



Mémoire de Magister

Spécialité : **Automatique**

Option : **Automatique des Systèmes Industriels**

Présenté par

HADDOUCHE Rezki

Ingénieur en Automatique de l'UMMTO

Thème

SIMULATION ET CONTRÔLE D'UNE COLONNE D'ABSORPTION

Soutenu publiquement le 01 juillet 2006 devant le jury composé des membres :

Président :	S.M BOUCHERIT	Professeur, ENP
Rapporteurs :	R. ILLOUL	Chargé de cours, ENP
	A. SELATNIA	Maître de conférences, ENP
Examineurs :	M. TADJINE	Maître de conférences, ENP
	H. CHEKIREB	Maître de conférences, ENP
	N. BALI	Chargé de cours, USTHB

محاكات و تحكم أسطوانة امتصاص

ملخص

أسطوانة الإمتصاص تعتبر نظاما لاخطيا معقدا. تمثيلها النموذجي بإستعمال ميزانية المادة تمكن من الحصول على معادلة ذات مشتقات جزئية. هذا النموذج ذات وسائط موزعة قليل الإستعمال في هندسة خوارزميات التحكم. الجزء الأول من هذا العمل يظهر التمثيل النموذجي لأسطوانة الإمتصاص وطريقة المحاكاة التي تتطلب تجزئة المتغير الفضائي. هذه الطريقة تؤدي إلى محاكاة سريعة و مستقرة للنظام. إذن يمكن إستعماله بسهولة في خوارزميات التحكم اللحظي. الجزء الثاني من المذكرة يظهر إستراتيجيات التحكم المطبقة على الأسطوانة الإمتصاص. التحكم الكلاسيكي PI مكننا من تسيير تركيز CO_2 في مخرج الأسطوانة وكذلك التحكم العصبوني بواسطة التكافؤ البقيني مكننا من تجريب مدى منانة التحكم اللاخطي. بين تحليل جودة هذه الإستراتيجيات أن إستعمال النموذج ذات الوسائط الموزعة يساعد على أخذ بعين الإعتبار بفعالية لاخطية النظام الحركي.

الكلمات المفتاحية : أسطوانة الإمتصاص، معادلات ذات المشتقات الجزئية، نموذج ذات وسائط موزعة، العناصر المنتهية، التحكم PI، التحكم العصبوني، خوارزمية "الفنبرق مارك وارت".

SIMULATION AND CONTROL OF AN ABSORPTION COLUMN

Abstract

The absorption column is a strongly nonlinear system; its modeling using mass balance equations leads to partial differential equation. This distributed parameters model is not used for control laws synthesis in general.

The first part of this work presents the modeling of the absorption column and a simulation method which is of the finite element type. This simple approach allows a fast and stable simulation process. It is well suited for on-line control application.

The second part of the memory presents different control algorithms applied to the absorption column. Classic regulation using PI regulator allows us to regulate the CO_2 concentration at the output of the column and the neuronal control by certain equivalence principle enables us to test the performances of nonlinear control. The performances analysis of these approaches shows that the use of a distributed parameters model makes it possible to take effectively in account the nonlinearities of the kinetic model.

Key Words absorption column, partial differential equations, distributed parameters system, finite elements, PI regulation, neural network control, Levenberg-Marcquard algorithm,

SIMULATION ET CONTROLE D'UNE COLONNE D'ABSORPTION

Résumé

La colonne d'absorption est un système fortement non linéaire ; Sa modélisation à l'aide d'un bilan de matière permet d'obtenir une équation aux dérivées partielles. Ce modèle à paramètres répartis est toute fois peu utilisé pour la conception d'algorithme de commande.

La première partie du travail présente la modélisation de la colonne d'absorption et une méthode de simulation basée sur les éléments finis. Cette approche simple permet une simulation rapide et stable du procédé. Elle peut donc être aisément utilisée dans un algorithme de commande en temps réel.

La seconde partie du mémoire présente les stratégies de commande appliquées à la colonne d'absorption. La commande classique PI permet de régler la concentration de CO_2 en sortie de la colonne et la commande neuronale par équivalence certaine nous permet de tester les performances d'une commande non linéaire. L'analyse des performances de ces approches montre que l'utilisation d'un modèle à paramètres répartis permet de tenir compte efficacement des non linéarités du modèle cinétique.

Mots Clés colonne d'absorption, équations aux dérivées partielles, modèle à paramètres répartis, éléments finis, régulation PI, commande par réseaux de neurones, algorithme de Levenberg-Marquardt.

Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire a été effectué au Laboratoire de Commande des processus de l'Ecole Nationale Polytechnique.

Je tiens à remercier Monsieur R.ILLOUL, Chargé de cours à l'ENP et Monsieur A. SELATNIA, Maître de Conférence à l'ENP, pour la proposition du sujet de ce mémoire et pour leurs conseils tout au long de ce travail.

Je remercie les membres de jury, qui m'ont fait l'honneur de participer à l'examination de ce travail.

Je remercie tout les membres de ma famille.

Enfin, je remercie tous mes amis(es).

SOMMAIRE

Sommaire

Introduction générale	1
------------------------------------	---

Chapitre 1 : Modélisation de la colonne d'absorption

1.1 Introduction.....	8
1.2 Présentation de la colonne d'absorption.....	8
1.3 Principe de fonctionnement de la colonne d'absorption.....	9
1.4 Modélisation.....	10
1.4.1 Bilan de matière en phase liquide.....	11
1.4.2 Expression du flux de matière vers la phase liquide.....	13
1.4.3 La représentation mathématique de la colonne d'absorption.....	16
1.4.4 Les conditions aux limites.....	19
1.5 Le modèle de la colonne d'absorption.....	19
1.6 Tableau des paramètres.....	20
1.1 Conclusion.....	20

Chapitre 2 : Simulation de la colonne d'absorption

2.1 Introduction.....	21
2.2 Résolution analytique.....	22
2.3 Résolution numérique par discrétisation spatiale.....	22
2.3.1 Description de la méthode de discrétisation spatiale.....	23
2.3.2 Quadrature et approximation.....	24
2.3.3 Interpolation.....	26
2.3.4 Assemblage des équations.....	26
2.3.5 Adaptation de l'équation de la colonne d'absorption.....	27
2.4 Résultats.....	29
2.1 Conclusion.....	37

Chapitre 3 : Réseaux de neurones - Préliminaires

3.1 Introduction.....	38
3.2 Réseaux de neurones standard.....	38
3.3 Apprentissage des réseaux de neurones.....	39
3.3.1 Rétropropagation du gradient.....	40
3.3.1.1 Résumé de l'algorithme de rétropropagation.....	42
3.3.1.2 Considérations pratiques.....	43
3.3.1.3 Accélération de l'algorithme de rétropropagation.....	43
3.3.2 Méthode d'optimisation du seconde ordre.....	44
3.3.2.1 Algorithme de Newton.....	45
3.3.2.2 Méthode de Gauss-Newton.....	45
3.3.2.3 Algorithme de Lavenberg-Marquardt.....	45
3.3.2.4 Résumé de l'agorithme de Lavenberg-Marquardt.....	46
3.4 Application à la modélisation des processus.....	47
3.4.1 Modélisation de processus.....	47
3.4.2 Les étapes de modélisation neuronale.....	48
3.4.2.1 Le signal d'excitation.....	48
3.4.2.2 Choix de la période d'échantillonnage.....	48
3.4.2.3 Ajustement du réseau de neurones.....	48
3.4.2.3.1 Réglage stricturel.....	48
3.4.2.3.1 Réglage paramétrique.....	49
3.4.2.4 Validation du modèle.....	49
3.4.2.4.1 Test de généralisation.....	49
3.4.2.4.2 Test de corrélation.....	50
3.4.3 Modélisation de la colonne d'absorption.....	50
3.4.3.1 Résultats de modédilisation de la colonne d'absorption.....	53
3.4.3.2 Test de validation.....	54
3.1 Conclusion	56

Chapitre 4 : Contrôle de la colonne d'absorption

4.1 Introduction.....	57
4.2 Commande PI de la colonne d'absorption.....	57
4.2.1 Description de la commande PID.....	58
4.2.2 Commande PI de la colonne d'absorption.....	58
4.2.3 Résultats de simulation.....	59
4.3 Commande neuronale par équivalence certaine.....	64
4.3.1 Description de la commande par équivalence certaine.....	65
4.3.2 Application à la commande de la colonne d'absorption.....	67
4.3.3 Résultats de simulations.....	67
4.4 Commande prédictive de la colonne d'absorption.....	72
4.4.1 Principe de la commande prédictive neuronale.....	73
4.4.2 Commande prédictive neuronale de la colonne d'absorption.....	74
4.4.3 Résultats de simulation.....	75
4.5 Etude comparative.....	79
4.6 Conclusion.....	80
Conclusion générale.....	81
Références bibliographiques.....	83

NOMENCLATURE

Nomenclature

A	CO ₂
B	MEA
a	Aire interfaciale (m ²)
C _{Ag}	Concentration du composé A dans la phase gazeuse à la sortie de la colonne (mol/m ³)
C _{Ag d}	concentration du CO ₂ désirée en sortie de la colonne d'absorption
C _{Age}	Concentration du composé A dans la phase gazeuse à l'entrée de la colonne (mol/m ³)
C _{Agi}	Concentration du composé A à l'interface côté gaz (mol/m ³)
C _{AL}	Concentration du composé A dans la phase liquide (mol/m ³)
C _{ALi}	Concentration du composé A à l'interface côté liquide (mol/m ³)
C _{BL}	Concentration du composé B dans la phase liquide (mol/m ³)
C _{Be}	Concentration du composé B dans la phase liquide à l'entrée de la colonne (mol/m ³)
D _{AL}	Coefficient de diffusion du composé A dans la phase liquide (m ² /s)
D _{BL}	Coefficient de diffusion du composé B dans la phase liquide (m ² /s)
D _g	Coefficient de dispersion axiale coté gaz (m/s)
dz	Hauteur d'une tranche de la colonne d'absorption
f	Fonction d'activation du neurone
G,L	Débit volumique de la phase gazeuse et de la phase liquide (m ³ /s)
Ha	Nombre adimensionnel appelé nombre de Hatta
k	Constante de vitesse de réaction (m ³ /mol.s)
K _i	Gain de l'action intégrale
K _p	Gain de l'action proportionnelle
K _v	Gain de l'action dérivée
L	Hauteur de la colonne à garnissage (m)
m	Pente de la droite d'équilibre entre phases
N _A	Flux de matière du composé A transféré vers la phase liquide (mol/m ² .s)
r _A	Vitesse de réaction (mol/m ³ .s)
u _g	La vitesse moyenne d'écoulement du flux gazeux (m/s)
u _l	La vitesse moyenne d'écoulement du flux liquide (m/s) (la commande)
T	Température (K)
Te	Période d'échantillonnage
w	Poids du réseau de neurones
ŷ	Sortie du réseau de neurones
z ⁻¹	Retard de la période d'échantillonnage
ε	Porosité de la colonne d'absorption
ε _L	Rétention liquide
ε _g	Rétention gazeuse
v _A , v _B , v _p	Coefficients stoechiométriques
Φ	Flux d'absorption

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Introduction générale

Les progrès de l'informatique et de la microélectronique ont révolutionné l'industrie. La disponibilité de nouveaux capteurs performants, la collecte de données en ligne et la centralisation de cette information sur de véritables autoroutes de l'information dans les usines sont le reflet des investissements importants faits dans le domaine des technologies de l'information. Ces développements technologiques ouvrent maintenant la porte à toute une gamme d'outils pour l'optimisation du fonctionnement des procédés. Cette optimisation étant rendue essentielle dans un contexte de marché global où les marges de rentabilité des usines sont réduites à leur limite. Le développement de stratégies de commande avancée s'avère aujourd'hui un outil clé pour atteindre cet objectif.

Traditionnellement la commande de procédé est principalement basée sur une vue entrée-sortie du procédé. Dans le cas d'un réacteur tubulaire, différentes boucles de contrôle sont mises en place pour commander chacune des variables du procédé autour d'un point de fonctionnement. Ainsi, l'ajustement des régulateurs est souvent réalisé à l'aide de modèles linéaires tels les fonctions de transfert avec retard. Cette approche est justifiée et efficace lorsque le procédé reste très près de son point de fonctionnement en tout temps. Par contre, les contraintes de productivité croissantes remettent en question l'utilisation de modèles valides sur une plage de fonctionnement restreinte. En effet, l'usine moderne doit maintenant pouvoir composer avec des stocks limités et des exigences de qualité accrue. Il en résulte une plus grande variabilité des conditions d'opération du procédé qui doit pouvoir s'ajuster rapidement à des débits de production variés et des spécifications variables. Les régulateurs traditionnels basés sur des modèles linéaires peuvent être inefficaces dans de telles circonstances car pour chaque changement important des conditions opératoires, ils doivent être ajustés de nouveau pour un fonctionnement optimal. Dans le cas contraire, on peut obtenir une variabilité accrue des produits, des oscillations entre les boucles de contrôle et parfois même l'instabilité du système. L'utilisation de modèles plus performants est une solution envisageable grâce au progrès de l'informatique.

La modélisation des colonnes d'absorption n'est pas un sujet nouveau. Les modèles de ce type de réacteur sont bien connus et largement couverts dans les ouvrages de génie chimique. Son utilisation à des fins de commande est par contre beaucoup moins fréquente compte tenu de la complexité de ce type de modèle. En effet, le modèle d'une colonne d'absorption en transitoire est composé d'équations aux dérivées partielles qui sont généralement non linéaires. Ce type de modèle est appelé modèle à paramètres répartis car les variables du système ne sont plus seulement fonction du temps mais aussi de l'espace. Ces équations permettent donc de décrire le profil du réacteur dans le temps et aussi dans l'espace. Outre la complexité du traitement mathématique direct des équations aux dérivées partielles, la commande d'une colonne d'absorption est en soi difficile à cause de la nature même du système:

1. *Les colonnes d'absorption sont des systèmes avec un grand retard.* Le retard d'un tel réacteur correspond plus ou moins à son temps de résidence moyen. La commande des systèmes à retard est complexe car l'effet de l'entrée sur la sortie apparaît avec un délai. Il est donc impossible de réagir trop rapidement ou trop fortement à une déviation non désirée de la sortie sans risquer de rendre le système instable. Quel que soit le modèle ou le régulateur utilisé, le délai limitera toujours la performance du système.

2. *Les colonnes d'absorption sont généralement des systèmes non-linéaires.* Lorsque la cinétique de réaction est non linéaire, le modèle du réacteur est non linéaire de facto. De plus, l'effet de la température, et des divers autres facteurs qui influencent la cinétique, sont aussi généralement fortement non linéaires. Cette caractéristique des réacteurs limite l'utilisation de régulateurs linéaires qui ne sont calibrés que pour un point de fonctionnement précis. En effet, il est possible de considérer que le comportement du réacteur est linéaire dans une certaine zone autour du point de fonctionnement. Par contre, ce modèle n'est plus valide lorsque le procédé change de point d'opération.

Le modèle non linéaire à paramètres répartis d'une colonne d'absorption a l'avantage d'être valide pour tous les points d'opérations de fonctionnement dans la mesure où l'ensemble des variables opératoires sont incluses dans le modèle. De

plus, ce type de modèle permet de tenir compte directement de l'information disponible sur le procédé. En effet, les paramètres hydrodynamiques et la cinétique de réaction apparaissent explicitement dans le modèle. Le modèle est donc non linéaire et le délai est maintenant implicite dans la formulation des équations aux dérivées partielles.

Travaux antérieurs

Différentes approches ont été considérées pour commander des systèmes à paramètres distribués. Ray (1981) propose de scinder ces approches en deux grandes catégories: les stratégies de pré-approximation et les stratégies de post-approximation [Ray 81]. Les approches par pré-approximation utilisent une approximation préalable des équations aux dérivées partielles (EDPs) en équations différentielles ordinaires (EDO). L'algorithme de commande est donc conçu en utilisant cette approximation. Dans les stratégies de post-approximation la conception de la loi de commande est faite directement à partir du modèle à paramètres répartis. Une approximation sera utilisée au besoin lors de la mise en oeuvre du contrôleur.

Les stratégies de pré-approximation se distinguent par le type d'approximation utilisé. En effet, des techniques analytiques ou numériques doivent être utilisées pour permettre la transformation des EDPs en un nombre suffisamment restreint d'EDOs pour que l'approximation du modèle permette la conception de loi de commande. Parmi les techniques numériques, notons la technique de collocation orthogonale [Vill 78] qui permet d'obtenir un nombre restreint d'équations. Le choix d'une technique analytique dépend fortement de la nature des EDPs. Si les équations ne comportent pas de dérivée partielle du deuxième ordre, le système est dit hyperbolique. Dans le cas des systèmes de type convection-diffusion-réaction, les équations sont dites de type parabolique car elles comportent des dérivées partielles du deuxième ordre.

Dans le cas de systèmes hyperboliques, le système évolue selon un champ vectoriel caractéristique. Il est alors possible d'utiliser un changement de variable pour obtenir un système d'EDOs de dimension finie [Farl 93]. Cette technique a été utilisée entre autre par Hanezye et Palazoglu (1995) ainsi que par Shang et al (2000) qui proposent des lois de commande à mode de glissement. Par contre, cette technique ne peut être appliquée aux équations paraboliques.

Dans le cas des systèmes paraboliques, L'utilisation des modes principaux, i.e. des valeurs propres les plus faibles, peut permettre de représenter adéquatement le système. Les valeurs propres d'un système d'EDPs sont obtenues en résolvant le problème aux valeurs propres associées. Il est ainsi possible d'obtenir une décomposition sous la forme d'un système d'EDO de dimension finie. Cette approche a été utilisée par Curtain (1982) qui propose une stratégie de retour d'état pour le contrôle par la condition frontière. Drakunov et Barbieri (1997a ; 1997b) proposent de combiner l'approche modale au concept de variété d'équilibre auquel ils contraignent le système par une stratégie à mode de glissement. Finalement, Chakravarti et Ray (1997) critiquent l'utilisation des formes modales qui sont parfois impossibles à calculer et proposent l'utilisation des fonctions singulières comme approximation du système. Christofides et Daoutidis (1998a;1998b) ont formalisé l'approche de décomposition modale en utilisant le concept de système à deux échelles de temps. Dochain (1994) a proposé l'approche par différence globale qui peut être utilisée en pré-approximation ou en post-approximation. Si l'action de commande est présente dans l'EDP, un régulateur peut être conçu directement par linéarisation exacte. La loi de commande inclut alors un terme de dérivée partielle qui sera approximé par la suite à l'aide d'une différence globale. Si l'action de commande est à la frontière, les différences globales sont utilisées au préalable pour introduire l'action de commande dans les bilans.

Les techniques de post-approximation utilisent généralement un contenu mathématique important qui est dû à la définition des EDPs dans un espace de Hilbert [Gust 80]. Ainsi des notions d'analyse fonctionnelle sont essentielles à la compréhension de ces concepts [Krey 78]. Certaines similarités entre l'automatique des systèmes localisés et répartis ont toutefois été mises en évidence par El Jai et Pritchard (1986) ainsi que El Jai et Amouroux (1990). Dans le cas particulier des systèmes linéaires, la théorie des systèmes de dimension infinie permet à Curtain et Zwart (1995) de donner un cadre de travail complet pour le développement de loi de commande.

La commande optimale est une stratégie de prédilection dans ce cadre formel. Cette stratégie est à la base de la majorité des travaux présentés dans les années 70 comme le rapporte la compilation de Ray et Lianiotis (1978). L'évolution des outils informatiques a permis récemment un regain d'activité dans ce domaine grâce au développement de méthodes de résolution efficaces. Ainsi Glowinski et He (1996)

présentent une application à la commande d'un système de convection-diffusion-réaction par la frontière, Dans cet algorithme, la formulation du problème est faite directement sur les EDPs mais l'algorithme utilise les éléments finis lors de la mise en oeuvre.

Récemment, plusieurs travaux présentent des solutions qui utilisent la commande adaptative pour les systèmes répartis. Ces travaux sont basés sur l'utilisation des techniques de stabilité de Lyapunov. Ces techniques élaborées par Lyapunov à la fin du 19e siècle ont été popularisées beaucoup plus tard vers le milieu du 20^e siècle. Les premières applications en génie chimique remontent aux travaux de Berger et Lapidus (1968) ainsi que Gurel et Lapidus (1969) sur l'analyse de la stabilité des réacteurs. L'application à la commande adaptative des systèmes a paramètres répartis est toutefois beaucoup plus récente. Böhm et al. (1998) utilisent des arguments similaires à ceux de Lyapunov pour présenter une stratégie de commande par modèle de référence. Leur traitement exhaustif inclut entre autres une preuve de convergence des paramètres identifiés en ligne ainsi que les conditions d'excitation persistante qui s'y rattachent. Cette approche s'applique aux systèmes pour lequel le modèle de référence est fortement coercitif et dont la commande apparaît explicitement dans les EDPs. Hong et Bentsman (1994) proposent aussi une stratégie de commande basée sur un modèle de référence. Leur argumentation est principalement basée sur une analyse de Lyapunov mais elle se limite à des systèmes de diffusion-réaction ou la commande est explicite dans les EPD.

