponse d'un modèle multi-zone à un échelon décroissant de concentration*, Rapport d'étude IPSN/DPEI/SERAC/LESI/94.04, 1994.

Biegler L. T, Grossmann I. E., *Retrospective on optimization*. Computers and Chemical Engineering, 28, 169-1192, 2004.

Bird R.B., Steward W.E., Lightfoot E.N., *Transport phenomena*, Editions Wiley, 1960.

Blet V., Berne P., Chaussy C., Tola F., Vitart T., *Récents développements en méthodologie du traçage radioactif*, 1<sup>er</sup> Congrès Français Traceurs et méthodes de traçage, Nancy, Récents progrès en Génie des Procédés, Volume 12, n°61, 9-16, 3-4 Novembre 1998.

Blet V., Chaussy C., Narp F, Eckton E., Vitard X., Vincent R., *Application of radioactive tracers to the study of ventilation in industrial premises*, ECCE'1, Florence, Italie, 2287-2290, 4-7 Mai 1997.

Bixby R. E., Fenelon M., GU Z., Rothberg E., Wunderling R., *MIP : theory and practice – closing the gap. System modelling and optimization : methods, theory and applications*. Vol. 174 of IFIP, Kluwer academic publishers, Boston, 19-49, 2000.

Bontoux F., Sérieys J.C., Dessagne J.M., Aubertin G., *Modelling of a painting area by residence time distribution (RTD)*, Ventilation'97, Ottawa, Canada, Volume 1, 97-108, , 14-17 Septembre 1997.

Bonthoux F., Aubertin G., Dessagne J.M., Sérieys J.C., *Ventilation d'une aire industrielle. Modélisation par distribution des temps de séjour (DTS)*, 1<sup>er</sup> Congrès Français Traceurs et méthodes de traçage, Nancy, Récents progrès en Génie des Procédés, Volume 12, n°61, 309-316, 3-4 Novembre 1998.

Boukhtouche S., *Précipitation des phosphates en lit fluidise*, Rapport DEA, INP ENSIACET, 2000.

Brienne J. P., Montastruc L., Martinov M., Nikov I., *Gas maldistribution in a fermenter stirred with multiple turbines*, 6th Eur. Conf. on Mixing, Bologna, Italy, 27-30 Juin 2006.

Brooke A., Kendrick D., Meeraus A., Raman R., *GAMS User's Guide*, GAMS Development Corporation, 1998.

Bussieck M. R., Pruessner A., *Mixed-integer nonlinear programming SIAG/OPT Newsletter*, Views & News, 14, 2003.

Claudel S., *Mise au point d'un algorithme d'aide à la génération automatique de modèles d'écoulement à partir de traçage expérimentaux dans des réacteurs industriels*. Thèse de Doctorat, INPL, 2002.

Collette Y., Siarry P., *Optimisation multiobjectif*, Eyrolles, ISBN : 2-212-11168-1, 2002.

Crommelin R.D., Buringh E., *Validation of a multiple-cell theoretical model for the prediction of air temperatures and pollution concentrations by measurements in an industrial hall*, Ventilation'85, Toronto, Canada, 381-390, 1-3 Octobre 1985.

Dagot C., Baudu M., Lagorce V., *Etude préliminaire de l'hydrodynamique d'une lagune aérée de traitement d'effluents en vue d'optimiser son fonctionnement*, SIMO'96, Toulouse, Récents progrès en Génie des Procédés, 295-300, 22-23 Octobre 1996.

Davis L., *Handbook of Genetic algorithms*, Editions Van Nostrand Rienhold, New-York, 1991.

Dessagne J.M., Lefèvre A., Muller J.P., *Synthesis of results obtained using the tracer gas techniques*, Ventilation'91, Cincinnati, USA, 505-514, 16-20 Septembre 1991.

Dessagne J.M., Olander L., Bonthoux F., Aubertin G., *Use of residence time distribution for evaluation of ventilation systems*, Ventilation'94, Stockholm, Suède, 127-135, 5-9 Septembre 1994.



Dietz A., *Optimization multicritère pour la conception d'ateliers discontinus multiproduits : aspects économique et environnemental*. Thèse de doctorat, INP ENSIACET, Toulouse, France, 2004.