Application à l'absorption de CO₂

La colonne d'absorption est un réacteur tubulaire et se prête bien à la modélisation par bilan de masse. Comme l'a effectué Van Der Weg (1976).

Différents travaux ont déjà été présentés sur le contrôle de tel procédé tel que le relate Darwish et Fantin (1980). Grosby et Durbin (1976) utilisent la commande par retour d'état pour contrôler l'absorption du dioxyde de carbone. Petrovski (1980) présente une stratégie de commande classique (PI) multivariable. Najim (1991) introduit une commande auto ajustable. Najim et Ruiz (1995) appliquent la commande prédictive. Finalement, Illoul, Selatnia et Boulerouah (2002) appliquent la commande prédictive généralisée.

Objectif du mémoire

L'analyse des travaux antérieurs montre que beaucoup de développements ont été accomplis dans la commande des systèmes à paramètres répartis. Intuitivement, il est possible de croire que l'utilisation d'un modèle plus raffiné permettra d'accroître les performances du système de commande. Par contre, il n'est pas évident que cet accroissement de performance justifie l'effort qui doit être mis dans la modélisation et le développement de la loi de commande. Cette problématique permet de formuler l'hypothèse de recherche suivante:

*L'utilisation d'un modèle à paramètres répartis
pour la conception d'un système de commande d'une colonne d'absorption
permet d'accroître les performances de ce procédé*

La méthodologie adoptée pour étudier cette hypothèse consiste à développer différentes stratégies de commande sur un exemple type: la colonne d'absorption de CO₂. Ceci permet par la suite de réaliser l'analyse comparative des performances. Les objectifs spécifiques du mémoire sont donc les suivants:

1. *Utiliser des outils de simulation efficaces.* Plusieurs outils de simulation existent pour les systèmes à paramètres répartis. Par contre, leur utilisation en ligne peut être difficile voir même impossible. Cette caractéristique est essentielle pour l'application en usine de lois de commande qui utilisent le modèle à paramètres répartis directement.
2. *Appliquer les stratégies de commande existantes à la problématique de la commande de la colonne d'absorption.* Pour servir de base de comparaison, la commande classique PID sera utilisée. Cette stratégie sera appliquée à la problématique particulière de la colonne d'absorption soit: débit variable et perturbations mesurées de la matière première.
3. *Appliquer des stratégies de commande en utilisant les réseaux de neurones.* Les stratégies basées sur les réseaux de neurones doivent être adaptées au procédé d'absorption de CO₂.

4. *Comparer les différentes stratégies.* Cette comparaison sera donc effectuée sur le procédé d'absorption par simulation.

Organisation du mémoire

Ce mémoire est organisé en deux parties distinctes afin de séparer les aspects de modélisation et simulation de la partie commande. La première partie est composée de deux chapitres sur la modélisation et la simulation de la colonne d'absorption décrite par un système à paramètres répartis.

Le chapitre 1 décrit la modélisation à paramètres répartis de la colonne d'absorption. De plus, il contient une présentation du procédé d'absorption de CO₂ par la MEA.

Le chapitre 2 traite une méthode de résolution des systèmes d'EDPs paraboliques et présente des résultats de simulation.

La seconde partie du mémoire est composée aussi de deux chapitres organisés comme suit :

Le chapitre 3 présente la théorie des réseaux de neurones artificiels et leur apprentissage. La méthode de modélisation par réseaux de neurones sera présentée avec détails.

Finalement, le dernier chapitre de ce mémoire présente les différentes stratégies de commande pour le contrôle du processus d'absorption et une analyse comparative des résultats de simulation obtenus.

CHAPITRE 1

MODÉLISATION DE LA COLONNE D'ABSORPTION

Modélisation de la colonne d'absorption

1.1 Introduction

Les colonnes d'absorption des gaz sont très répandues en pratique et l'on sait que leur modélisation devrait en toute rigueur faire appel à des équations aux dérivées partielles. Ce caractère réparti est rarement retenu sur le plan industriel car il conduit à des modèles de connaissance en général trop compliqués pour être utilisables [Ping 84],[Ven 76].

Très souvent, on envisage alors dès le départ un modèle de conduite (de type boîte noire) dans la majeure partie des cas. Mais l'amélioration souhaitée des performances peut amener à garder le modèle de connaissance (ce qui a été le cas pour notre application) [Ping 84][Ven 76].

Dans ce chapitre, nous développerons un modèle mathématique décrivant un processus d'absorption (absorption du CO_2 contenu dans un mélange AIR+ CO_2 par une solution contenant (MEA+eau) dans une colonne à garnissage opérant à contre courant. Ce modèle est caractérisé par son aspect réparti et fortement non linéaire.

1.2 Présentation de la colonne d'absorption

La colonne d'absorption se présente comme un tube en verre de 7,5 cm de diamètre et de 1,26 m de hauteur, garni sur toute sa hauteur par des Anneaux Raschig de dimension caractéristique de 10,5 mm (Figure 1.1). Le rôle de la colonne est d'obtenir des transferts simultanés de matière et de chaleur entre les deux phases à la pression atmosphérique et à une température $T=25^\circ\text{C}$. Elle permet de traiter un débit de l'ordre de 1441,56 l/h de gaz contenant approximativement 30% en volume de CO_2 , l'amplitude des perturbations en composition du CO_2 dans le mélange à traiter est de l'ordre de 10% à 15% [Sela 02].



Figure 1.1 La colonne d'absorption

1.3 Principe de fonctionnement de la colonne d'absorption

Le processus d'absorption étudié dans ce travail consiste à retirer d'un mélange gazeux (air+CO₂) le gaz acide (CO₂) qu'il contient, et cela en utilisant un liquide de lavage (monoéthanolamine : MEA+eau). Les deux phases (gaz, liquide) opèrent à contre courant.

Le mélange gazeux à épurer est introduit en fond de la colonne et le liquide de lavage (MEA + eau) en tête de celle-ci. Ce liquide va se charger en gaz carbonique et nous aurons donc en tête de la colonne le gaz épuré. Par mesure d'économie la (MEA) est régénérée dans une autre colonne de désorption (épurée du CO₂ qu'elle contient) par élévation de température (110°C) puis recyclée dans le pilote. L'absorption est réalisée à pression atmosphérique et à une température T=25°C.

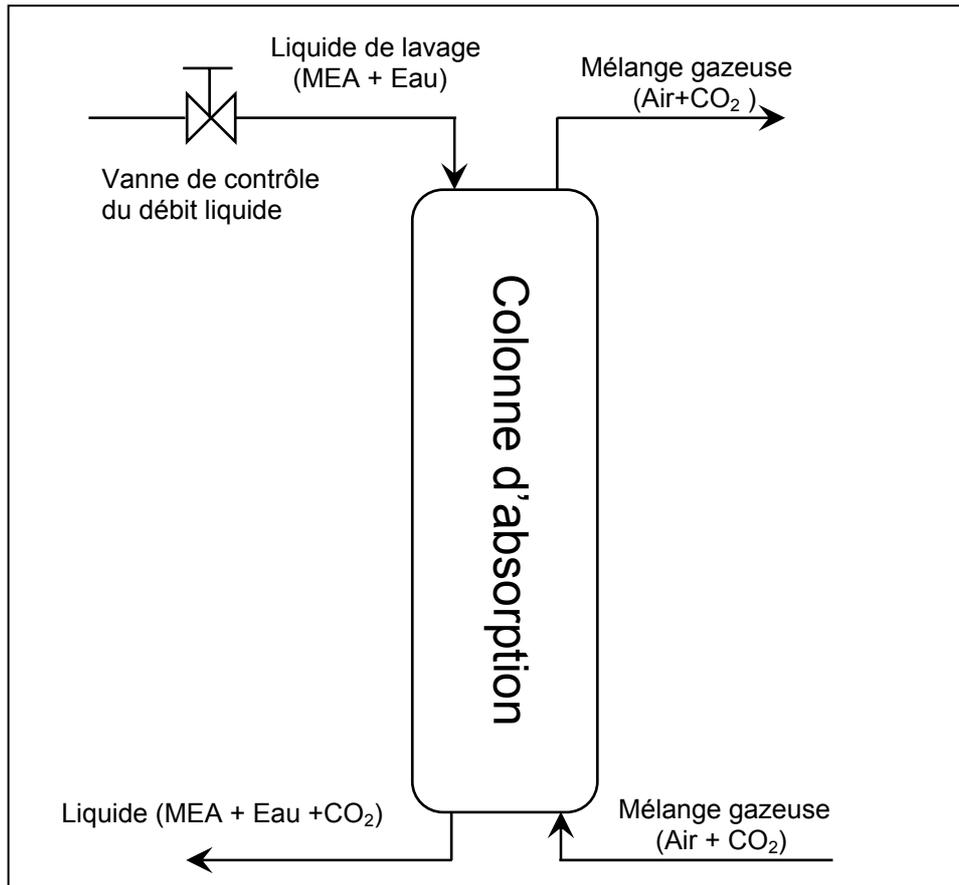


Figure 1.2 Schéma de fonctionnement de la colonne d'absorption

1.4 Modélisation

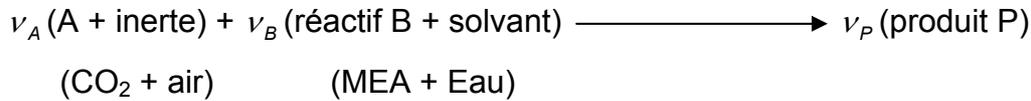
La modélisation permet d'établir un modèle mathématique à partir des lois fondamentales tels que la conservation de la masse, le premier principe de la thermodynamique, les équilibres entre phases et les lois de transfert.

Nous présenterons dans cette partie les différentes étapes conduisant à l'établissement d'un modèle mathématique, représentant la dynamique de la colonne d'absorption du CO_2 d'un mélange gazeux (CO_2 +air) par une solution aqueuse de Monoéthanolamine (MEA).

L'absorption d'un gaz accompagnée d'une réaction chimique en phase liquide permettra d'améliorer l'efficacité de la séparation (par exemple l'absorption du CO_2 dans une solution aqueuse de soude, amine...etc.), et la sélectivité de séparation (par exemple l'absorption du CO_2 et H_2S dans des solutions d'éthanolamine). La réaction chimique à étudier est la suivante :



Elle est de la forme :



où ν_A, ν_B et ν_P sont des coefficients stoechiométrique, négatifs pour les réactifs et positif pour les produits, tel que:

$$\nu_A = -1, \quad \nu_B = -2 \quad \text{et} \quad \nu_P = 1$$

Au cour de cette réaction, le soluté A réagit avec le réactif B en solution pour donner le produit P.

Comme toute opération de transfert de matière, l'absorption avec réaction chimique peut être décomposée en plusieurs étapes :

- Transfert de A de la phase gazeuse vers l'interface gaz/liquide ;
- Transfert de A de l'interface vers la phase liquide ;
- Transfert du réactif dans la phase liquide vers le site réactionnel ;
- Réaction entre A et B ;
- Transfert de P du site réactionnel vers la phase liquide.

1.4.1 Bilan de matière en phase liquide

Le bilan de matière pour le composé A pour une tranche fine d'épaisseur dx (voir figure 1.3) et pour une section unitaire d'aire inter faciale, en appliquant la loi de Fick relative à la diffusion moléculaire dans les milieux quasi-immobile, s'écrit :

Flux de A entrant à l'abscisse x	+	Quantité de A apparaissant (ou disparaissant) par unité de temps	=	Flux de A sortant à l'abscisse x+dx
----------------------------------	---	--	---	-------------------------------------

$$-D_{AL} \left[\frac{dC_{AL}(x)}{dx} \right]_x + \nu_A r_A dx = -D_{AL} \left[\frac{dC_{AL}(x)}{dx} \right]_{x+dx} \quad (1.2)$$

où

D_{AL} : Coefficient de diffusion de A dans la phase liquide (m^2/s).

r_A : Vitesse de réaction.

Pour dx très petit, nous avons :

$$\frac{\left[\frac{dC_{AL}(x)}{dx} \right]_{x+dx} - \left[\frac{dC_{AL}(x)}{dx} \right]_x}{dx} = \frac{d \left[\frac{dC_{AL}(x)}{dx} \right]}{dx} = \frac{d^2 C_{AL}(x)}{dx^2} \quad (1.3)$$

On peut alors réécrire l'équation (1.1) de la manière suivante :

$$D_{AL} \left\{ \left[\frac{dC_{AL}(x)}{dx} \right]_{x+dx} - \left[\frac{dC_{AL}(x)}{dx} \right]_x \right\} + v_A r_A dx = 0 \quad (1.4)$$

Si on divise l'équation (1.3) par dx , et en utilisant l'égalité (1.2), on aboutira à l'équation différentielle suivante :

$$D_{AL} \left[\frac{d^2 C_{AL}(x)}{dx^2} \right] + v_A r_A = 0 \quad (1.5)$$

avec les conditions aux limites :

$$\begin{cases} x = 0; & C_{AL}(0) = C_{ALi} \\ x = \delta_L; & C_{AL}(\delta_L) = C_{AL} \end{cases}$$

L'intégration de l'équation (1.5) est plus ou moins complexe suivant la forme de l'équation de vitesse.

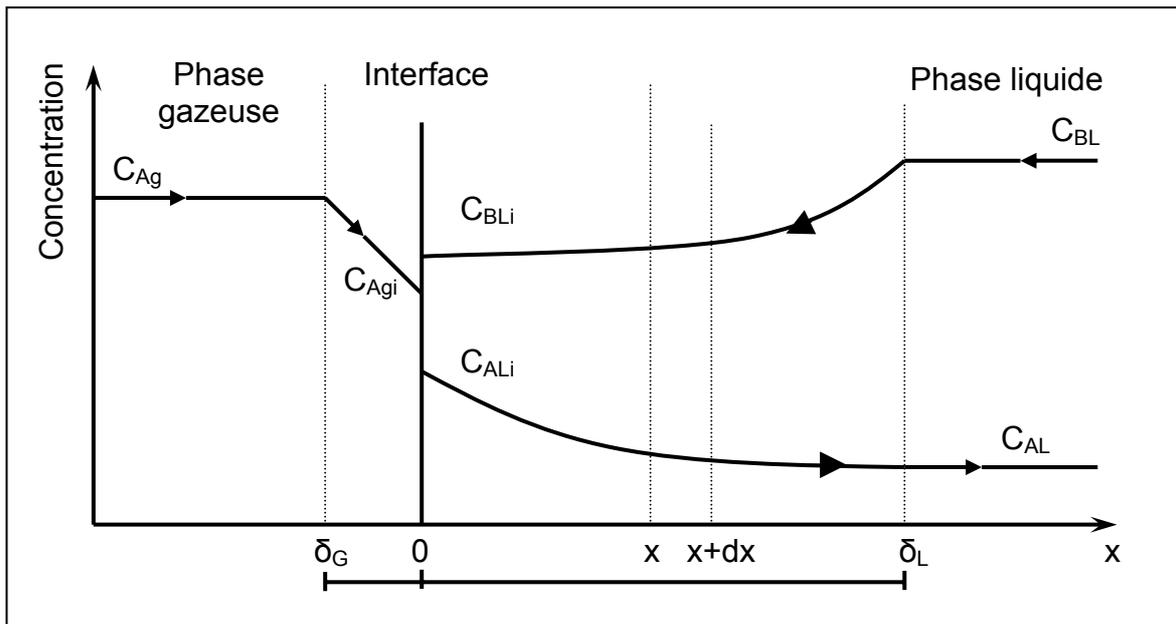


Figure 1.3 Schéma du modèle du film appliqué à la colonne d'absorption

1.4.2 Expression du flux de matière en phase liquide

Soit la réaction pseudo première ordre par rapport à chacun des deux réactifs : A et B. La vitesse de réaction peut s'écrire de la manière suivante :

$$r_A = kC_{AL}(x)C_{BL}(x) = k'C_{AL}(x) \quad \text{avec : } k' = kC_{BL}(x)$$

d'où, en considérant que $v_A = -1$, l'équation (1.4) s'écrira comme suit :

$$D_{AL} \left[\frac{d^2 C_{AL}(x)}{dx^2} \right] - kC_{AL}(x)C_{BL}(x) = 0 \quad (1.6)$$

En supposant que D_{AL} , k et $C_{BL}(x)$ sont constantes en phase liquide [Sela 02], c'est à dire:

$$C_{BL}(x) = C_{Be} = \text{constante.}$$

L'équation (1.5) devient :

$$D_{AL} \left[\frac{d^2 C_{AL}(x)}{dx^2} \right] - kC_{AL}(x)C_{BL} = 0 \quad (1.7)$$

avec les conditions aux limites :

$$\begin{cases} x = 0; & C_{AL}(0) = C_{ALi} \\ x = \delta_L; & C_{AL}(\delta_L) = C_{AL} \end{cases}$$

La solution générale de l'équation (1.6) s'écrit :

$$C_{AL}(x) = \beta_1 \exp(\alpha x) + \beta_2 \exp(-\alpha x) \quad (1.8)$$

$$\text{avec } \alpha = \left[\frac{kC_{BL}}{D_{AL}} \right]^{\frac{1}{2}}$$

Les conditions aux limites permettent de calculer les coefficients β_1 et β_2 :

$$\begin{cases} \beta_1 + \beta_2 = C_{ALi} \\ \beta_1 \exp(\alpha \delta_L) + \beta_2 \exp(-\alpha \delta_L) = C_{AL} \end{cases}$$

En résolvant ces deux équations et en remplaçant dans l'équation (1.7), la concentration $C_{AL}(x)$ dans l'interface aura pour expression :

$$C_{AL}(x) = \frac{C_{AL} sh(\alpha x) + C_{ALi} sh[\alpha(\delta_L - x)]}{sh(\alpha \delta_L)} \quad (1.9)$$

et le gradient de $C_{AL}(x)$ s'exprime alors par :

$$\frac{dC_{AL}(x)}{dx} = \frac{\alpha C_{AL} ch(\alpha x) - \alpha C_{ALi} ch[\alpha(\delta_L - x)]}{sh(\alpha \delta_L)} \quad (1.10)$$

On déduit le flux traversant l'interface :

$$[N_A]_{x=0} = -D_{AL} \left[\frac{dC_{AL}(x)}{dx} \right]_{x=0} = \frac{D_{AL} \alpha \delta_L ch(\alpha \delta_L)}{\delta_L sh(\alpha \delta_L)} \left[C_{ALi} - \frac{C_{AL}}{ch(\alpha \delta_L)} \right] \quad (1.11)$$

On peut également exprimer le flux à l'autre extrémité du film, pour $x = \delta_L$:

$$[N_A]_{x=\delta_L} = -D_{AL} \left[\frac{dC_{AL}(x)}{dx} \right]_{x=\delta_L} = k_L \frac{\alpha \delta_L}{th(\alpha \delta_L)} \left[\frac{C_{ALi}}{ch(\alpha \delta_L)} - C_{AL} \right] \quad (1.12)$$

avec : $k_L = \frac{D_{AL}}{\delta_L}$

Le terme $(\alpha \delta_L)$ représente un nombre adimensionnel, appelé nombre de HATTA (Ha) [Ping 84], qui est défini par la formule suivante :

$$\alpha \delta_L = Ha = \frac{\sqrt{k C_{BL} D_{AL}}}{k_L}$$

On peut alors exprimer la vitesse d'absorption de A, par unité de temps et par unité d'aire inter faciale, en présence de réaction chimique en fonction du nombre de Hatta :

$$[N_A]_{x=0} = k_L \frac{Ha}{th(Ha)} \left[C_{ALi} - \frac{C_{AL}}{ch(Ha)} \right] \quad (1.13)$$

On sait que le flux sans réaction chimique a pour formule :

$$[N'_A]_{x=0} = k_L (C_{ALi} - C_{AL}) \quad (1.14)$$

Considérant la grandeur E comme étant le rapport des flux avec et sans réaction chimique, c'est à dire :

$$E = \frac{[N_A]_{x=0}}{[N'_A]_{x=0}} = \frac{Ha}{th(Ha)} \frac{1 - \frac{\lambda}{ch(Ha)}}{1 - \lambda} \quad (1.15)$$

avec $\lambda = \frac{C_{AL}}{C_{ALi}}$

a partir de cette relation, on peut dire que si $Ha \geq 0.3$ alors $E \neq 1$.

Pour examiner la valeur du flux de A à $x = \delta_L$, puis rapporter sa valeur à celle du flux à $x = 0$, on fait le rapport suivant :

$$j = \frac{[N_A]_{x=\delta_L}}{[N_A]_{x=0}} = \frac{1 - \lambda ch(Ha)}{ch(Ha) - \lambda} \quad (1.16)$$

Suivant les valeurs du nombre de Hatta, en utilisant les rapports E et j , trois cas se manifestent [Ven 76] :

a) $Ha < 0.3$: réaction lente : $ch(Ha)$ et j tendent vers 1, la réaction se déroule essentiellement au cœur de la phase liquide. Dans ce cas :

$$[N_A]_{x=0} \approx [N'_A]_{x=0} = k_L (C_{ALi} - C_{AL}) \quad (1.17)$$

c'est à dire $E \approx 1$.

b) $0.3 < Ha < 5$: cas intermédiaire : on utilise l'expression (1.12).

c) $Ha > 5$: réaction rapide : la valeur de λ sera faible, la réaction se déroule essentiellement dans le film. Dans ce cas :

$$j = \frac{1}{ch(Ha)} \quad \text{et} \quad E \approx Ha \quad (1.18)$$

Le flux d'absorption par unité d'aire inter faciale pourra être calculé avec la formule suivante :

$$[N_A]_{x=0} \approx C_{ALi} k_L Ha = C_{ALi} \sqrt{k C_{BL} D_{AL}} = C_{ALi} \sqrt{k' D_{AL}} = \frac{\phi}{a} \quad (1.19)$$

Finalement, le flux d'absorption est donné par :

$$\phi = C_{ALi} a \sqrt{k' D_{AL}} \quad (1.20)$$

1.4.3 La représentation mathématique de la colonne d'absorption

Dans le but d'alléger la structure du modèle et simplifier le traitement numérique, nous avons adopté les hypothèses suivantes [Sela 02] :

- Il n'y a pas de résistance en phase gazeuse,
- L'écoulement est en régime permanent,
- Toutes les propriétés physiques du gaz et du liquide sont constantes le long de la colonne et au cours du temps,
- Le processus est isotherme.

Dans ces conditions, les équations du modèle se réduisent à l'écriture des bilans de matières partiels dans chaque phase, auxquelles s'ajoutent les relations traduisant les conditions aux limites [Sela 02].

Puisque, on s'intéresse à l'évolution de la concentration du CO₂ le long de la colonne d'absorption, on effectue le bilan de matière en soluté CO₂ sur la phase gazeuse et sur un élément dz (Figure 1.4) [Sela 02].

Quantité de soluté à l'entrée z = Quantité de soluté à la sortie z+dz + Quantité de soluté transféré de la phase gazeuse vers la phase liquide + Accumulation dans l'élément dz

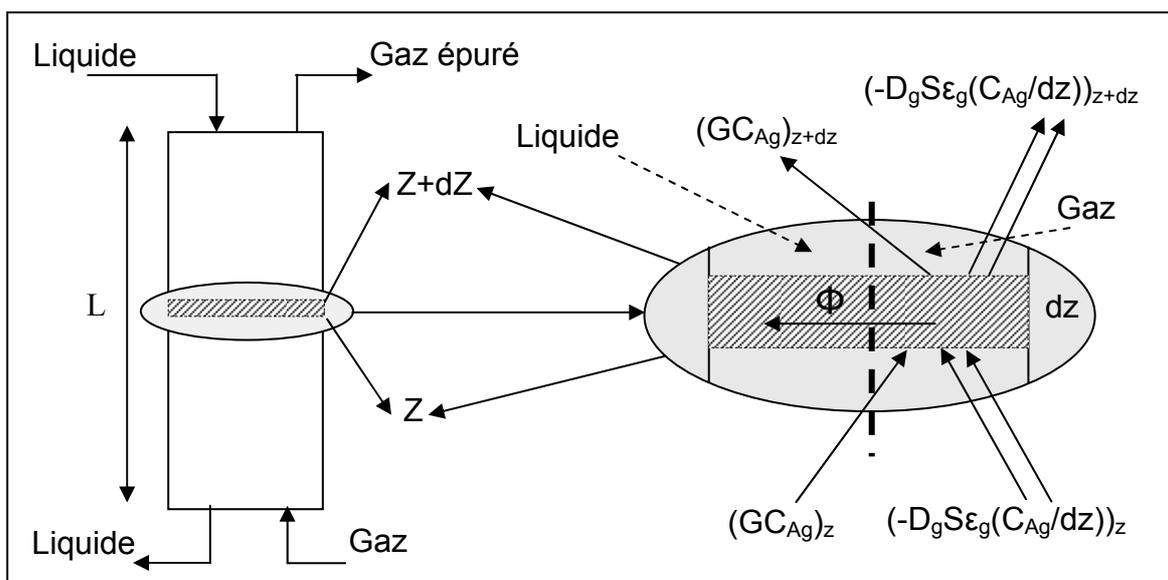


Figure 1.4 Bilan de matière sur une tranche élémentaire dz

Entrée à la côte (z) est : $(GC_{Ag})_z + \left(-D_g S \varepsilon_g \frac{dC_{Ag}}{dz}\right)_z$

flux convectif en (z) flux du à la dispersion axiale en (z)

Sortie à la côte (z + dz) est : $(GC_{Ag})_{z+dz} + \left(-D_g S \varepsilon_g \frac{dC_{Ag}}{dz}\right)_{z+dz}$

flux convectif flux du à la dispersion
en (z + dz) axiale en (z + dz)

La quantité de soluté transférée de la phase gazeuse vers la phase liquide est : $\phi \cdot S \cdot dz$

Accumulation dans l'élément dz : $S \cdot dz \cdot \frac{dC_{Ag}}{dt}$

Soit le bilan de matière sur une tranche dz dans la phase gazeuse :

$$\left(GC_{Ag} - D_g S \varepsilon_g \frac{dC_{Ag}}{dz}\right)_{z+dz} = \left(GC_{Ag} - D_g S \varepsilon_g \frac{dC_{Ag}}{dz}\right)_z + \phi S dz + S dz \frac{dC_{Ag}}{dt} \quad (1.21)$$

or:

$$\left(GC_{Ag} - D_g S \varepsilon_g \frac{dC_{Ag}}{dz}\right)_{z+dz} = \left(GC_{Ag} - D_g S \varepsilon_g \frac{dC_{Ag}}{dz}\right)_z + \frac{d}{dz} \left(GC_{Ag} - D_g S \varepsilon_g \frac{dC_{Ag}}{dz}\right) \cdot dz \quad (1.22)$$

donc l'équation devient finalement :

$$\frac{d}{dz} \left(GC_{Ag} - D_g S \varepsilon_g \frac{dC_{Ag}}{dz}\right) \cdot dz + \phi S dz + S dz \frac{dC_{Ag}}{dt} = 0 \quad (1.23)$$

d'où :

$$D_g \varepsilon_g \frac{\partial^2 C_{Ag}}{\partial z^2} - \frac{G}{S} \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z} - \phi = \frac{\partial C_{Ag}}{\partial t} \quad (1.24)$$

Soit : $U_g = \frac{G}{S}$ la vitesse moyenne d'écoulement, alors l'équation (1.23) s'écrit :

$$D_g \varepsilon_g \frac{\partial^2 C_{Ag}}{\partial z^2} - U_g \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z} - \phi = \frac{\partial C_{Ag}}{\partial t} \quad (1.25)$$

D'après la Figure 1.4, et en tenant compte des hypothèses suivantes :

- $C_{BL}(x) = C_{Be}$ constante, la MEA est en excès par rapport au CO_2 .
- La réaction entre le composé CO_2 (A) et la MEA (B) est rapide et du pseudo premier ordre.

La vitesse de la réaction s'écrit :

$$r = k C_{AL}(x) C_{BL}(x) \quad (1.26)$$

puisque $C_{BL}(x) = C_{Be} = \text{constante}$, alors :

$$r = k' C_{AL}(x) \quad (1.27)$$

avec $k' = k C_{Be}$ (1.28)

En admettant que l'équilibre est établi à l'interface gaz-liquide et pour de faibles concentrations de CO_2 , on peut exprimer cet équilibre par une droite de la forme :

$$C_{Agi} = m C_{ALi} \quad (1.29)$$

Puisque, par hypothèse, il n'y a pas de résistance en phase gaz, on peut écrire donc :

$$C_{Agi} = C_{Ag} \quad (1.30)$$

d'où $C_{ALi} = \frac{C_{Ag}}{m}$ (1.31)

L'expression du flux de transfert de matière ϕ de la phase gazeuse vers la phase liquide devient donc :

$$\phi = \frac{a}{m} \sqrt{k C_{Be} D_{AL}} C_{Ag} \quad (1.32)$$

L'équation (1.24) s'écrit donc :

$$D_g \varepsilon_g \frac{\partial^2 C_{Ag}}{\partial z^2} - U_g \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z} - \frac{a \sqrt{k C_{Be} D_{AL}}}{m} C_{Ag} = \frac{\partial C_{Ag}}{\partial t} \quad (1.33)$$

1.4.4 Les conditions aux limites

La colonne fonctionne à contre courant, le gaz circule de bas en haut alors que le liquide s'écoule du haut vers le bas (Figure 1.2).

En bas de colonne : $z = 0$

$$\left(C_{Ag} + \frac{D_g \varepsilon_g}{U_g} \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z} \right)_{z=0} = C_{ge} \quad (1.34)$$

En haut de colonne : $z = L$ (L : hauteur totale de la colonne)

$$\left(\frac{\partial C_{Ag}}{\partial z} \right)_{z=L} = 0 \quad (1.35)$$

1.5 Le modèle de la colonne

De (1.32), (1.33) et (1.34), le système d'équations qui caractérise la dynamique de la colonne d'absorption est donné par :

$$D_g \varepsilon_g \frac{\partial^2 C_{Ag}}{\partial z^2} - U_g \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z} - \frac{a \sqrt{k C_{Be} D_{AL}}}{m} C_{Ag} = \frac{\partial C_{Ag}}{\partial t} \quad (1.36)$$

avec les conditions aux limites suivante :

à droite

$$\left(C_{Ag} - \frac{D_g \varepsilon_g}{U_g} \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z} \right)_{z=0} = C_{ge}$$

à gauche

$$\left(\frac{\partial C_{Ag}}{\partial z} \right)_{z=L} = 0$$

1.6 Tableau des paramètres

paramètre	valeur / expression	Signification
D_g	10^{-3} (m/s)	Coefficient de dispersion axiale coté gaz
ε_g	$\varepsilon - \varepsilon_l$	Rétention gazeuse
ε	0,67	Porosité de la colonne d'absorption
ε_l	$8,85 \cdot 10^{-2} u_l^{0,43} a^{0,85}$	Rétention liquide
a	$469,11\{1-\exp(-3,3 u_l^{0,4})\}$	Aire inter facial
u_l	(m/s)	Vitesse d'écoulement du liquide (MEA)
U_g	G/S (m/s)	Vitesse d'écoulement du gaz
G	$3,1 \cdot 10^{-3}$ (m ³ /s)	Débit volumique de la phase gaz
S	$4,4 \cdot 10^{-3}$ (m ²)	Section de la colonne
k	5,868 (m ³ /mol×s)	Constante de vitesse de réaction
C_{Be}	310 (mol/m ³)	Concentration de la MEA en haut de la colonne
C_{ge}	$4.458 \cdot 10^{-4}$ (mol/m ³)	Concentration de CO ₂ en bas de la colonne)
D_{AL}	$1,51 \cdot 10^{-9}$ (m ² /s)	Coefficient de diffusion du CO ₂ dans la phase liquide
m	1,2	Pente de la droite d'équilibre physique entre phases
L	1,26 (m)	Longueur de la colonne

Tableau 1.1 Paramètres du système

1.7 Conclusion

Le modèle mathématique décrivant le processus d'absorption de CO₂ dans une colonne à garnissage opérant à contre courant à été développer à partir des équations de bilan de matière et de la théorie concernant le transfert de matière avec réaction chimique. Le modèle obtenu est un modèle à paramètres distribués.

Il se distingue des modèles décrivant les processus d'absorption par la prise en compte du phénomène de dispersion axiale, ce qui a conduit à l'obtention d'un modèle décrit par des équations aux dérivées partielles du second ordre par rapport à la variable d'espace.

La variable de commande est le débit du liquide de lavage et les perturbations interviendront sur la concentration de CO₂ dans le gaz à l'entrée de la colonne et sur le débit de gaz.

CHAPITRE 2

SIMULATION DE LA COLONNE D'ABSORPTION

Simulation de la colonne d'absorption

2.1 Introduction

Le modèle présenté au chapitre précédent est relativement simple à obtenir. Il en va tout autrement de sa résolution. A ce jour, il n'existe pas de solution analytique pour les modèles non linéaire des réacteurs chimique comme celui présenté au chapitre 1. Toutefois dans le cas d'un système linéaire, la théorie des systèmes de dimension infinie fournit les outils pour résoudre les équations de type parabolique [Curt 95].

La résolution numérique des bilans de matière décrivant la dynamique d'un réacteur chimique n'est pas un sujet neuf, plusieurs ouvrages y sont consacrés tel Varma et Morbidelli (1997) et Hanna et Sandall (1996). Ce sujet demeure d'actualité car aucune des méthodes actuelles ne permet de solutionner l'ensemble des problèmes efficacement. En fait, les méthodes classiques doivent souvent être ajustées ou même modifiées pour tenir compte des particularités d'un problème donné. Dans le cas d'un système d'équations paraboliques, trois méthodes de base sont souvent utilisées : les différences finies [Gera 90], la collocation orthogonale [Viac 78] et les éléments finis [Redd 93]. Ces méthodes permettent généralement d'obtenir des résultats adéquats. Par contre, elles sont peu adaptées pour une utilisation en ligne dans le cadre d'une stratégie de commande. Différentes heuristique sont aussi proposées dans la littérature tel les travaux de Patankar (1984).

La résolution numérique d'équations aux dérivées partielles fait appel à la segmentation spatiale et temporelle de la solution. Dans le cas des méthodes classiques de résolution, l'objectif est d'obtenir une approximation des EDP en équations différentielles ordinaires. Ces équations peuvent alors être résolues par d'autres méthodes numériques bien connues.

Ce chapitre présente une méthode de résolution adaptée à une utilisation en ligne et utilisée pour résoudre des systèmes d'équations aux dérivées partielles non linéaires. La première partie présente la méthode en question qui est basée sur la discrétisation de la variable spatiale. La deuxième partie du chapitre est consacrée à l'adaptation des équations (1.36) décrivant la dynamique de la colonne d'absorption à la méthode présentée. Finalement, la dernière portion du chapitre présente les résultats de simulation du comportement du système.

2.2 Résolution analytique

La solution analytique des systèmes à paramètres répartis peut être abordée à l'aide de la théorie des systèmes de dimension infinie. Ce cadre de travail a été bien établi pour les systèmes linéaires [Curt 95]. Dans notre cas, cette méthode ne peut pas être appliquée puisque la colonne d'absorption est un système fortement non linéaire.

2.3 Résolution numérique par discrétisation spatiale

L'utilisation d'un modèle à paramètres répartis dans une stratégie de commande peut faire appel à sa résolution en ligne. Malheureusement, les méthodes numériques classiques sont peu adaptées à ce type d'utilisation. En effet, la priorité principale de ces algorithmes est d'obtenir la solution la plus précise possible. Ainsi, la robustesse par rapport aux variations paramétriques et la rapidité d'exécution sont des objectifs secondaires. De plus, dans le cas de systèmes faiblement dispersifs, la résolution en transitoire est affectée par le problème de diffusion numérique. Ces observations motivent donc le développement d'un nouvel algorithme de simulation mieux adapté pour une utilisation dans un contexte industriel sur des systèmes faiblement dispersifs.

L'approche par discrétisation spatiale est applicable pour les systèmes d'équations aux dérivées partielles de type parabolique avec une seule variable spatiale. Elle est basée sur la décomposition de l'espace en plusieurs sous intervalles puis la résolution du système pour chaque sous intervalle avec une précision du second ordre [Skee 90]. La résolution passe, après la mise sous une forme normalisée du problème, par trois étapes :

- Approximation du système d'équations aux dérivées partielles,
- Interpolation des équations résultantes de l'approximation,
- Assemblage des équations interpolées.

Cette approche relativement simple permet d'obtenir un schéma numérique stable et rapide.

2.3.1 Description de la méthode de discrétisation spatiale

Considérons le système à paramètres distribués, mis sous une forme normalisée, suivante :

$$C\left(z, t, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z}\right) \frac{\partial C_{Ag}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(g\left(z, t, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z}\right) \right) + f\left(z, t, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z}\right) \quad (2.1)$$

pour $a \leq z \leq b$. $C\left(z, t, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z}\right)$ est une matrice diagonale dont les éléments diagonaux sont identiquement nuls ou positifs [Skee 90].

Les conditions aux limites, pour $z = a, b$, sont :

$$p(z, t, C_{Ag}) + q(z, t) g\left(z, t, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z}\right) = 0 \quad (2.2)$$

On suppose d'autre par que :

$$w(z) = g\left(z, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z}\right) = G(z, C_{Ag}) \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z}, \quad (2.3)$$

Cette méthode est conçue de telle manière à :

- Faire une seule évaluation de C , f et g par sous intervalle.
- Avoir une meilleure précision.
- Ramener le système EDPs à un système d'équations différentielles ordinaires (ODEs) explicite.

Généralement, une précision locale du second ordre est choisie ; ce qui veut dire que la contribution de l'erreur sur un sous intervalle $[z_{j-1}, z_j]$ dans l'erreur globale est d'ordre $O(h_j^3)$, avec :

$$h_j = z_j - z_{j-1}.$$

Le système (2.1) peut être mis sous la forme de deux équations aux dérivées partielles de premier ordre telle que :

$$\frac{\partial C_{Ag}}{\partial z} = H(z, C_{Ag}) w(z), \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial w(z)}{\partial z} = Q\left(z, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial t}\right) \quad (2.5)$$

où

$$H(z, C_{Ag}) = \frac{1}{G(z, C_{Ag})}, \quad (2.6)$$

$$Q\left(z, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial t}\right) = C\left(z, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z}\right) \frac{\partial C_{Ag}}{\partial t} - f\left(z, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z}\right). \quad (2.7)$$

La résolution commence par la décomposition de la longueur $[a, b]$ en plusieurs éléments de longueur, dénotés par $[\alpha, \beta]$. Avec une longueur $h = \beta - \alpha$ et de point médium $\gamma = (\alpha + \beta)/2$.

Le problème sera traité en utilisant la méthode de Galerkin [Skee 90] [Erik 84].

2.3.2 Quadrature et approximation

En intégrant les équations (2.4) et (2.5) en se referant à la méthode des élément finis [Skeel 90], on obtient

$$C_{Ag}(\beta) = C_{Ag}(\alpha) + \int_{\alpha}^{\beta} H(z, C_{Ag}) \left\{ w(\alpha) + \int_{\alpha}^z Q\left(y, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial t}\right) dy \right\} dz \quad (2.8)$$

En inter changeant α et β , on obtient

$$C_{Ag}(\alpha) = C_{Ag}(\beta) - \int_{\alpha}^{\beta} H(z, C_{Ag}) \left\{ w(\beta) - \int_z^{\beta} Q\left(y, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial x}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial t}\right) dy \right\} dz \quad (2.9)$$

On forme des approximations discrètes de ces deux équations, ainsi on obtient une équation pour chacune de $C_{Ag}(\alpha)$ et $C_{Ag}(\beta)$ en fonction de $w(\alpha)$ et $w(\beta)$. Puis les conditions aux limites et la continuité de $w(z)$ aux points de maillage sont utilisés pour déterminer les valeurs de $w(z)$, on obtient ainsi les différentes équations qui déterminent les valeurs de $C_{Ag}(z)$ aux points de maillage.

L'approximation de (2.8) et (2.9) est développée en utilisant les expressions suivantes :

$$H_0 = H(\gamma, C_{Ag}(\gamma)), \quad C_0 = C\left(\gamma, C_{Ag}(\gamma), \frac{\partial C_{Ag}(\gamma)}{\partial z}\right), \quad f_0 = f\left(\gamma, C_{Ag}(\gamma), \frac{\partial C_{Ag}(\gamma)}{\partial x}\right)$$

avec $\gamma = (\alpha + \beta)/2$ et on aura :

$$C_{Ag}(\beta) = C_{Ag}(\alpha) + \int_{\alpha}^{\beta} H_0 \left\{ w(\alpha) + \int_{\alpha}^z \left(C_0 \frac{\partial C_{Ag}(\alpha)}{\partial t} - f_0 \right) dy \right\} dz + e \quad (2.10)$$

et

$$C_{Ag}(\alpha) = C_{Ag}(\beta) - \int_{\alpha}^{\beta} H_0 \left\{ w(\beta) - \int_z^{\beta} \left(C_0 \frac{\partial C_{Ag}(\beta)}{\partial t} - f_0 \right) dy \right\} dz + e \quad (2.11)$$

L'utilisation de $\frac{\partial C_{Ag}(\alpha)}{\partial t}$ dans (2.10) et de $\frac{\partial C_{Ag}(\beta)}{\partial t}$ dans (2.11) permet d'avoir un système d'ODEs explicite dans le temps. e représente une erreur quadratique.

La combinaison entre (2.8) et (2.9) nous donne

$$w(\beta) = w(\alpha) + \int_{\alpha}^{\beta} Q \left(z, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial t} \right) dz \quad (2.12)$$

et la combinaison entre (2.10) et (2.11) nous donne

$$w(\beta) = w(\alpha) + \int_{\alpha}^{\beta} \left\{ C_0 \left(\frac{\partial C_{Ag}(\alpha)}{\partial t} \psi_{\alpha}(z) + \frac{\partial C_{Ag}(\beta)}{\partial t} \psi_{\beta}(z) \right) - f_0 \right\} dz + e \quad (2.13)$$

où $\psi_{\beta}(z) = \frac{z - \alpha}{\beta - \alpha}$ et $\psi_{\alpha}(z) = 1 - \psi_{\beta}(z)$.