Drecourt S., Laborde J.C., Vendel J. et al., *Simulation of transient phenomena on ventilation networks using the SIMEVENT calculation code*, Ventilation'97, Ottawa, Canada, 2, 465-475, 14-17 Septembre 1997.

Drud A., *A GRG code for large sparse dynamic nonlinear optimization problems*. Mathematical programming, 31, 153-191, 1985.

Duran M. A., Grossmann I.E., *An outer-approximation algorithm for a class of mixed-integer nonlinear programs*. Mathematical Programming, 36, 307-339, 1986.

Eggers E., Dirkzwager A. H., Van der Honing H., *Full scale experiences with phosphate crystallization in a crystalactor*, Water science technology, Vol.23, pp.819-824, 1991a.

Espi E., *Prévision des transferts de contamination en cas d'incendie dans un local ventilé*. Thèse de l'INP ENSIGC, 1998.

Farhat S., Pibouleau L., Domenech S., Czernicki M., *Optimal control of batch distillation via nonlinear programming*, Chemical Engineering and Processing J., Vol. 29, n°1, 33-38, 1991.

Farhat S., Czernicki M., Pibouleau L., Domenech S., *Optimization of multiple fraction batch distillation by nonlinear programming*, AIChE J., Vol. 36, n°9, 1349-1360, 1990.

Fernandez-Sempere J., Font-Montesinos R., Espejo-Alcaraz O., *Residence time distribution for unsteady-state systems*, Chemical Engineering Science, Volume 50, n°2, 223-230, 1995.

Feustel H.E., *COMIS – An international multizone air flow and contaminant transport model*, Rapport LBNL-42182, Lawrence Berkeley National Laboratory, Août 1998.

Fielhouse, M., *The pooling problem, in optimization, in industry : mathematical programming and modeling techniques in practice*, T. Ciriani and R.C. Leachman editors, John Wiley and Sons, Chichester, UK, 1993.

Fletcher R., Lyffer S., *Solving mixed-integer nonlinear programs by outer approximation*. Math. Program, 66, 327-349, 1994.

Floquet P., Pibouleau L., Domenech S., *Identification de modèles par une méthode d'optimisation en variables mixtes*, Entropie, Vol.151, 28-36, 1989.

Floudas C. A., *Non-linear and mixed-integer optimization, Fundamentals and application*, Oxford University Press, 1995.

Floudas C. A., Akrotirianakis I. G., Caratzoulas S., Meyer C. A., Kallrath J., *Global optimization in the 21<sup>st</sup> century : advances and challenges*, Computers and Chemical Engineering, 29, 1185-1202, 2005.

Fontaine J.R., Braconnier R., Rapp R., Séryes J.C., *EOL : A computational fluid dynamics software designed to solve air quality problems*, Ventilation'91, Cincinnati, USA, 449-459, 16-20 Septembre 1991.

Fontaine J.R., Biolley F., Rapp R., Séryes J.C., Cunin J.C., *Analysis of a three-dimensional ventilation flow : Experimental validation on a water scale model of numerical simulation*, Numerical Heat Transfer, Part A, Volume 26, 431-451, 1994.

Fourer R., Gay D. M., Kernighan B. W., *AMPL : A modeling language for mathematical programming*, Belmont, CA: Duxbury Press, 1992.

GAMS, *GAMS The Solver Manuals*, GAMS Development Corporation, 2004.

Gas Processor Suppliers Association, Engineering data book, 1972.

Garcia v., Cabassud m., Le Lann m. V., Pibouleau l., Casamatta g., *Constrained optimisation for fine chemical productions in batch reactors*, Chemical Engineering Journal, Vol. 59, n° 3, 229-242, 1995.

Geoffrion A. M., *Generalized benders decomposition*, Journal of optimization theory and applications, 10, 237-260, 1972.

Gill P.E., Murray W., Wright M. H., *Practical Optimization*, Academic Press, New York, 1981.

Goldberg D. E., *Genetic algorithms in search, Optimization and machine learning*, Addison-Wesley Publishing Company Inc., MA, 1989.

Goldberg D. E., *Les algorithmes génétiques*, éditions Addison Wesley, 1994.

Gomory R. E., *Outline of an algorithm for integer solutions to linear programs. Bulletin of American mathematics society*, 64, 275-299, 1958.