2.3.3 L'interpolation

Chacune des fonctions G , C et f doit être évaluée pour $z = \gamma$. Puisque $C_{Ag}(z)$ et $\frac{\partial C_{Ag}(z)}{\partial z}$ ne sont connues que pour $z = a$ et $z=b$, il est nécessaire de construire une interpolation telle que [Russ 75]:

$$U(z) = C_{Ag}(\alpha)\psi_{\alpha}(z) + C_{Ag}(\beta)\psi_{\beta}(z) \quad (2.14a)$$

$$\frac{\partial U(z)}{\partial z} = \frac{\partial C_{Ag}(\alpha)}{\partial z}\psi_{\alpha}(z) + \frac{\partial C_{Ag}(\beta)}{\partial z}\psi_{\beta}(z) \quad (2.14b)$$

où ψ_{α} et ψ_{β} sont définies au § 2.3.2

Après avoir construit l'interpolation, on remplace $1/H_0$, C_0 et f_0 par $\tilde{G}_0 = G(\gamma, U(\gamma))$, $\tilde{C}_0 = C\left(\gamma, U(\gamma), \frac{\partial U(\gamma)}{\partial z}\right)$ et $\tilde{f}_0 = f\left(\gamma, U(\gamma), \frac{\partial U(\gamma)}{\partial z}\right)$ dans (2.10), (2.11) et (2.13). Les équations (2.10) et (2.11) peuvent être mises sous la forme suivante :

$$\tilde{G}_0 \frac{\partial U(\gamma)}{\partial z} = w(\alpha) + (\gamma - \alpha) \left(\tilde{C}_0 \frac{\partial C_{Ag}(\alpha)}{\partial t} - f_0 \right) + e \quad (2.15)$$

et

$$\tilde{G}_0 \frac{\partial U(\gamma)}{\partial z} = w(\beta) + (\gamma - \beta) \left(\tilde{C}_0 \frac{\partial C_{Ag}(\beta)}{\partial t} - f_0 \right) + e \quad (2.16)$$

2.3.4 Assemblage des équations

Si le terme $\tilde{G}_0 \frac{\partial U(\gamma)}{\partial z}$ dans (2.11) et (2.12) est généralisé à $g\left(\gamma, U(\gamma), \frac{\partial U(\gamma)}{\partial z}\right)$ et l'erreur est négligée, alors on obtient des équations aux différences pour la solution semi discrète $\{C_{Ag_j}\}$, $\{w_j\}$. Si on remplace $[\alpha, \beta]$ par $[z_{j-1}, z_j]$, on obtient :

$$g_{j-\frac{1}{2}} = w_{j-1} + \left(\gamma_{j-\frac{1}{2}} - z_{j-1} \right) \left(C_{j-\frac{1}{2}} \dot{C}_{Ag_{j-1}} - f_{j-\frac{1}{2}} \right) \quad \text{pour } j \quad (2.17)$$

$$\text{et} \quad -g_{j-\frac{1}{2}} = -w_j + \left(z_j - \gamma_{j-\frac{1}{2}} \right) \left(C_{j-\frac{1}{2}} \dot{C}_{Ag_j} - f_{j-\frac{1}{2}} \right) \quad \text{pour } j \quad (2.18)$$

Pour $j = 1, 2, \dots, J$. A l'intérieur du maillage on fait l'addition de (2.17) pour $j+1$ avec (2.18) pour obtenir

$$g_{j+\frac{1}{2}} - g_{j-\frac{1}{2}} = \left(\gamma_{j+\frac{1}{2}} - z_j \right) \left(C_{j+\frac{1}{2}} \dot{C}_{Agj} - f_{j+\frac{1}{2}} \right) + \left(z_j - \gamma_{j-\frac{1}{2}} \right) \left(C_{j-\frac{1}{2}} \dot{C}_{Agj} - f_{j-\frac{1}{2}} \right) \quad (2.19)$$

A la limite droite, on peut tirer w_b de l'équation (2.2), sachant que

$$w_b = g \left(b, C_{Ag}(b), \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z}(b) \right).$$

Maintenant, dans l'équation (2.18) nous connaissons $\dot{C}_{Agb}(t)$,

$$C_{b-\frac{1}{2}} = C \left(\gamma, U(\gamma), \frac{\partial U(\gamma)}{\partial z} \right) \text{ et } f_{b-\frac{1}{2}} = f \left(\gamma, U(\gamma), \frac{\partial U(\gamma)}{\partial z} \right); \text{ connaissant } w_b, \text{ nous en}$$

déduisons $g_{b-\frac{1}{2}}$. $g_{b-\frac{3}{2}}$ sera déduit de l'équation (2.19) en prenant $j = b-1$ et en

calculons $C_{b-\frac{3}{2}}$ et $f_{b-\frac{3}{2}}$ de la même manière que $C_{b-\frac{1}{2}}$ et $f_{b-\frac{1}{2}}$ précédemment. De

proche en proche nous calculons tous les $g_{j-\frac{1}{2}}$ à partir de (2.19) et puis tous les w_j

à partir de (2.18). w_a sera déduit de (2.2), mais cette fois-ci à la limite gauche.

La connaissance des w_j nous permet de connaître les $\frac{\partial C_{Ag}}{\partial z}$ aux points de maillage à partir de (2.4), et nous pouvons recalculer $f_{j-\frac{1}{2}}$ de manière plus précise.

Maintenant nous pouvons revenir à (2.18) pour connaître la nouvelle valeur de $\dot{C}_{Ag}(t)$, en intégrant, nous obtiendrons $C_{Ag}(t + \Delta t)$ aux points du maillage et le processus pour recommencer.

2.3.5 Adaptation de l'équation pour la colonne d'absorption

L'équation du système est donnée par :

$$\frac{\partial C_{Ag}(z,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_{Ag}(z,t)}{\partial z^2} - v \frac{\partial C_{Ag}(z,t)}{\partial z} - k C_{Ag}(z,t) \quad (2.20)$$

$$\text{avec : } D = D_g \varepsilon_g, \quad v = U_g, \quad k = \frac{a \sqrt{K C_{Be} D_{Ai}}}{m}$$

La réécriture de l'équation précédente donne :

$$-\frac{\partial C_{Ag}(z,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(-D \frac{\partial C_{Ag}(z,t)}{\partial z} + v C_{Ag}(z,t) \right) + k C_{Ag}(z,t) \quad (2.21)$$

Par analogie avec l'équation (2.1) on déduit que:

$$C \left(z, t, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z} \right) = -1,$$

$$g \left(z, t, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z} \right) = -D \frac{\partial C_{Ag}(z,t)}{\partial z} + v C_{Ag}(z,t),$$

$$f \left(z, t, C_{Ag}, \frac{\partial C_{Ag}}{\partial z} \right) = k C_{Ag}(z,t).$$

Les conditions aux limites sont donnés par :

à gauche ($z = 0$)

$$C_{ge} + \frac{1}{v} \left(-D \frac{\partial C_{Ag}(z,t)}{\partial z} + v C_{Ag}(z,t) \right)_{z=0} = 0 \quad (2.22)$$

Par analogie avec l'équation (2.2) on déduit que :

$$p(z, t, C_{Ag}) = C_{ge}, \text{ et } q(z, t) = \frac{1}{v}.$$

à droite ($z = L$)

$$-v(C_{Ag}(z,t))_{z=L} + \left(-D \frac{\partial C_{Ag}(z,t)}{\partial z} + v C_{Ag}(z,t) \right)_{z=L} = 0 \quad (2.23)$$

De même, par analogie avec l'équation (2.2) on déduit que :

$$p(z, t, C_{Ag}) = -v(C_{Ag}(z,t))_{z=L}, \text{ et } q(z, t) = 1.$$

La condition initiale est la solution en régime permanent de l'équation du système, c'est-à-dire.

$$D \frac{\partial^2 C_{Ag}(z,t)}{\partial z^2} - v \frac{\partial C_{Ag}(z,t)}{\partial z} - k C_{Ag}(z,t) = 0 \quad (2.24)$$

C'est une équation différentielle du second ordre. Le terme en second ordre est du à la prise en compte du phénomène de dispersion axiale qui est très faible ce qui nous permet de le négliger. La condition initiale est donc la solution en régime permanent de l'équation du système sans le terme du second ordre.

$$v \frac{\partial C_{Ag}(z,t)}{\partial z} + k C_{Ag}(z,t) = 0 \quad (2.25)$$

Ce qui donne

$$(C_{Ag}(z))_{t=0} = c_0 e^{-\frac{k}{v}z} \quad (2.26)$$

La constante c_0 se déduit de la condition à la limite à gauche (2.22) puisque le phénomène de dispersion axiale est négligé, donc :

$$(C_{Ag}(z,t))_{z=0} = C_{ge} = c_0 \quad (2.27)$$

alors

$$(C_{Ag}(z))_{t=0} = c_{ge} e^{-\frac{k}{v}z} \quad (2.28)$$

2.4 Résultats

La méthode de discrétisation spatiale a été appliquée pour résoudre les équations qui régissent le fonctionnement de la colonne d'absorption. Puisque cette dernière est un réacteur chimique alors il y a évolution de la concentration de CO_2 dans tout le réacteur. La figure 2.1 présente cette évolution du bas vers le haut de la colonne en fonction du temps avec une perturbation de +15% sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne. L'échelle de longueur est donnée en éléments (40 éléments sur toute la longueur).

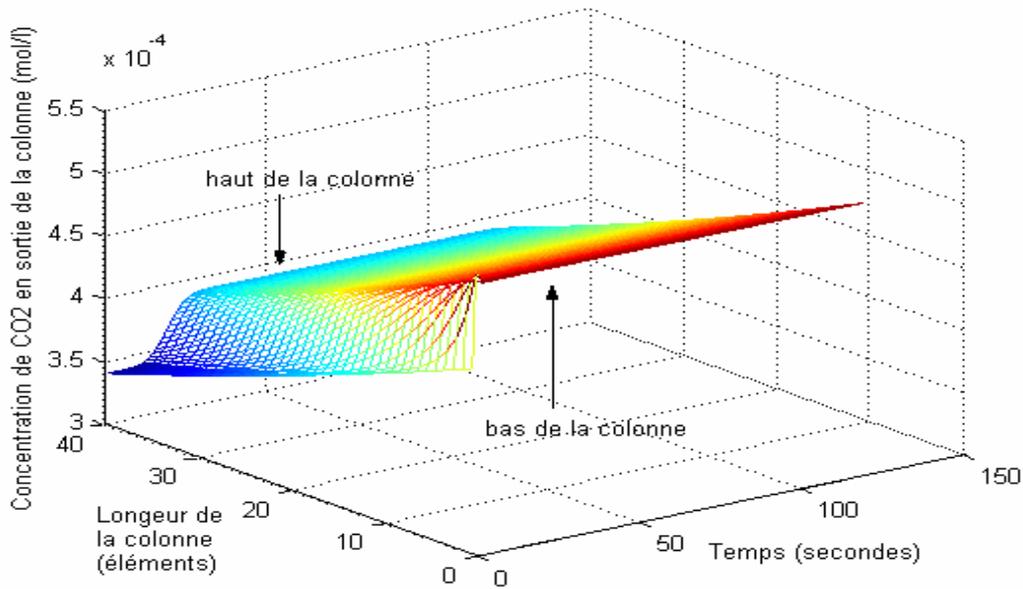


Figure 2.1 Evolution de la concentration de CO₂ en tout point de la colonne

Pour analyser l'effet du maillage, différentes simulations sont effectuées en faisant varier le nombre d'éléments qui constituent le maillage. Les figures (2.3, 2.4 et 2.5) montrent qu'un maillage faible conduit à des solutions imprécises. En augmentant le nombre d'élément de maillage la précision s'améliore. Au delà d'un certain nombre d'éléments de maillage (environ 40), on obtient une précision acceptable (Figure 2.6), l'augmentation du nombre d'éléments de maillage ne fait que rendre le temps de calcul important (Figure 2.7 et 2.8). Ces testes de simulation sont réalisés avec une perturbation de +15% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne.

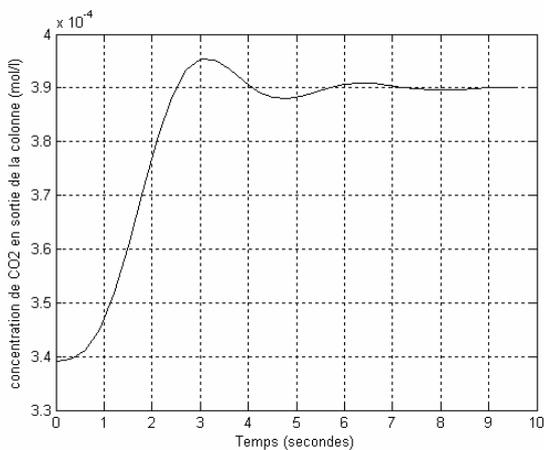


Figure 2.3 Evolution de la concentration de CO₂ en sortie de la colonne pour un maillage de 5 éléments

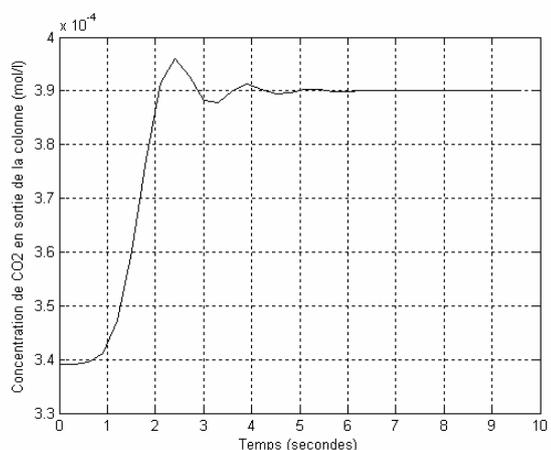


Figure 2.4 Evolution de la concentration de CO₂ en sortie de la colonne pour un maillage de 10 éléments

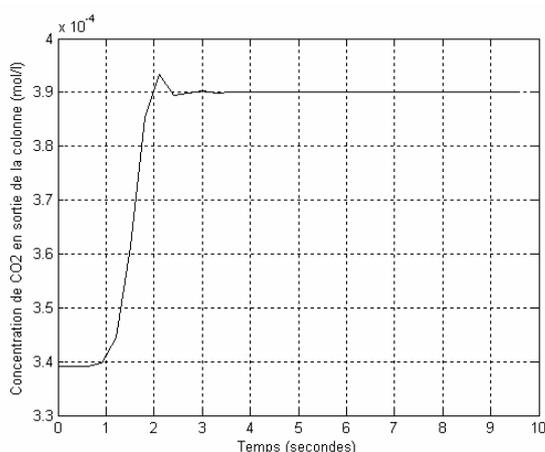


Figure 2.5 Evolution de la concentration de CO₂ en sortie de la colonne pour un maillage de 20 éléments

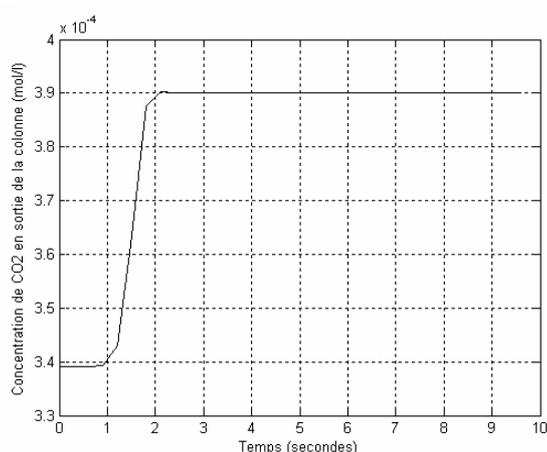


Figure 2.6 Evolution de la concentration de CO₂ en sortie de la colonne pour un maillage de 40 éléments

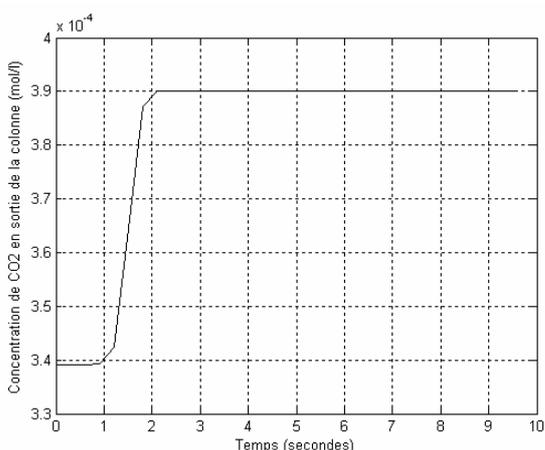


Figure 2.7 Evolution de la concentration de CO₂ en sortie de la colonne pour un maillage de 80 éléments

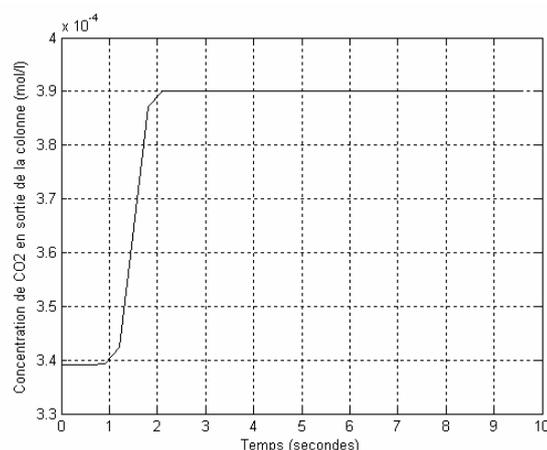


Figure 2.8 Evolution de la concentration de CO₂ en sortie de la colonne pour un maillage de 120 éléments

Nous devons analyser l'influence des variations des concentrations de CO₂ en entrée de la colonne ainsi que celle des variations du débit de gaz.

L'application de perturbations sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne induit une augmentation ou une diminution de la concentration en sortie de la colonne selon le sens de la perturbation appliquée (figures 2.9, 2.10, 2.11 et 2.12).

Les figures 2.9 et 2.10 illustrent cette influence dans le cas des variations de +5% à +20% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne.

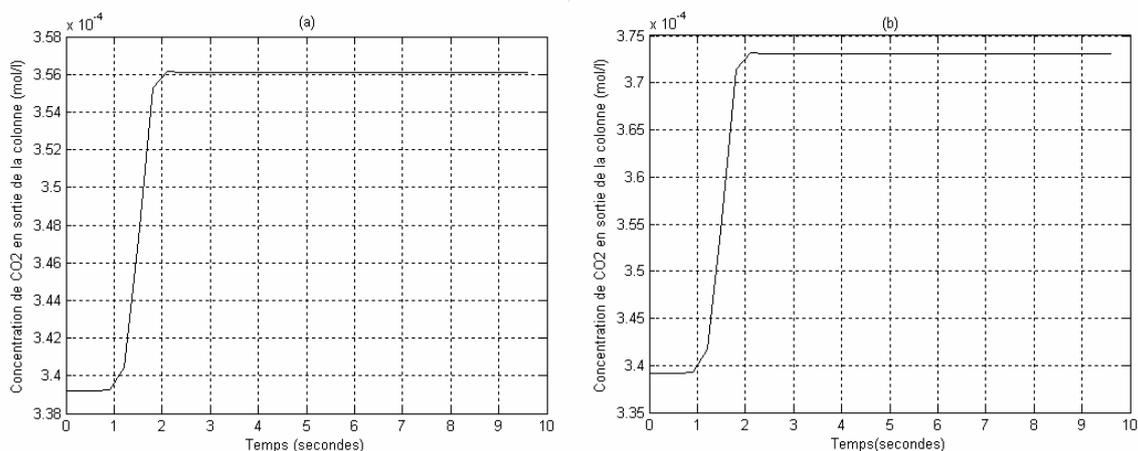


Figure 2.9 Evolution de la concentration de CO₂ en sortie de la colonne pour une perturbation de +5% (a) et de +10% (b) sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne

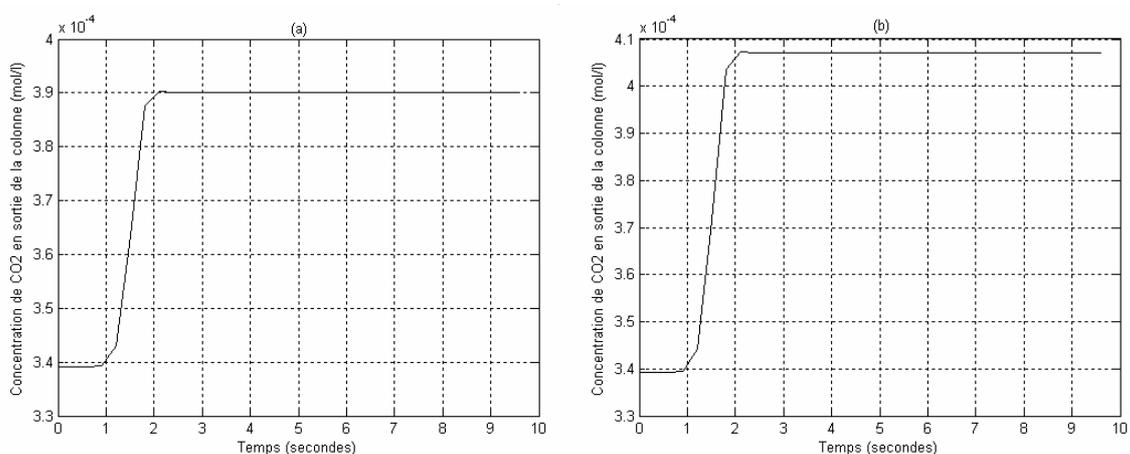


Figure 2.10 Evolution de la concentration de CO₂ en sortie de la colonne pour une perturbation de +15% (a) et de +20% (b) sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne

Les figures 2.11 et 2.12 montrent l'influence de la variation de -5% à -20% de la concentration de CO₂ en entrée de la colonne.