Grebenc J., Goodfellow H. D., *Use of ventilation of achieve clean plants*, Chemical Engineering Progress ,35-41, 1995.

Greenberg H. J., *Analyting the pooling problem*, ORSA Journal on Computing 7, 205-217,1995.

Grossmann I. E., *Review of linear mixed-integer and disjunctive programming techniques*, Optimization and engineering, 3, 227-252, 2002.

Grossmann I. E., *Review of Nonlinear Mixed-Integer Disjunctive Programming Techniques*, Rev. April 2002.

Grossmann I. E., M. A. Duran, *A mixed-Integer Nonlinear Programming Algorithm for Process Systems Synthesis*, AIChE Journal, 32, 592-605, 1986.

Gupta O. K., Ravindram V., *Branch and bound experiments in convex nonlinear integer programming*. Management Science, 31, 1533-1546, 1985.

Gupta O. K., *Branch and Bound experiments in nonlinear integer programming*, Ph.D. Thesis, School of industrial engineering, Purdue University, West Lafayette, IN, 1980.

Gupta O. K. and Ravindram, *Nonlinear mixed integer programming and discrete optimization*, in R.W. Wayne and K. M. Ragsdell, eds, Progress in Engineering Optimization ASME, New York, 27, 1981.

Hao J. K., Galinier P., Habib M., *Métaheuristiques pour l'optimisation combinatoire et l'affectation sous contrainte*, Revue d'Intelligence Artificielle, 11-48, 1999.

Himmelblau D. M, Edgar T. F, *Optimization of Chemical Processes*, McGraw-hill international editions-Chemical Engineering Series, 1986.

Himmelblau D. M., Edgar T. F., and Lasdon L. S., *Optimization of chemical process*, McGraw Hill, Boston, 2001.

Hocine S., Elgue S., Montastruc L., Azzaro-Pantel C., Cabassud M., Pibouleau L., Domenech S., *A hybrid optimization method (GA/SQP) for methyl acetate production process by reactive batch distillation*, ICheaP-6, Pisa, Italy, 8-11 June 2003.

Hofmann H., *Future trends in chemical engineering modelling*, CEF'87, Giardini Naxos, Italy, Chemical Engineering Fundamentals, 579-584, 1987.

Holland J., *Adaptation in natural and artificial systems*, MIT Press, Cambridge, Massachussets, 1975.

Hooper F.C., Hooper J.T., *The relationship between observed pollutant concentrations and building ventilation system design*, Ventilation'85, Toronto, Canada, , 309-322, 1-3 Octobre 1985.

Johnson E. L., Nemhauser G. L., Savelsbergh M. W. P., *Progress in linear programming-based algorithms for integer programming : an exposition*. Journal on computing, 12, 2-22, 2000.

Kallrath, J. and Wilson, J. M., *Business optimisation using mathematical programming*, Macmillan, UK, 1997.

Kirkpatrick S., Gelatt Jr. C. D., Vecchi M. P., *Optimization by simulated annealing*, IBM Reseach Report RC9355, 1982.

Kocis G. R., Grossmann I. E., *Relaxation strategy for the structural optimisation process flowsheets*, Industrial Engineering and Chemistry Reseach, 26, 1869-1880, 1987.

Kocis G. R., Grossmann I. E., *Global optimisation of nonconvex mixzd-integer non linear programming (MINLP) problems in process synthesis*, Industrial engineering and chemistry reseach, 27, 1407-1421, 1988.

Kocis G. R., Grossmann I. E., *Computational experience with DICOPT solving MINLP problems in process systems engineering*. Computers and chemical engineering, 13, 307-315, 1989.

Kondjoyan A., Mirade P.S., Daudin J.D., *Limites des codes de calcul en mécanique des fluides pour l'aérodynamique des installations alimentaires et la détermination des coefficients de transferts*, GFGP'97, Paris, Récents Progrès en Génie des Procédés, Phénomènes de transferts, 11, n°53, 151-156, Septembre 1997.

Koza J.R., *Genetic Programming*, MIT Press, 1993.

Laquerbe C., *Modélisation des écoulements dans un local ventilé par une approche systémique*, Thèse de doctorat, INP ENSIGC, 1999.