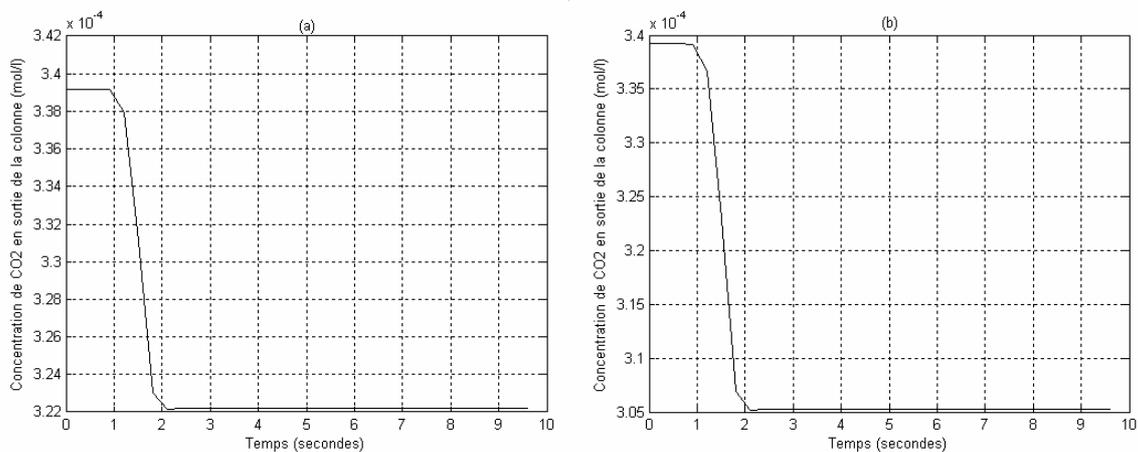


Figure 2.11 Evolution de la concentration de CO₂ en sortie de la colonne pour une perturbation de -5% (a) et de -10% (b) sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne

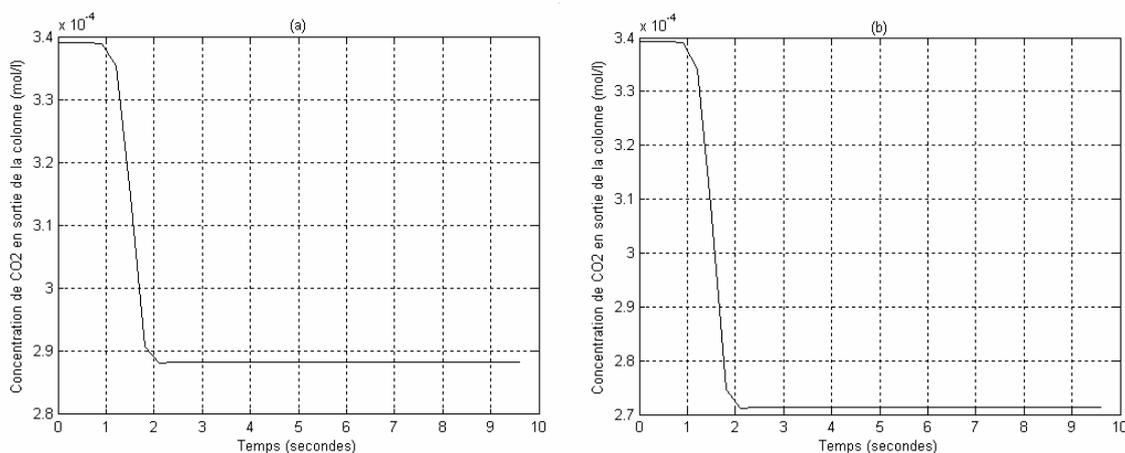


Figure 2.12 Evolution de la concentration de CO₂ en sortie de la colonne pour une perturbation de -15% (a) et de -20% (b) sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne

Les figures 2.13 et 2.14 montrent l'influence d'une variation de +5% à +30% du débit volumique de la phase gazeuse en entrée sur la concentration en sortie.

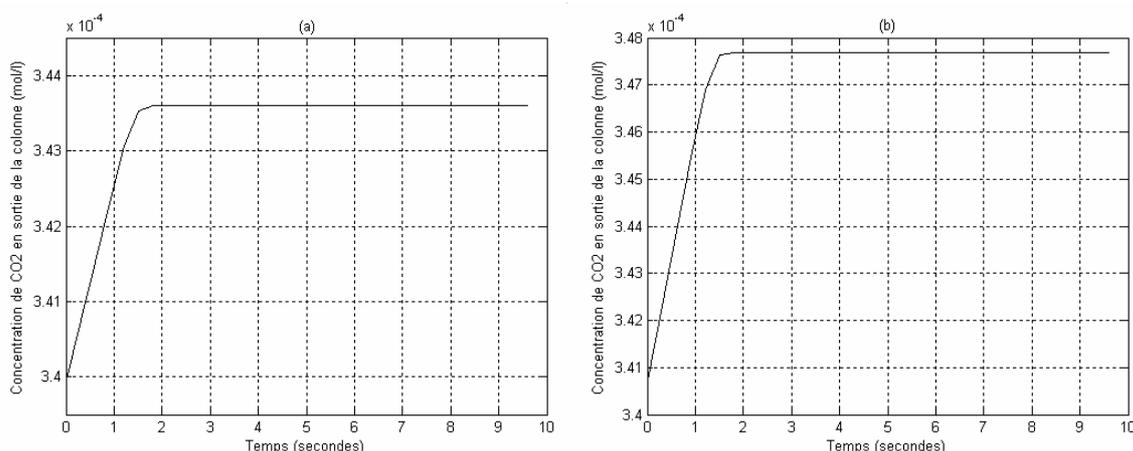


Figure 2.13 Evolution de la concentration de CO₂ en sortie de la colonne pour une perturbation de +5% (a) et de +10% (b) sur le débit volumique de la phase gazeuse

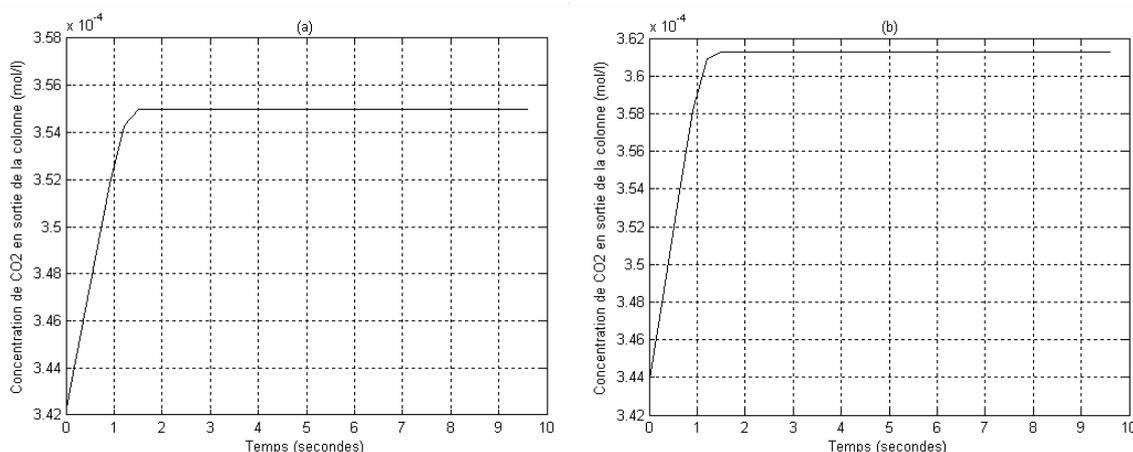


Figure 2.14 Evolution de la concentration de CO₂ en sortie de la colonne pour une perturbation de +20% (a) et de +30% (b) sur le débit volumique de la phase gazeuse

Les figures 2.15 et 2.16 montrent l'influence de la variation de -5% à -30% du débit volumique de la phase gazeuse en entrée sur la concentration en sortie.

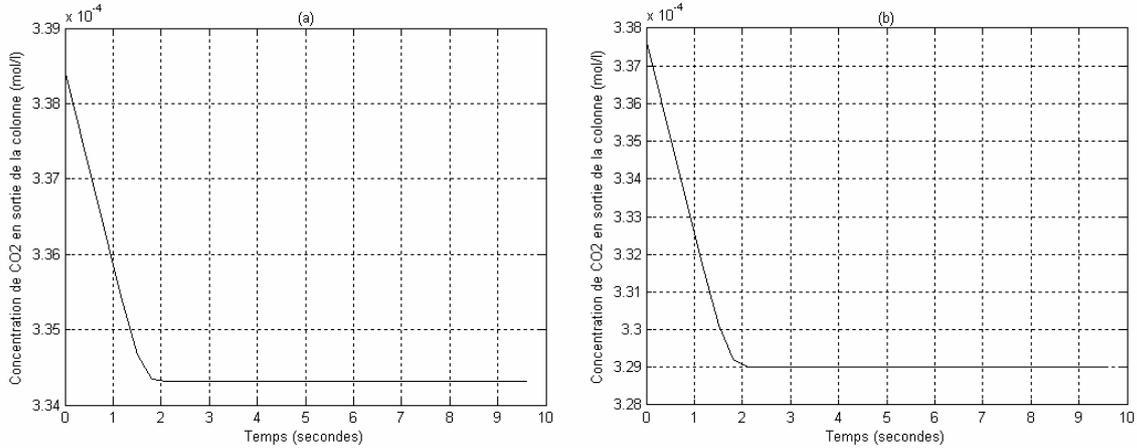


Figure 2.15 Evolution de la concentration de CO₂ en sortie de la colonne pour une perturbation de -5% (a) et de -10% (b) sur le débit volumique de la phase gazeuse

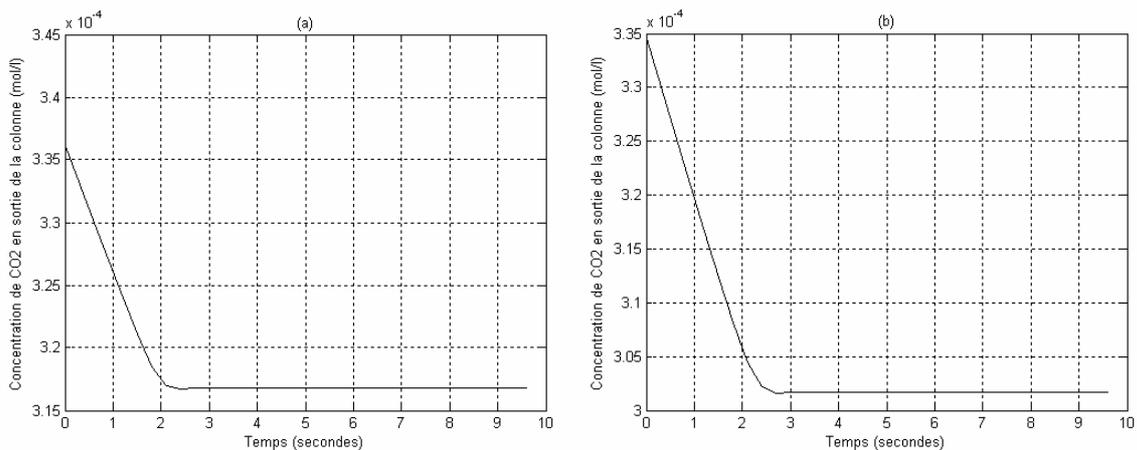


Figure 2.16 Evolution de la concentration de CO₂ en sortie de la colonne pour une perturbation de -20% (a) et de -30% (b) sur le débit volumique de la phase gazeuse

Les figures suivantes illustrent l'effet des perturbations combinées sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne et sur le débit volumique de la phase gazeuse.

La figure 2.17 présente des variations de +5% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne et de +30% sur le débit volumique de la phase gazeuse puis de +15% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne et de +10% sur le débit volumique de la phase gazeuse.

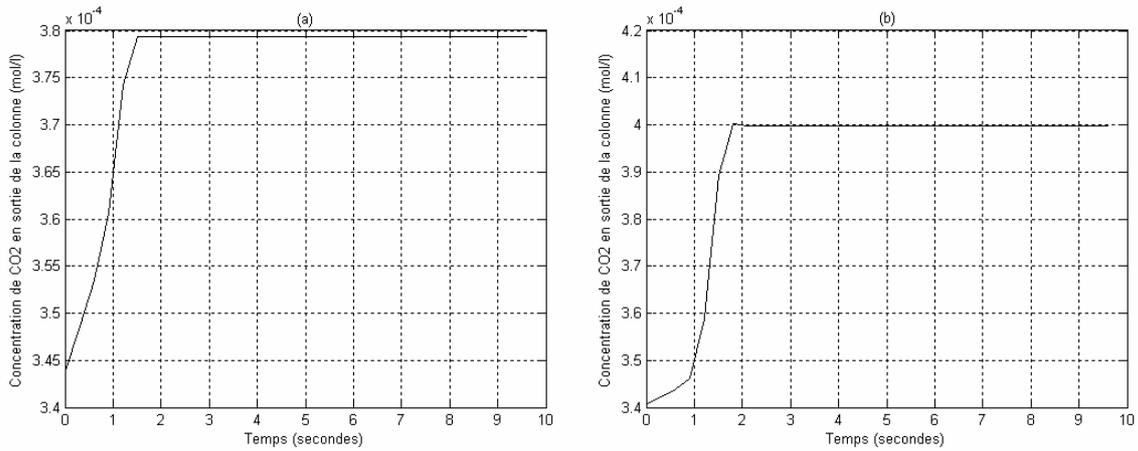


Figure 2.17 (a) Perturbation de +5% sur la concentration de CO₂ en entrée et de +30% sur le débit volumique de la phase gazeuse
 (b) Perturbation de +15% sur la concentration de CO₂ en entrée et de +10% sur le débit volumique de la phase gazeuse

La figure 2.18 présente des variations de -5% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne et de -30% sur le débit volumique de la phase gazeuse puis de -15% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne et de -10% sur le débit volumique de la phase gazeuse.

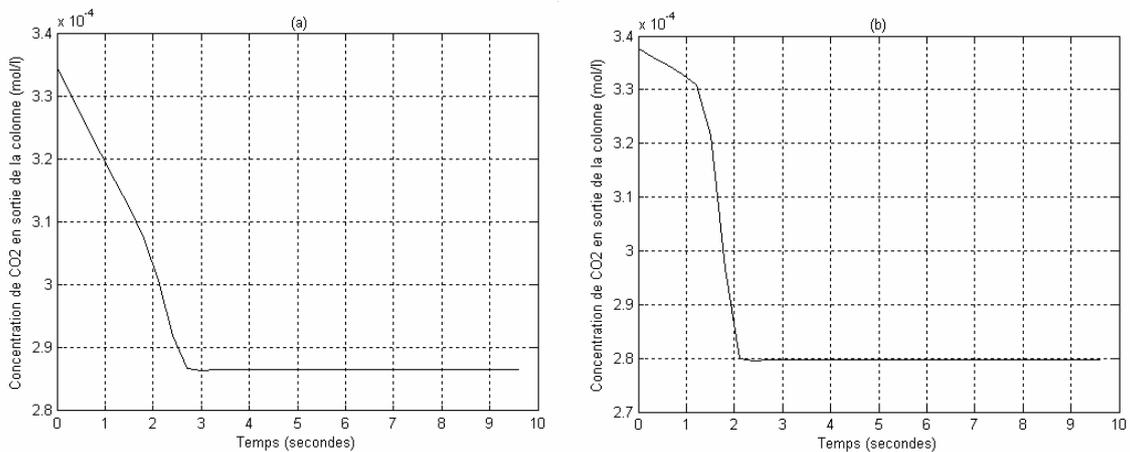


Figure 2.18 (a) Perturbation de -5% sur la concentration de CO₂ en entrée et de -30% sur le débit volumique de la phase gazeuse
 (b) Perturbation de -15% sur la concentration de CO₂ en entrée et de -10% sur le débit volumique de la phase gazeuse

La figure 2.19 présente des variations de +10% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne et de -10% sur le débit volumique de la phase gazeuse puis de +15% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne et de -30% sur le débit volumique de la phase gazeuse.

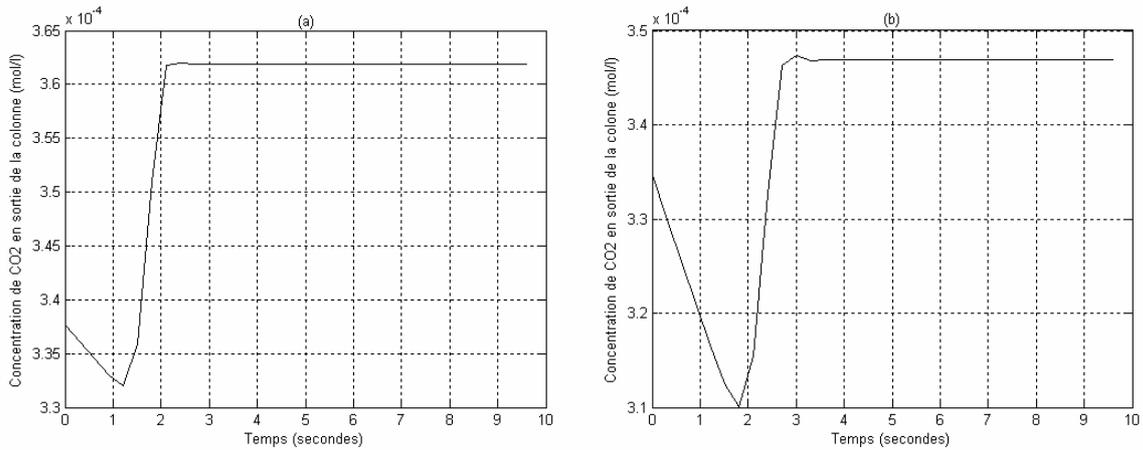


Figure 2.19 (a) Perturbation de +10% sur la concentration de CO₂ en entrée et de -10% sur le débit volumique de la phase gazeuse
 (b) Perturbation de +15% sur la concentration de CO₂ en entrée et de -30% sur le débit volumique de la phase gazeuse

La figure 2.20 présente des variations de -10% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne et de +10% sur le débit volumique de la phase gazeuse puis de -15% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne et de +30% sur le débit volumique de la phase gazeuse.

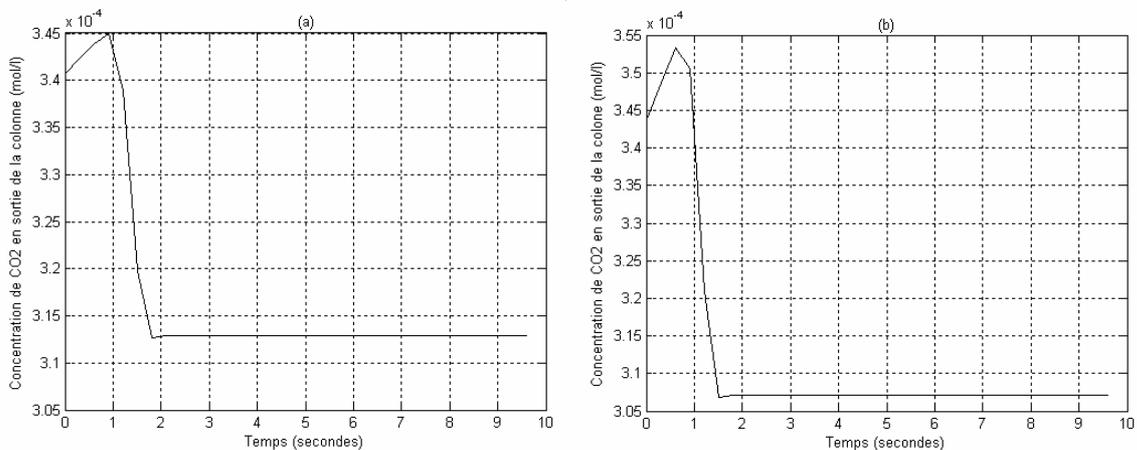


Figure 2.20 (a) Perturbation de -10% sur la concentration de CO₂ en entrée et de +10% sur le débit volumique de la phase gazeuse
 (b) Perturbation de -15% sur la concentration de CO₂ en entrée et de +30% sur le débit volumique de la phase gazeuse

La figure 2.21 décrit la caractéristique non linéaire de la colonne d'absorption obtenue en simulant cette dernière avec une variation du débit de la MEA d'une valeur minimale de 10⁻⁷ (m³/s) à une valeur maximale de 10⁻² (m³/s) en haut de la colonne.