Laquerbe C., Laborde J. C., Soares S., Floquet P., Pibouleau L., Domenech S., *Synthesis of RTD models via stochastic procedures : simulated annealing and genetic algorithm*, Computers and Chemical Engineering, Vol.25, 1169-1183, 2001.

Lauder B.E., Spalding D.B., *The numerical computation of turbulent flow*, Comp. Methods Appl. Mech. Eng., Volume 3, 269, 1974.

Leclerc J.P., Detrez C., Bernard A., Schweich D., *DTS : Un logiciel d'aide à l'élaboration de modèles d'écoulement dans les réacteurs*, Revue de l'IFP, Volume 50, n°5, 641-656, Septembre/Octobre 1995.

Lee S. and I.E. Grossmann, *Global optimization of nonlinear generalized disjunctive programming with bilinear equality constraints: applications to process networks*. Computers and Chemical Engineering., 1557-1575, 2003.

Letchford A. N., Lodi A., *An augment –and-branch-and-cut framework for mixed 0-1 programming*, Lecture notes in computer science, Combinatorial optimization, 2570, 119-139, 2003.

Leyffer S., *User manual for MINLP\_BB*, University of Dundee, Numerical Analysis Report NA/XXX, 1999.

Levenspiel O., *Chemical reaction engineering*, 2<sup>ème</sup> Edition, Wiley Int., 1972.

- Li Y., Fuchs L., Holmberg S., *Methods for predicting air change efficiency*, Roomvent'92, Aalborg, Danemark, Volume 1, p. 257-271, 2-4 Septembre 1992.
- Mangasarian O. L., *Nonlinear programming*. McGraw Hill, New York, 1969.
- Mersmann A., *Crystallization technology handbook*, A. Mersmann (Ed.), Marcel Dekker, New York, 1994.
- Metropolis N., Rosenbluth A., Rosenbluth R., Teller A., *Equation of state calculations by fast computing machines*. Journal of Chemical Physics, 21, 1087-1092, 1953.
- Montastruc L., *Modélisation et optimisation d'un réacteur en lit fluidisé de déphosphatation d'effluents aqueux*, Thèse de doctorat, INP ENSIACET, 2003.
- Montastruc L., Azzaro-Pantel C., Pibouleau L. and Domenech S., *A Systemic Approach for Pellet Reactor Modeling: Application to Water Treatment*, AIChE Journal, 50, 10, 2514, 2004.
- Morse G. K., Brett S.W., Guy J. A., and Lester J. N., *Review : Phosphorus removal and recovery technologies*, Science Total Environ., 212, 69, 1998.
- Najim K., Poznyak A.S., Ikonen E., *Calculation of residence time for nonlinear systems*, International Journal of Systems Science, Volume 27, 7, 661-667, 1996.
- Niu J., Van Der Kooij J., *Grid optimization of k- $\epsilon$  turbulence model simulation of natural convection in rooms*, Roomvent'92, 3<sup>rd</sup> International Conference on air distribution in rooms, Aalborg, Danemark, 1, p. 209-223, 2-4 Septembre 1992.
- Ogunnaike B., Ray W. H., *Process dynamics, modeling and control*, Oxford university press, 1994.
- Olander L., Dessagne J.M., Bonthoux F., Leclerc J.P., *A study of general ventilation and exhaust ventilation in industrial premises using residence time theory*, Environmental Progress, Volume 14, 3, 159-163, 1995.
- Padberg M., Rinaldi G., *A branch-and-cut algorithm for the resolution of large scale symmetric travelling salesman problems*, SIAM review, 33, 60-84, 1991.

Pantelides C.C., Barton P.I., *Equation-oriented dynamic simulation Current status and future perspectives*, Computers and Chemical Engineering, ESCAPE 2, Toulouse, Volume 17S, 263-285, Octobre 1993.

Perdriau P., *Manuel utilisateur SIMEVENT*, Rapport SIMEVENT 000-MU-G, Euriware, France, 1994.

Pibouleau L., Floquet P., Domenech S., Azzaro-Pantel A., *A survey of optimization tools through ESCAPE symposia*, Computers and chemical engineering supplement, S495-S498, 1999.