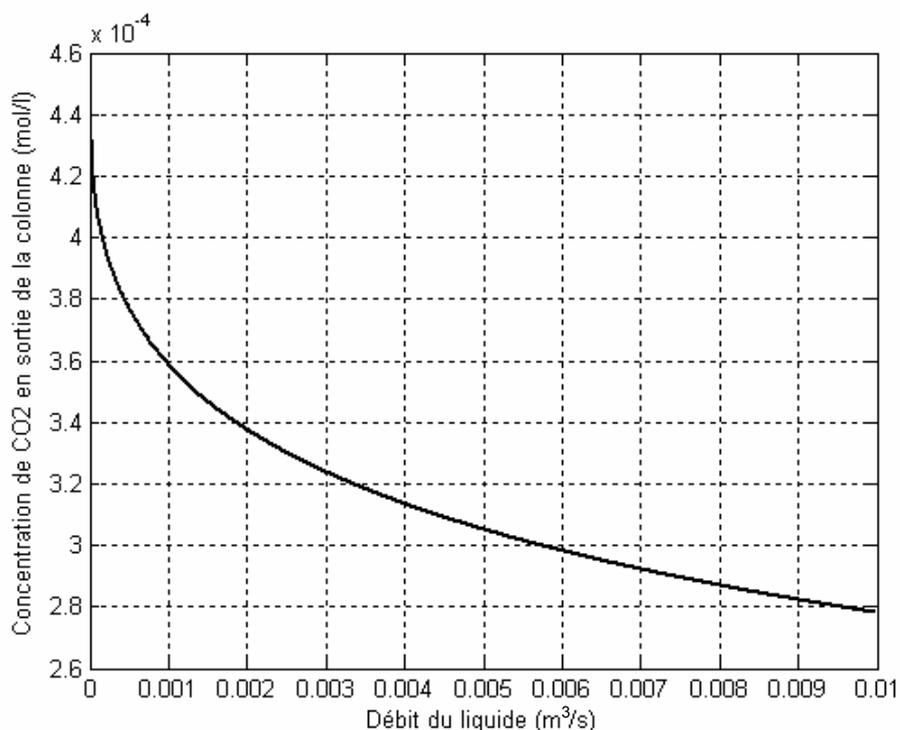


Figure 2.21 Caractéristique statique de la colonne d'absorption

2.5 Conclusion

L'objectif de ce chapitre est de présenter une simulation numérique du modèle mathématique du processus d'absorption. Cette solution est rendue possible par la méthode de discrétisation spatiale, qui, comme la méthode des éléments finis repose sur un maillage spatial.

La simulation numérique de la réponse à une rampe de débit de liquide de lavage a permis de faire apparaître la caractéristique statique du phénomène d'absorption qui est fortement non linéaire. D'autres simulations de la réponse à un échelon de perturbation sur la concentration du gaz en entrée de la colonne avec des maillages différents ont permis d'analyser l'effet du pas de discrétisation spatiale sur l'évolution de la concentration de CO₂ à la sortie de la colonne. Pour étudier les caractéristiques de ce modèle, des simulations de la réponse à des échelons de perturbation sur la concentration de CO₂ à l'entrée de la colonne et sur le débit volumique de la phase gazeuse ont été effectuées.

Les simulations effectuées montrent que la réponse de la colonne est caractérisée par un retard important entre l'apparition de perturbation sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne et la variation en sortie.

CHAPITRE 3

RÉSEAUX DE NEURONES, PRÉLIMINAIRES

Réseaux de neurones - Préliminaires

3.1 Introduction

Les réseaux de neurones ont été employés dans plusieurs applications diverses telles que la reconnaissance des formes, la prévision du marché financier et la modélisation et commande de processus. Pour cette raison, les notations et terminologies utilisées sont, parfois, différentes d'un champ de recherche à l'autre. Afin d'avoir une base uniforme pour le développement de ce mémoire, ce chapitre commence par une brève introduction sur la théorie des réseaux de neurones. Comme l'application des réseaux de neurones à la modélisation et à la commande de processus est le domaine d'intérêt principal ici, la notation et la terminologie utilisée est tirée du domaine de l'automatique.

3.2 Réseaux de neurones standard

Une représentation schématique d'un neurone standard est montrée par la figure 3.1. Comme le montre la figure, les entrées du réseau de neurones x_i sont d'abord pondérées par des poids associés w_i . Puis la somme u , de ces entrées pondérées et biais, est transformée par la fonction d'activation, f , pour former la sortie y .

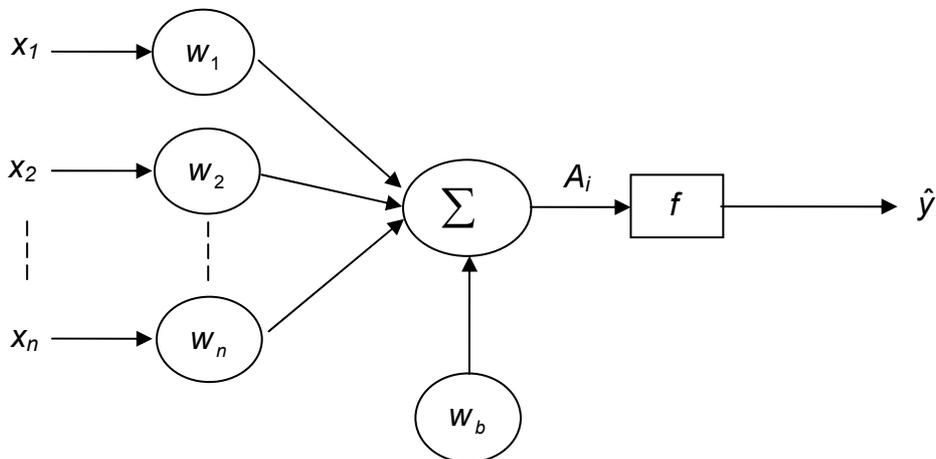


Figure 3.1 Le neurone standard

C'est la fonction d'activation (appelée aussi fonction de transfert) qui donne au réseau de neurones la capacité de modeler le rapport entre ses entrées et sorties. Un réseau à propagation directe typique consiste en plusieurs couches, chaque couche comporte un ou plusieurs neurones. Dans un tel réseau, les sorties d'une couche forme les entrées de la couche suivante.

La figure 3.2 présente un réseau de neurones à deux couches, avec n neurones dans la couche cachée à r entrées (couche j) et deux neurones dans la couche de sortie (couche k). Les informations sont acheminées depuis les entrées jusqu'aux sorties, les résultantes de chaque couche sont pondérées par des poids. La matrice des poids de la couche cachée est ici de dimension $n \times r$, et $2 \times n$ pour la couche de sortie.

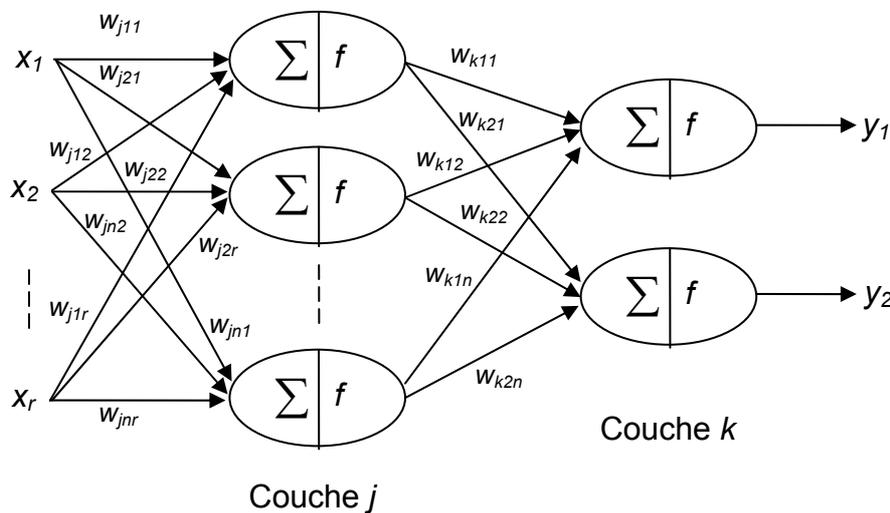


Figure 3.2 Réseau de neurones à deux couches

3.3 Apprentissage des réseaux de neurones

Dans l'apprentissage supervisé on adapte les différents poids w_{ij} pour que la sortie du réseau suive une sortie désirée avec une certaine erreur prédéfinie. Parmi les différentes approches possibles, la méthode de rétropropagation [Widr 60] [Werb 74] est l'algorithme d'entraînement le plus répandu. Cet algorithme a été développé en particulier par Rumelhart et Parkenet le Cun (1985) [You 99]. Il repose sur la minimisation de l'erreur quadratique entre les sorties calculées et celles souhaitées. Le mécanisme de la méthode de rétropropagation est présenté par la figure 3.3. Au lieu d'un réseau de neurones entier, seulement un neurone simple est montré dans la figure pour une visualisation plus facile du concept.

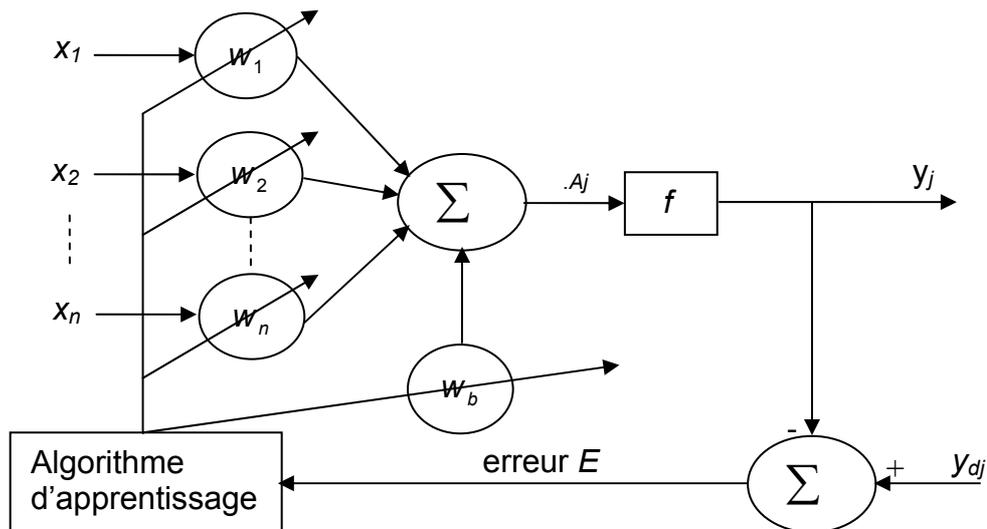


Figure 3.3 Le mécanisme de rétropropagation

3.3.1 Rétropropagation du gradient

Le terme rétropropagation du gradient provient du fait que l'erreur calculée en sortie est transmise en sens inverse vers l'entrée par le calcul des différents gradients.

Considérons le réseau de neurones multicouche de la figure 3.2. Mathématiquement, la dynamique d'un neurone j dans la première couche peut être représentée par les équations suivantes :

Entrée du neurone :

$$u_j(t) = w_{bj} + \sum_{i=1}^n w_{ij}(t)x_i(t) \quad (3.1)$$

Sortie du neurone :

$$y_j(t) = f(A_j(t)) \quad (3.2)$$

où n est le nombre d'entrées, w_{ij} est le poids associé à l'entrée i et au neurone j , $x_i(t)$ est la $i^{\text{ème}}$ entrée du neurone, f est la fonction d'activation du neurone et $y_j(t)$ est la sortie du neurone, pour chaque instant t .

La somme quadratique des erreurs de sortie du neurone j de la couche de sortie est définie par :

$$E(t) = \frac{1}{2} (y_{dj}(t) - y_j(t))^2 \quad (3.3)$$

où $y_{dj}(t)$ est la sortie désirée et $y_j(t)$ est la sortie actuelle du neurone j .

Afin de mener la méthode de la descente du gradient à réduire l'erreur donnée par l'équation (3.3), les différents poids du réseau doivent être ajustés selon leur contribution à l'erreur totale, la variation d'un poids est donc proportionnelle à sa contribution à l'erreur totale. La mise à jour des différents poids est basée sur l'équation suivante :

$$\Delta w_{ij}(t) = w_{ij}(t) - w_{ij}(t-1) = -\alpha \frac{\partial E(t)}{\partial w_{ij}(t)} \quad (3.4)$$

où, $\alpha > 0$, est un pas d'apprentissage. Pour la simplicité, il est choisi égal pour tous les poids mais il peut être également variable.

Le gradient de l'erreur de sortie dû au poids $w_{ij}(t)$, $\frac{dE(t)}{dw_{ij}(t)}$, peut être modifié comme suit :

$$\frac{\partial E(t)}{\partial w_{ij}(t)} = \frac{\partial E(t)}{\partial A_j(t)} \frac{\partial A_j(t)}{\partial w_{ij}(t)} \quad (3.5)$$

La variation pour le poids w_{ij} est : $\Delta w_{ij}(t) = \alpha \delta_j(t) x_i(t)$

avec :

$$x_i(t) = \frac{\partial A_j(t)}{\partial w_{ij}(t)}, \text{ et } \delta_j(t) = -\frac{\partial E(t)}{\partial A_j(t)}$$

L'équation (3.4) devient,

$$\Delta w_{ij}(t) = \alpha \delta_j(t) x_i(t) \quad (3.6)$$

Les poids sont adaptés comme suit :

$$w_{ij}(t) = w_{ij}(t-1) + \alpha \delta_j(t) x_i(t) \quad (3.7)$$

Pour calculer le terme $\delta_j(t)$, en procède de la manière suivante :

$$\delta_j(t) = -\frac{\partial E(t)}{\partial A_j(t)} = -\frac{\partial E(t)}{\partial y_j(t)} \frac{\partial y_j(t)}{\partial A_j(t)} \quad (3.8)$$

Mais de l'équation (3.2), $\frac{\partial y_j(t)}{\partial A_j(t)} = f'_j(A_j(t))$, ou f_j est la fonction d'activation du neurone j et f' représente la dérivée de f . Par conséquent l'équation (3.8) devient :

$$\delta_j(t) = -\frac{\partial E(t)}{\partial y_j(t)} f'_j(A_j(t)) \quad (3.9)$$

Si le neurone j est dans la couche de sortie, de l'équation (3.3), on a :

$$\frac{\partial E(t)}{\partial y_j(t)} = -(y_{dj}(t) - y_j(t)) \quad (3.10)$$

Par conséquent, la variation pour le $j^{\text{ème}}$ neurone dans la couche de sortie est :

$$\delta_j(t) = (y_{dj}(t) - y_j(t)) f'_j(A_j(t)) \quad (3.11)$$

Si le neurone est dans une couche cachée alors,

$$\frac{\partial E(t)}{\partial y_j(t)} = \sum_{k=1}^K \frac{\partial E(t)}{\partial A_k(t)} \frac{\partial A_k(t)}{\partial y_j(t)} = -\sum_{k=1}^K \delta_k(t) w_{jk}(t) \quad (3.12)$$

ou, K est le nombre de neurones dans la couche en amont qui sont connectés au neurone j de la couche cachée, par conséquent la variation pour un neurone dans une telle couche est :

$$\delta_j(t) = f'_j(A_j(t)) \sum_{k=1}^K \delta_k(t) w_{jk}(t) \quad (3.13)$$

3.3.1.1 Résumé de l'algorithme de rétropropagation

1. Appliquer un vecteur d'entrée aux nœuds d'entrées puis initialiser les poids du réseau ;

2. Faire propager l'échantillon d'apprentissage à travers le réseau ;
3. Calculer les termes d'erreur de la couche de sortie et des couches cachées en utilisant (3.11) et (3.13) respectivement ;
4. Mettre à jour les poids de la couche de sortie et couches cachées en utilisant (3.7) ;
5. Répéter ce processus jusqu'à ce que l'erreur $E(t)$ devienne acceptable (aller à 2)

3.3.1.2 Considérations pratiques

- Les poids du réseau doivent être initialisés à de petites valeurs aléatoires.
- la valeur du taux d'apprentissage α a un effet significatif sur les performances du réseau, si ce taux est petit l'algorithme converge lentement, par contre s'il est grand l'algorithme risque de générer des oscillations.
- Généralement, α doit être compris entre 0 et 1 pour assurer la convergence de l'algorithme vers une solution optimale.
- Il n'existe pas de règles permettant de déterminer le nombre de couches cachées dans un réseau donné ni le nombre de neurones dans chacune d'elles.
- Théoriquement, l'algorithme doit se terminer dès que le minimum de l'erreur commise par le réseau sera atteint, correspondant à un gradient nul, ce qui n'est jamais rencontré en pratique. C'est pourquoi un seuil est fixé à priori afin d'arrêter l'apprentissage.

3.3.1.3 Accélération de l'algorithme de rétropropagation

La convergence du réseau par rétropropagation est un problème crucial car il requiert de nombreuses itérations. Pour pallier à ce problème, un terme est rajouté pour accélérer la convergence. Ce terme appelé "momentum" est : $\gamma \Delta w_{ij}(t-1)$.

Le momentum est un moyen efficace pour accélérer l'apprentissage et aussi pour pouvoir sortir des minimums locaux [Rume 86].

La règle de mise à jour des poids devient alors :

$$\Delta w_{ij}(t) = \alpha \delta_j(t) x_i(t) + \gamma \Delta w_{ij}(t-1) \quad (3.14)$$

γ est la constante du momentum, comprise entre 0.8 et 0.9.

3.3.2 Méthode d'optimisation du second ordre

Les méthodes d'optimisation du second ordre sont des méthodes itératives de descente du gradient qui consistent à remplacer la fonction de coût par son approximation quadratique au voisinage de point courant (quadratique osculatrice ou fonction elliptique) [Haga 96] :

$$Q(h_k) = V(w_k) + g(w_k)^T h_k + \frac{1}{2} h_k^T G(w_k) h_k \approx V(w_k + h_k) \quad (3.15)$$

avec : h_k est la variation sur les poids à l'itération k .

$$V = \sum_{i=0}^N e_i^2(w_k) = \sum_{i=0}^N (y_d - \hat{y}(w_k))^2 : \text{fonction de coût} \quad (3.16)$$

On peut montrer que :

$$g(w_k) = \nabla_k V = J^T(w_k) e(w_k) : \text{Gradient.} \quad (3.17)$$

$$G(w_k) = \nabla_k^2 V = J^T(w_k) J(w_k) + S(w_k) : \text{Hessien.} \quad (3.18)$$

où J est la matrice Jacobienne telle que :

$$J(w) = \begin{bmatrix} \frac{\partial e_1(w)}{\partial w_1} & \frac{\partial e_1(w)}{\partial w_2} & \dots & \frac{\partial e_1(w)}{\partial w_n} \\ \frac{\partial e_2(w)}{\partial w_1} & \frac{\partial e_2(w)}{\partial w_2} & \dots & \frac{\partial e_2(w)}{\partial w_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial e_N(w)}{\partial w_1} & \frac{\partial e_N(w)}{\partial w_2} & \dots & \frac{\partial e_N(w)}{\partial w_n} \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

et

$$S(w) = \sum_{i=0}^N e_i(w) \nabla^2 e_i(w). \quad (3.20)$$

car :
$$\frac{\partial^2 e_i^2}{\partial w_k \partial w_l} = \frac{\partial e_i}{\partial w_k} \frac{\partial e_i}{\partial w_l} + e_i \frac{\partial^2 e_i}{\partial w_k \partial w_l}$$

Remarque : w désigne la matrice de l'ensemble des poids des couches du réseau et la variable k désigne la $k^{\text{ème}}$ itération.

3.3.2.1 Algorithme de Newton

La méthode de Newton consiste à calculer w_{k+1} de manière à minimiser $Q(h_k)$ de l'équation (3.15). On déduit la formule itérative,

$$w_{k+1} = w_k - [G(w_k)]^{-1} g(w_k) \quad (3.21)$$

Le minimum existe si le Hessien $G(w_k)$ est défini positif. La méthode de Newton nécessite le calcul du vecteur gradient et de l'inverse du Hessien de la fonction de coût.

Pour une fonction non linéaire quelconque, cette méthode ne converge pas nécessairement vers un minimum global. De plus, si le poids de départ w_0 est initié trop loin du minimum, la méthode ne converge pas [Batt 92].

3.3.2.2 Méthode de Gauss-Newton

A partir de l'approximation du gradient par la matrice jacobienne J et en supposant que $S(w_k)$ très petit devant $J^T(w_k)J(w_k)$, la correction des poids sera donnée comme suit :

$$w_{k+1} = w_k - [J^T(w_k)J(w_k)]^{-1} J^T(w_k)e(w_k) \quad (3.22)$$

3.3.2.3 Algorithme de Levenberg-Marquardt

Parmi les algorithmes de la famille quasi-Newton, la méthode de Levenberg-Marquardt [Marq 63] est un standard pour l'optimisation de l'erreur quadratique due à ses propriétés de convergence rapide et de robustesse ; Elle s'appuie sur les techniques de l'algorithme de Gauss-Newton [Haga 94] et consiste à approximer $S(w_k)$ de la manière suivante :

$$S(w_k) \approx \mu_k I_n \quad (3.23)$$

où : I_n est la matrice identité et

on aura donc :

$$w_{k+1} = w_k - [J^T(w_k)J(w_k) + \mu_k I_n]^{-1} J^T(w_k)e(w_k) \quad (3.24)$$

La variable μ_k est contrôlée par le ratio

$$R_k = \frac{\Delta V_k}{\Delta Q_k} \quad (3.25)$$

avec

$$\Delta V_k = V(w_k) - V(w_k + h_k) \quad \text{dénomme « actual reduction »}$$

$$\Delta Q_k = Q(0) - Q(h_k) \quad \text{dénomme « predicted reduction »}$$

L'apprentissage s'arrête lorsqu'un minimum est atteint, soit en fonction d'un critère d'arrêt sur la fonction de coût, soit sur la valeur minimale de la norme du gradient.