Pibouleau L., Domenech S., Davin A., Azzaro-Pantel C., *Expérimentations numériques sur les variantes et paramètres de la méthode du recuit simulé*, Chemical Engineering Journal, 105, 117-130, 2005.

Poloni C., *Hybridisation of a multi objective genetic algorithm, neural network, and classical optimizers for complex design problems*, Symposium on design optimisation, muenchen-Unterhachning 17-18 May, 1999.

Ponsich A., Azzaro-Pantel C., Pibouleau L., Domenech S., *About the relevance of mathematical programming and stochastic optimisation methods : application to optimal batch plant design problems*, ESCAPE15, Barcelona, 58-72, 31mai-1<sup>er</sup> juin 2005.

Robertson T, Moore P, Hawkins R.J., *Computational flow models as aid to solution of fluid problem in the steel industry*, Ironmaking and Steelmaking, Volume 13, 4, 195-203, 1986.

Rosen J., *The gradient projection method for nonlinear programming : I. Linear constraints*, Journal of society for industrial and applied mathematics, 8, 181-217, 1960.

Rota R, Canu P., Carra S., Nano G., *Ventilated enclosures with obstacles : experiments and CFD simulations*, Ventilation'94, Stockholm, Suède, 181-188, 5-9 Septembre 1994.

Roulet C.A., Cretton P., *Field comparison of age of air measurements techniques*, Roomvent'92, Aalborg, Danemark, Volume 3, 213-229, 2-4 Septembre 1992.

Sandberg M., Sjöberg M., *The use of moments for assessing air quality in ventilated rooms*, Building and environment, 18, 181-197, 1982.

Schaelin A., Dorer V., Van der Mass J., Moser A., *Improvement of a multizone model predictions by detailed flow path values from CFD calculations*, ASHRAE Transactions : Symposia, 709-720, 1993.

Schittkowski K., *NLPQL: A fortran subroutine solving constrained non-linear programming problems*, edited by Clyde L. Monma, Annals of operations research, Vol.5, 485-500, 1986.

Seckler M. M., Bruisma O. S. L., Van Rosmalem G. M., *Calcium phosphate precipitation in a fluidized bed in relation to process conditions: a black box approach*, Water resources, Vol.30, 7, 1677-1685, 1996.

Shah. N, *Single and Multisite Planning and Scheduling; Current Status and Future and Challenges*, AIChE Symp Series, 320, 94: 75-90, 1999.

Shao L., Riffat S.B., *CFD for improvement of k-factor accuracy in HVAC systems*, Ventilation'94, Stockholm, Suède, 167-172, 5-9 Septembre 1994.

Skalicky T., Morgenstern G., Auge A., Hanel B., Rosler M., *Comparative studies of selected discretization methods for the numerical solution of room air flow problems*, Roomvent'92, Aalborg, Danemark, 2-4 Septembre 1992, 1, 227-240, 1992.

Skäret E., *Ventilation by displacement*, Ventilation'85, , Toronto, Canada, 827-841, 1-3 Octobre 1985.

Sohn M. D., Small M. J., *Parameter estimation of unknown air exchange rates and effective mixing volumes from tracer gas measurements for complex multi-zone indoor air models*, Building and Environment, Volume 34, 293-303, 1999.

Tabkhi. F, Azzaro-Pantel C., Pibouleau L., Domenech S., Davin A., *Optimisation de réseaux de transport de gaz naturel*, SIMO'06, Toulouse, France, 11-12 Octobre 2006.

Thereska J., *L'application des radiotraceurs dans les unités industrielles – Bilan et perspectives*, 1<sup>er</sup> Congrès Français Traceurs et méthodes de traçage, Nancy, Récents progrès en génie des procédés, Volume 12, 61, 1-8, 3-4 Novembre 1998.



- Triki E., Collette Y., Siarry P., *A theoretical study on the behavior of simulated annealing leading to a new cooling schedule*, European Journal of Operational Research, 166, 77-92, 2005.
- Van Dijk J. C., Braaksensiek H., *Phosphate removal by cristallization in a fluidized bed*, Water science and technology, Vol.17,133-142, 1984.
- Vavasseur C., Muller J.P., Aubertin G., Lefèvre A., *Application of tracer gaz methods to the measure of ventilation parameters in nuclear power plants and various industrial sectors*, Ventilation'85, Toronto, Canada, 785-795, 1-3 Octobre 1985.
- Villermaux J., *Génie de la réaction chimique – Conception et fonctionnement des réacteurs*, 2<sup>ième</sup> Edition, TecDoc Lavoisier, 1993.
- Viswanathan J., Grossmann I. E., *A combined penalty function and outer-approximation method for MINLP optimisation*, Computers and chemical Engineering, 14, 769-782, 1990.
- Walter E., Pronzato L., *Identification of parametric models from experimental data*, Ed. Paris, 1997.
- Wang Q. J., *The genetic algorithm and its application to calibrating conceptual rainfall-runoff models*, Water resources reseach, Vol.27, 9, 2467-2471, 1991.
- Whitley D. D., *A genetic algorithm tutorials. Technical report CS-93-103*, Colorado State University, Department of Computation Science, 1993.
- Williams P., *Model Building in mathematical programming*, Wiley, Chichester, 1993.
- Yamamoto T., Ensor D.S., Sparks L.E., *Evaluation of ventilation performance for indoor space*, Indoor Air'93, Helsinki, Finlande, Volume 5, p. 369-374, 4-8 Juillet 1993.
- Yuan X., Zhang S., Pibouleau L., Domenech S., *Une méthode d'optimisation non-linéaire en variables mixtes pour la conception de procédés*. Recherche Opérationnelle/Opérations Reseach, 22, 331-346, 1988.

## **TITRE : Identification de modèles de procédés par programmation mixte déterministe**

### **RESUME**

La recherche de modèles de procédés constitue le thème développé dans ce mémoire. Partant d'une superstructure composée de cellules élémentaires telles que des réacteurs continus, des réacteurs piston, des zones mortes, des by-pass et des recyclages, l'objectif est de déterminer le meilleur arrangement de ces procédés élémentaires pour obtenir une sortie modélisée aussi proche que possible d'une sortie expérimentale. Le problème d'optimisation non linéaire en variables mixtes qui en découle est résolu à l'aide de l'environnement GAMS, plus particulièrement avec les solvers DICOPT++ et SBB.

Dans un premier temps l'étude concerne les procédés à fonctionnement en régime permanent, et l'objectif est de déterminer une concentration obtenue par le modèle aussi voisine que possible de la concentration observée expérimentalement. Un bassin de décantation et un réacteur en lit fluidisé pour la déphosphation d'effluents aqueux illustrent la démarche.

La seconde partie est relative à l'étude de procédés fonctionnant en régime dynamique. Dans ce cas il s'agit de retrouver une courbe de distribution de temps de séjour analogue à une courbe obtenue expérimentalement. Un local ventilé de l'industrie nucléaire est modélisé suivant cette approche.

Dans les deux cas, plusieurs fonctions objectif et plusieurs types de superstructures sont étudiés.

**MOTS-CLES :** Optimisation mixte non linéaire (MINLP), GAMS, Identification de modèles, Bassin de décantation, Réacteur en lit fluidisé, Local ventilé.

## **TITLE: Process model identification by deterministic mixed-integer programming**

### **ABSTRACT**

The search for process models is the goal of this thesis. Starting from a superstructure composed of elementary cells like continuous stirred tank reactors, plug flow reactors, dead-zones, recycles and by-passes, the study aims at determining the best arrangement of these elementary processes in order to obtain a modelled output as close as possible of an experimental response. The resulting mixed-integer nonlinear optimisation problem is solved by means of the GAMS environment, particularly the solvers DICOPT++ and SBB.

In a first part, the study is related to steady-state processes, and the goal is to obtain a model giving an output concentration as close as possible of a given experimental concentration. A settling tank and a pellet reactor for phosphorus recovery from wastewater by precipitation of calcium phosphate illustrate the approach.

In the second part, where dynamic processes are studied, the objective is to obtain a model giving a residence time distribution curve fitting as well as possible an experimental RDT curve. A ventilated indoor space used in the nuclear field is modelled according to this strategy.

In both cases, several objective functions and superstructures are studied;

**KEYWORDS:** Mixed-Integer NonLinear Programming (MINLP), GAMS, Model identification, Settling tank, Fluidized bed reactor, Ventilated room.