3.3.2.4 Résumé de l'algorithme de Levenberg-Marquardt

Initialisation des poids w_0 par une distribution uniforme et $\mu_0 > 0$

La solution est donnée par l'algorithme suivant la **k^{ème} itération** :

- 1- Déduire w_k et μ_k , calculer $g(w_k)$ et $G(w_k)$ suivant les équations (3.17) (3.18) et (3.23),
- 2- Résoudre $-g(w_k) = [J^T(w_k)J(w_k) + \mu_k I_n]h_k$,
- 3- Evaluer $V(w_k + h_k)$ et R_k ,

Calcul du paramètre μ_k

- 4- Si $R_k \leq 0.25$ alors $\mu_{k+1} = 4\mu_k$,
- 5- Si $R_k \geq 0.75$ alors $\mu_{k+1} = \frac{\mu_k}{2}$ si non $\mu_{k+1} = \mu_k$,

Calcul de la correction des poids w_k

- 6- Si $R_k \leq 0$ alors $w_{k+1} = w_k$ si non $w_{k+1} = w_k + h_k$

Les constantes pour les valeurs seuils de R_k sont empiriques.

3.4 Application à la modélisation des processus

3.4.1 Modélisation de processus

Des procédures de modélisation et d'identification sont traditionnellement employées pour établir des paramètres d'un modèle avec une structure préspecifiée. Ceci implique la collection des données entrées-sorties d'un processus puis l'utilisation d'une technique d'identification des paramètres, par exemple les moindres carrés, pour ajuster les paramètres du modèle choisi. Ces procédures sont tirées des résultats de la théorie des systèmes linéaires pour l'analyse des propriétés de stabilité et de convergence mais ne sont pas directement applicable à la modélisation des processus non linéaires.

Les réseaux de neurones sont des approximateurs universels de fonction non linéaires [Cybe 1989] [Hech 89]. Un réseau de neurones peut être considéré comme une classe de modèle boîte noire non linéaire. Les poids sont déterminés en utilisant des données entrées-sorties récoltées sur le processus. Pendant l'apprentissage, un réseau de neurone apprend le rapport entre les entrées et sorties présentées en ajustant convenablement les poids de raccordement.

A la différence des procédures d'identification traditionnelles, où l'utilisateur indique la structure du rapport entre l'entrée et la sortie, un réseau de neurones n'a pas besoin de ces spécifications mais de la description du réseau. On considère alors qu'on crée "surface traçante" des entrées aux sorties. L'apprentissage d'un réseau de neurones pour obtenir les poids appropriés pour modéliser le rapport entrée-sortie est semblable au procédé d'identification traditionnel où les paramètres d'un modèle de structure fixée sont estimés à partir des données d'entrée-sortie.

Il y a une grande diversité d'architectures de réseaux de neurones disponibles, qui incluent les réseaux de Hop Field, ceux à rétropropagation, à la contre-propagation, les réseaux récurrents etc. La structure la plus largement répandue dans les applications d'identification et de commande est celle à rétropropagation [Bhat 90] [Nare 90] où le réseau apprend le rapport $y = f(x)$ à partir des données $[x, y]$. En augmentant le nombre de couches et le nombre de neurones dans chaque couche, n'importe quel rapport d'entrée-sortie peut être modélisé en utilisant les réseaux de neurones.

3.4.2 Les étapes de la modélisation neuronale

Il y a quatre étapes dans la procédure expérimentale de la modélisation qui contribuent sensiblement à la validité du modèle neuronal résultant, ce sont :

- 1- L'acquisition d'un signal d'excitation du processus pour la récolte du fichier de données entrée/sortie.
- 2- le choix de la période d'échantillonnage T_e .
- 3- l'ajustement du réseau.
- 4- la validation du modèle.

3.4.2.1 Le signal d'excitation

La première étape de modélisation hors ligne par réseaux de neurones est la génération des données d'apprentissage et cela requiert le choix du signal d'excitation du processus. En effet, ce dernier doit exciter le processus sur la totalité de sa région de fonctionnement. Un signal généralement utilisé est le RAS (Random Amplitude Signal) qui consiste en une succession de créneaux d'amplitude variable aléatoirement sur le domaine de fonctionnement. Ce dernier est préférable au signal binaire du type SBPA qui est très utilisée pour l'identification des systèmes linéaires car qu'il agit efficacement sur toute la gamme de fonctionnement désirée du processus et prend mieux en compte les non linéarités.

3.4.2.2 Choix de la période d'échantillonnage

La période d'échantillonnage doit être choisie pour être bien adaptée à la dynamique du processus.

3.4.2.3 Ajustement du réseau

Dans ce qui suit, nous allons présenter la procédure d'ajustement du réseau de neurones modélisateur que nous allons utiliser pour l'identification du processus chimique.

3.4.2.3.1 Réglage structurel

Le réglage structurel consiste à :

- Définir le nombre d'entrées du réseau modélisateur.

- Fixer le nombre de couche ainsi que le nombre de neurones dans chaque couche.
- Définir les fonctions d'activation des neurones.

3.4.2.3.2 Réglage paramétrique

Cette phase d'apprentissage est assimilable à l'estimation des paramètres du modèle dans le cas de l'identification des systèmes linéaires. Il s'agit de déterminer les poids synaptiques et les biais optimaux permettant au réseau modélisateur de reproduire le comportement du système identifié. Cela revient à résoudre un problème d'optimisation paramétrique du critère d'erreur (3.15) par rapport aux paramètres du réseau.

3.4.2.4 Validation du modèle

La validation du modèle neuronal obtenu après apprentissage est la dernière étape du cycle d'identification, où est décidé l'adéquation du modèle ou pas. Pour ce faire, il existe plusieurs méthodes parmi lesquelles on peut citer les suivantes :

3.4.2.4.1 Test de généralisation

L'exactitude du modèle sur l'ensemble des données d'apprentissage n'est pas une évidence fiable de la validité du modèle tant que des indications de la capacité de généralisation ne sont pas données. Par conséquent, une méthode commune de validation du modèle neuronal est de diviser l'ensemble des données en données d'apprentissage et données de généralisation.

Quant au choix entre deux ou plusieurs modèles ayant été excités avec plusieurs signaux de test, on utilise l'indice de performance (PI) défini par :

$$PI_m = \sum_{i=1}^L FP_m^i, i = 1, \dots, L \quad (3.26)$$

où :

m : est l'indice du modèle et M le nombre de modèles à comparer.

FP_m^i : est la fonction de perte (erreur : $\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (y_k - \hat{y}_k)^2$) relative au signal d'excitation i

L : est le nombre de signaux d'excitation

Cependant, la simple sommation ne prend pas en compte le rapport des amplitudes des fonctions de perte d'un modèle avec celles des autres. Une alternative peut être formulée comme suit :

$$NPI_m = \sum_{i=1}^L \left(\frac{FP_m^i}{\sum_{m=1}^M FP_m^i} \right) \quad i = 1, \dots, L \text{ et } m = 1, \dots, M \quad (3.27)$$

NPI_m : indice de performance normalisé

Notons qu'il est souhaitable de valider le modèle en utilisant des signaux test différents qui doivent exciter le modèle sur une variété de points d'opération et/ou de fréquences.

3.4.2.4.2 Test de corrélation

Un ensemble de tests statistiques ont été proposés comme alternative pour vérifier l'adéquation d'un modèle. Elles ont été introduites par BILLINGS et VOON (1986) [Rand 95] pour les modèles non linéaires et appliquées sur les réseaux de neurones par CHEN et al, (1990 a) [Rand 95].

Elles reposent sur le principe de perfection du modèle (modèle non biaisé). En effet, l'erreur de prédiction du modèle ne doit pas être corrélée avec les combinaisons linéaires et non linéaires de ses valeurs passées et de celles des entrées du modèle [Rand 95].

3.4.3 Modélisation de la colonne d'absorption

Bien qu'il y ait beaucoup d'applications de réseaux de neurones pour la modélisation et la commande rapportées dans la littérature, il n'existe aucune méthode standard pour déterminer la structure et le nombre de neurones à utiliser pour une application particulière. La taille du réseau est souvent choisie pour d'une seule couche cachée car un tel réseau peut modéliser n'importe quel rapport entrée-sortie non linéaire avec un degré d'exactitude donné [Cybe 89] [Hech 89]. Cependant

le nombre de neurones dans la couche de sortie d'un tel réseau est égal au nombre de sorties du processus à modéliser, le choix du nombre de neurones pour la couche cachée est laissé à la discrétion de l'utilisateur. La procédure habituelle pour choisir le nombre de neurones dans la couche cachée est de fixer une première taille et puis vérifier la valeur de l'erreur quand le processus d'apprentissage est terminé. Si non satisfaisant, la taille est mise à jour et le processus entier est répété jusqu'à ce que le réseau réponde à nos tolérances sur l'erreur.

Pour la récolte du fichier de données (entrées/sorties), la simulation du processus s'est effectuée sous les conditions données au tableau 1.1. Le signal d'excitation du processus est un RAS (Random Amplitude Signal) d'amplitude variable aléatoirement, et de longueur fixée à 4 secondes pour chaque créneau. La période de discrétisation (échantillonnage) est fixée à 0.5 s.

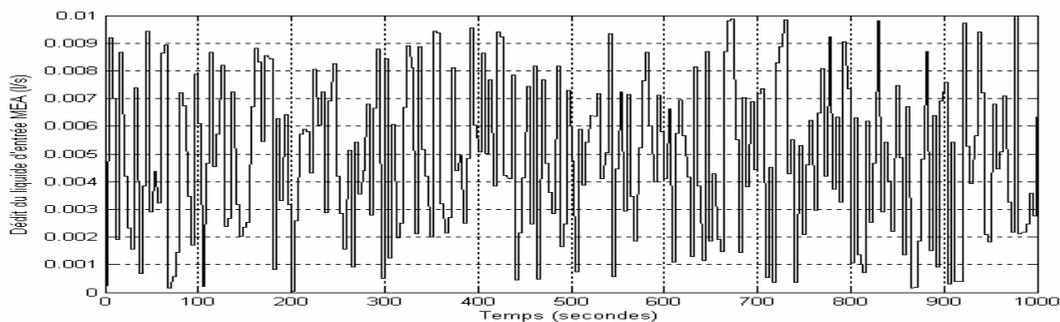


Figure 3.4 Signal d'excitation (RAS)

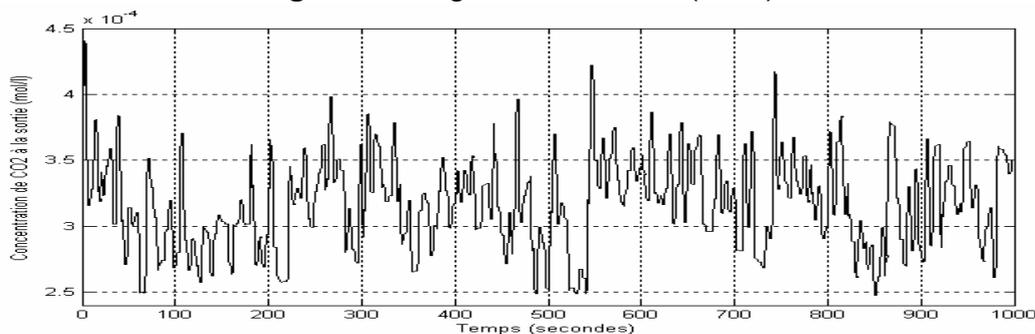


Figure 3.5 Signal de sortie de la colonne d'absorption

Le réseau modélisateur utilisé se compose d'une seule couche cachée (Figure 3.6): la couche de sortie contient un seul neurone calcule la sortie du réseau \hat{y} , la couche cachée contient 15 neurones quant à celle d'entrée reçoit les entrées $(u(k), \dots, u(k - m + 1), y(k), \dots, y(k - n + 1))$.

Nous prenons $n = m$.

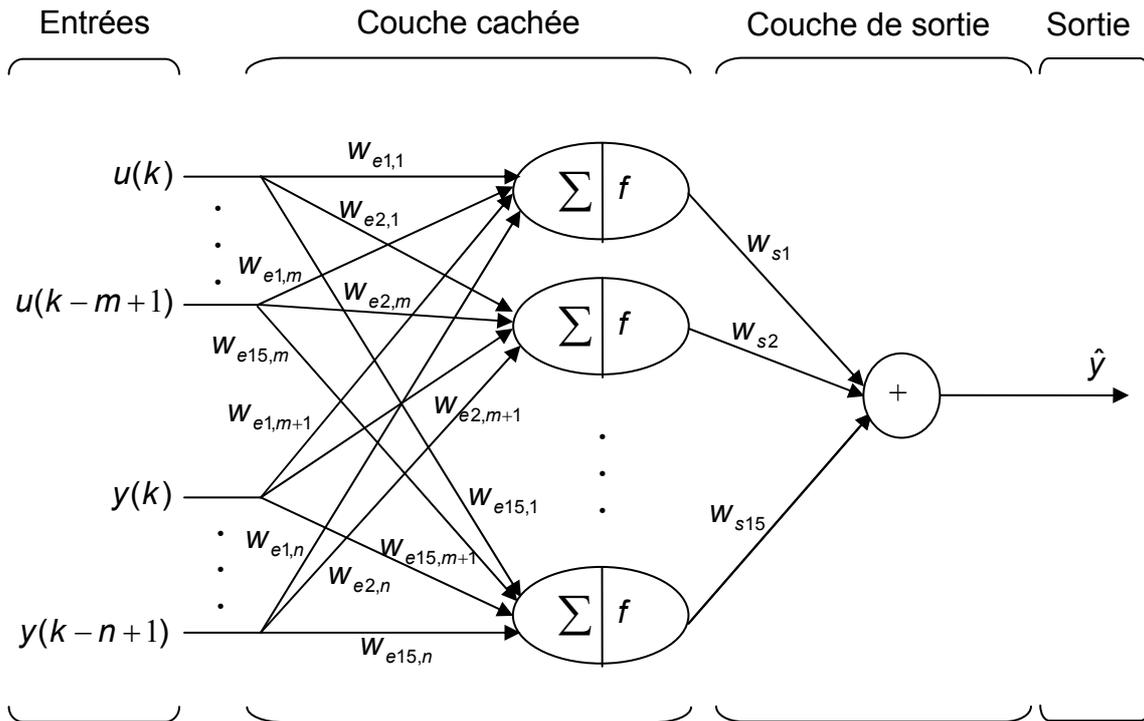


Figure 3.6 Réseau de neurones à une seule couche cachée

Etant donné que l'ordre du processus (n) est inconnu et qu'il est lié au nombre d'entrées du réseau nous avons fait varier la topologie de la couche d'entrée telle que $n = 1, 2, 3, 4$.

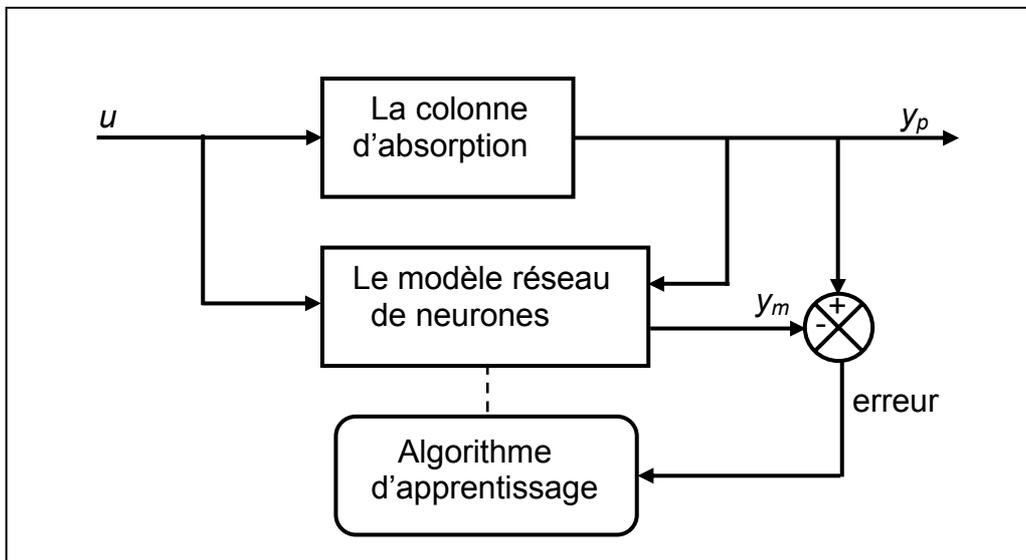


Figure 3.7 Schéma de modélisation de la colonne d'absorption

Pour l'apprentissage, le nombre d'échantillons est fixé à 1000 et un maximum d'itérations à 1000. Le schéma de modélisation est donné par la figure 3.7 et l'algorithme d'apprentissage utilisé est celui de Levenberg-Marquardt.

3.4.3.1 Résultats de modélisation de la colonne d'absorption

Quatre modèles ont été élaborés :

- Modèle1 d'ordre 1. (deux entrées)
- Modèle2 d'ordre 2. (quatre entrées)
- Modèle3 d'ordre 3. (six entrées)
- Modèle3 d'ordre 4. (huit entrées)

Voici ci-dessous les résultats d'apprentissage des quatres modèles :

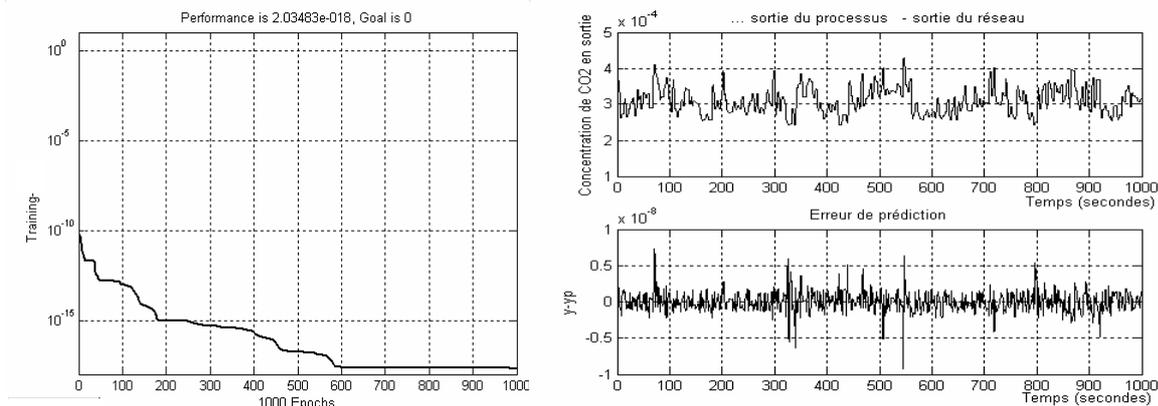


Figure 3.8 Apprentissage du modèle1

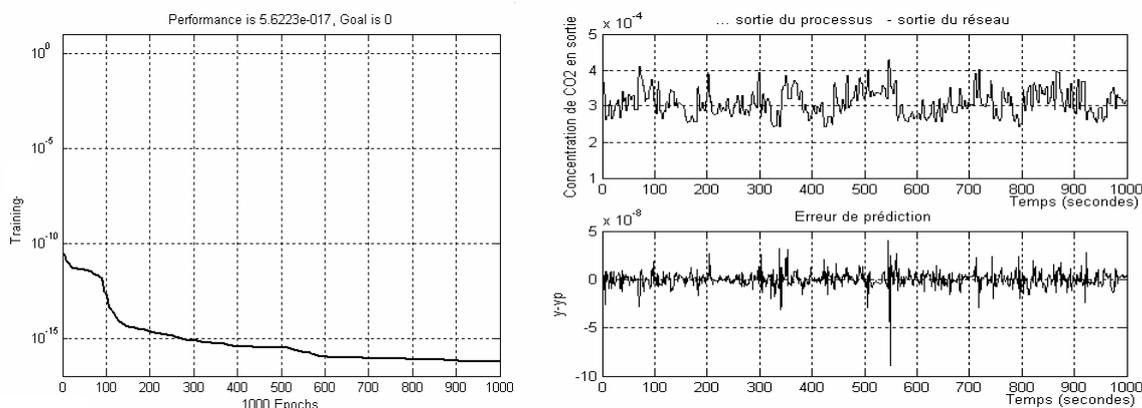


Figure 3.9 Apprentissage du modèle2

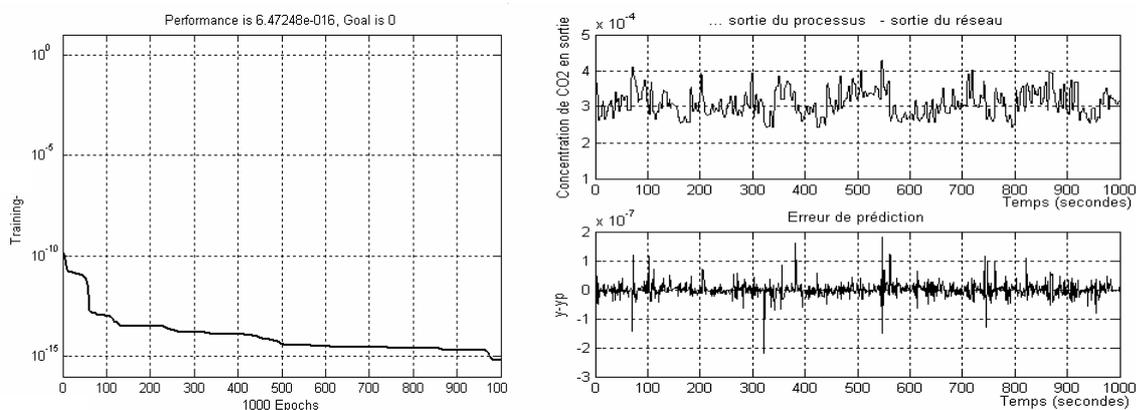


Figure 3.10 Apprentissage du modèle3

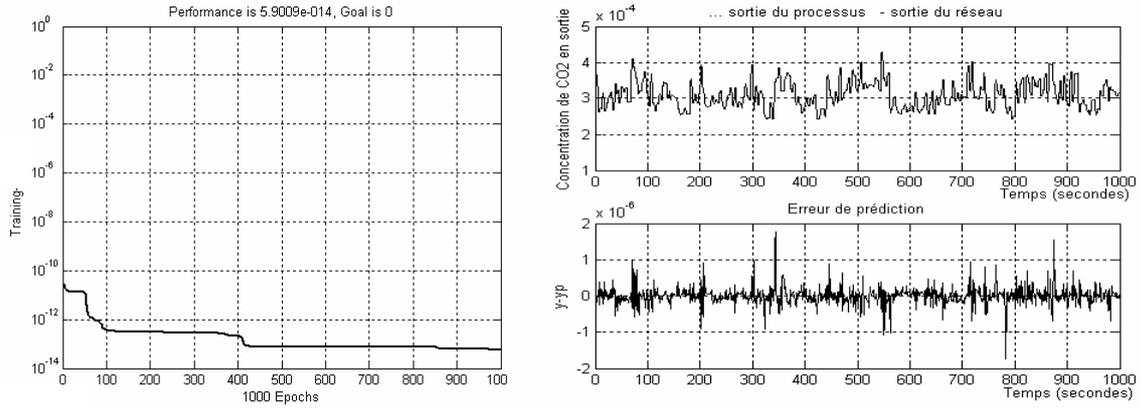


Figure 3.11 Apprentissage du modèle4

3.4.3.2 Tests de Validation

Nous avons utilisé des tests de généralisation pour valider les modèles, deux RAS y sont utilisés ajoutés à celui de l'apprentissage ; l'un est de longueur de créneaux de 3 secondes et l'autre de longueur de créneaux de 6 secondes.

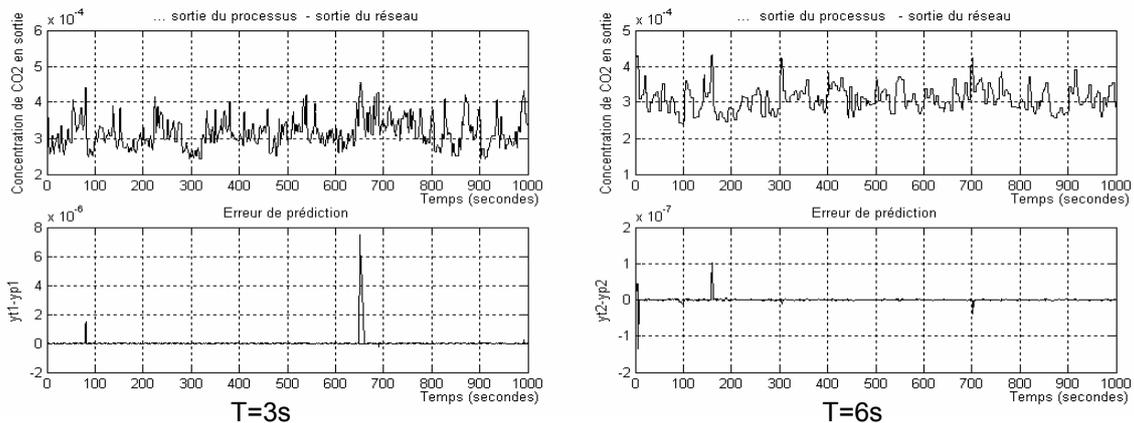


Figure 3.12 Réponse de modèle1 aux signaux tests et erreur de prédiction

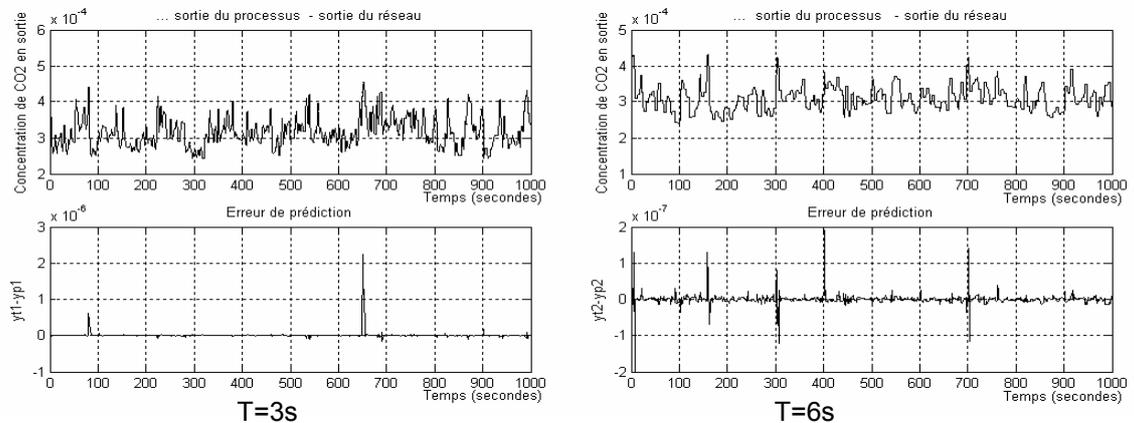


Figure 3.13 Réponse de modèle2 aux signaux tests et erreur de prédiction

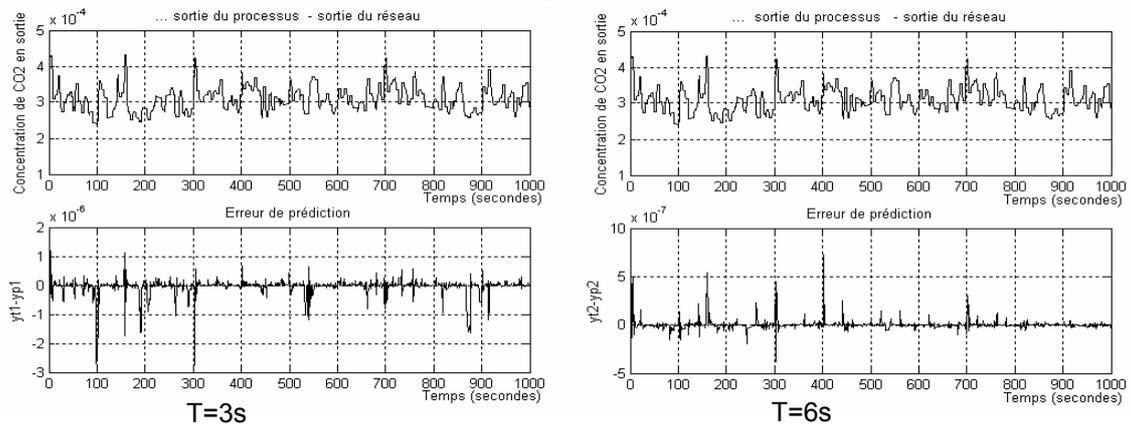


Figure 3.14 Réponse de modèle3 aux signaux tests et erreur de prédiction

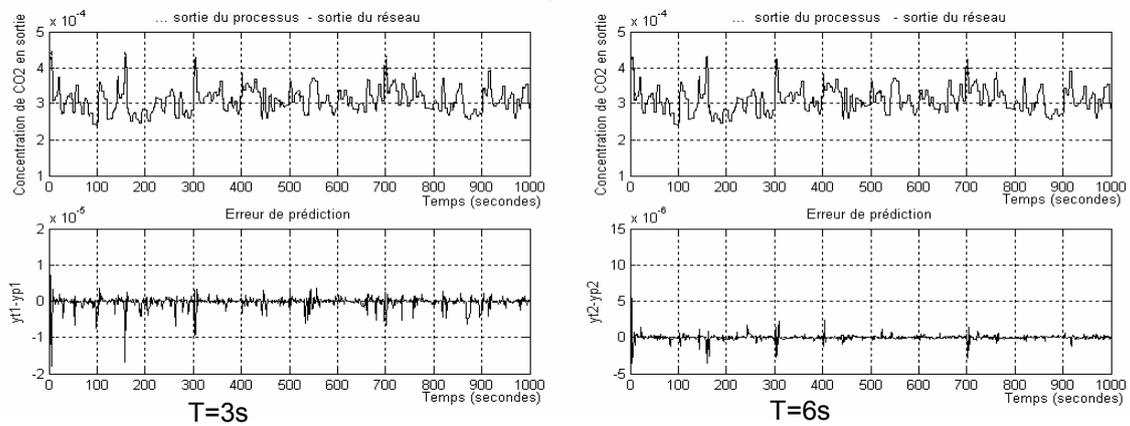


Figure 3.15 Réponse de modèle4 aux signaux tests et erreur de prédiction

Pour le choix du modèle le plus adéquat, nous nous sommes appuyés sur les indices de performances PI et NPI. Les résultats sont donnés au tableau 3.1.

	Modèle1	Modèle2	Modèle3	Modèle4
PI	$2.1133 \cdot 10^{-13}$	$1.3656 \cdot 10^{-14}$	$1.0732 \cdot 10^{-13}$	$3.2936 \cdot 10^{-12}$
NPI	0.0662	0.0057	0.0522	2.875

Tableau 3.1 indices de performance et indices de performance normalisés

Finalement, nous sommes parvenus à choisir le modèle d'ordre 2 (modèle2) vu qu'il présente de meilleures performances.

3.5 Conclusion

Les réseaux de neurones formels possèdent une propriété remarquable qui est à l'origine de leur intérêt pratique dans des domaines très divers : ce sont des approximateurs universels parcimonieux. La propriété d'approximation peut être énoncée de la manière suivante : toute fonction bornée suffisamment régulière peut être approchée avec une précision arbitraire, pour un domaine fini de l'espace de définition de la fonction, par un réseau de neurones comportant une couche de neurones cachés en nombre fini, possédant tous la même fonction d'activation, et un neurone de sortie linéaire. Cette propriété de parcimonie est précieuse dans les applications industrielles.

L'apprentissage est vraisemblablement la propriété la plus intéressante des réseaux neuronaux, cependant il existe plusieurs algorithmes utilisés pour faire l'apprentissage des réseaux multicouches, en général, les méthodes du second ordre assure une convergence plus rapide que celle du premier ordre pour les réseaux dont l'apprentissage est par paquets (type batch), par contre pour les réseaux dont l'apprentissage est incrémental (récursif) les méthodes du premier ordre assure une convergence plus rapide que celle du second ordre.

L'application des réseaux de neurones pour l'identification de systèmes dynamiques a été couronnée de succès. Dans le cadre de ce travail et pour ce qui est de l'identification, on s'est intéressé à la propriété d'approximation universelle de réseau de neurones. Pour ce qui est de la commande proprement dite, c'est le réseau estimateur qui sera à la base de l'élaboration de la loi de commande. En effet, cette dernière découle soit d'un contrôleur neuronal dont les poids dépendent directement de ceux du réseau estimateur soit d'un algorithme minimisant, cette fois, l'écart entre la grandeur de consigne et la grandeur de sortie prédite par le modèle neuronal.

CHAPITRE 4

CONTRÔLE DE LA COLONNE D'ABSORPTION

Contrôle de la colonne d'absorption

4.1 Introduction

Dans l'industrie les opérateurs peuvent assurer le fonctionnement des colonnes d'absorption sans l'aide d'algorithme de commande ou de modèle. Par contre l'opération manuelle à ces limites : variabilité importante du produit, utilisation excessive de réactif chimique, etc. Des algorithmes de commande ont donc été mis en place pour optimiser le rendement du procédé d'absorption.

L'objectif de ce chapitre est de présenter l'application et l'adaptation d'algorithme connus à la régulation de la commande de la colonne d'absorption. La première partie du chapitre présente l'application de la commande PI classique pour le contrôle du processus d'absorption. La deuxième partie présente l'adaptation des algorithmes de commande par équivalence certaine neuronale et de commande prédictive neuronale, qui permettent d'améliorer la rapidité du processus et de tenir compte efficacement des perturbations. Finalement, la dernière portion de ce chapitre présente une étude comparative des différentes commandes appliquées aux control de la colonne d'absorption.

4.2 Régulation PI de la colonne d'absorption

Le processus d'absorption de CO_2 est contrôlé, d'abord, en utilisant une approche linéaire standard PI qui est largement répondeue dans l'industrie. Cette stratégie linéaire est appliquée pour des fins de comparaison avec la commande neuronale.

4.2.1 Description de la commande PID

De nombreux problèmes de commande peuvent être traités à l'aide d'une commande PID (proportionnelle, intégrale, dérivée), tant que les exigences de performances ne sont pas élevées. L'algorithme PID est un régulateur standard pour la commande des procédés. Il est aussi la base de nombreux systèmes de commande. La version classique de l'algorithme peut s'écrire sous la forme (4.1).

$$u(t) = K_p e(t) + K_i \int e(t) dt + K_v \frac{d e(t)}{dt} \quad (4.1)$$

dans laquelle $u(t)$ est la variable de commande, $e(t)$ représente l'erreur définie par :

$$e(t) = y_d(t) - y(t) \quad (4.2)$$

$y_d(t)$ et $y(t)$ étant respectivement la valeur de la référence et la sortie du procédé.

Le diagramme fonctionnel pour ce type de commande est représenté par la figure 4.1.

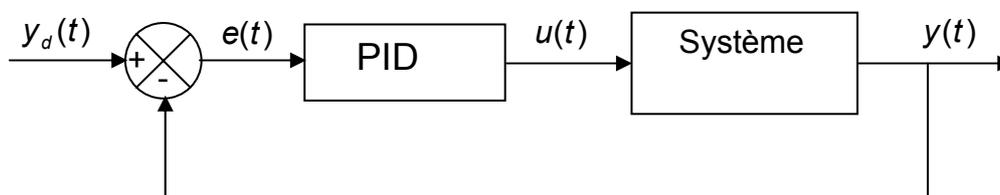


Figure 4.1 Schéma fonctionnel de la commande PID

De nombreuses méthodes de recherche des paramètres de régulateur PID pour les systèmes linéaires sont basées sur la réponse transitoire. La règle de Ziegler et Nichols (1942) [Zieg 42] est une méthode empirique qui permet de déterminer les paramètres du régulateur à partir de la réponse soit à un échelon de consigne, soit lors du phénomène de pompage.

Dans notre cas les coefficients du régulateur sont ajustés au vu des résultats obtenus en simulation.

4.2.2 Commande PI de la colonne d'absorption

La loi de commande PI est donnée sous la forme suivante :

$$u_l(k) = u_{l_{nom}} + K_p e(k) + K_i \sum e(k-1) \quad (4.3)$$

avec $u_{l_{nom}}$ est le débit nominal du liquide de lavage, K_p et K_i sont, respectivement, les gains de l'action proportionnelle et intégrale.

Une action dérivée ne nous a pas semblé nécessaire car la réponse n'est pas oscillatoire.

Le schéma de principe du système de commande est représenté par la figure 4.2

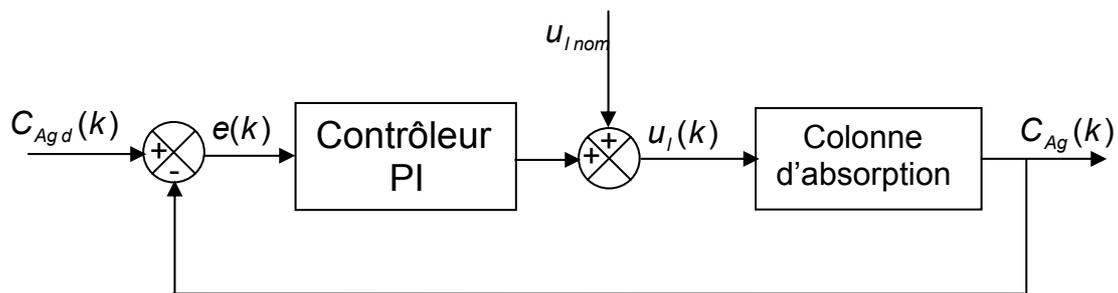


Figure 4.2 Commande PI de la colonne d'absorption

Nous avons appliqué la régulation PI au modèle de la colonne d'absorption tel que développé au Chapitre 1. Pour faciliter la simulation du processus, nous avons choisi une commande échantillonnée. La période d'échantillonnage est fixée à 0.5 seconde et la teneur réglée moyenne en sortie est de $3.39 \cdot 10^{-4}$ mol de CO_2 par litre de gaz. Le choix des paramètres de PI va nous permettre d'obtenir les réponses désirées. Après plusieurs essais de simulation, nous avons opté pour les valeurs suivantes :

$$K_p = 8, \quad K_i = 10.$$

4.2.3 Résultats de simulation

Les figures 4.3 et 4.4 montrent l'évolution de la concentration de CO_2 pour un changement de consigne. On remarque que pour un changement de consigne de $3.39 \cdot 10^{-4}$ mol/l à $3.8 \cdot 10^{-4}$ mol/l, la sortie du système atteint la réponse désirée au bout de 4 secondes par contre dans le cas d'un changement de $3.39 \cdot 10^{-4}$ mol/l à $3.0 \cdot 10^{-4}$ mol/l, la concentration de CO_2 en sortie de la colonne mis environs 30 secondes pour atteindre la référence désirée.

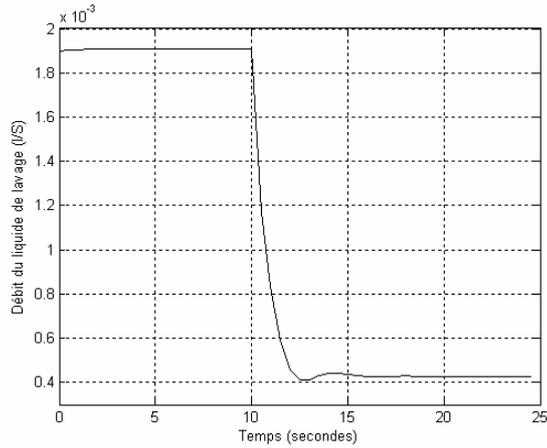
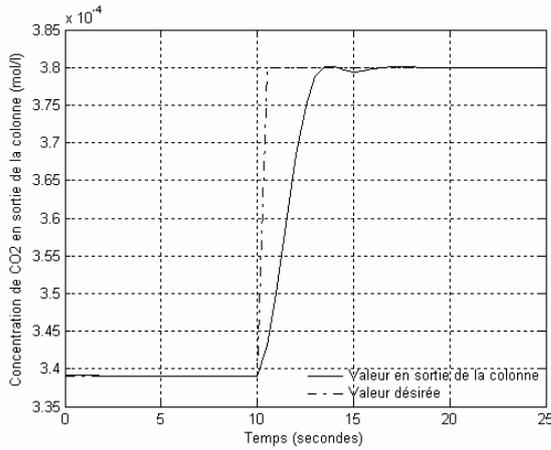


Figure 4.3 Réponse du système pour un changement de consigne de $3.39 \cdot 10^{-4}$ mol/l à $3.8 \cdot 10^{-4}$ mol/l.

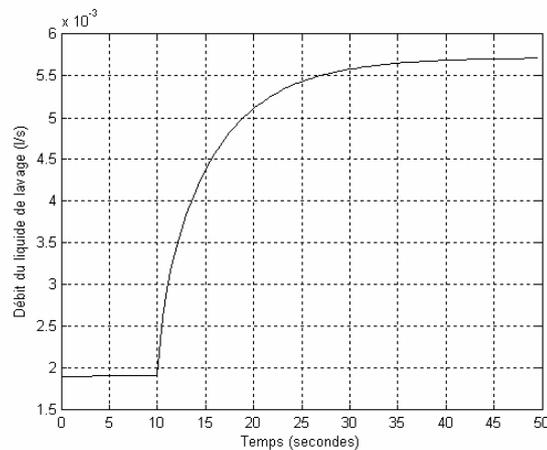
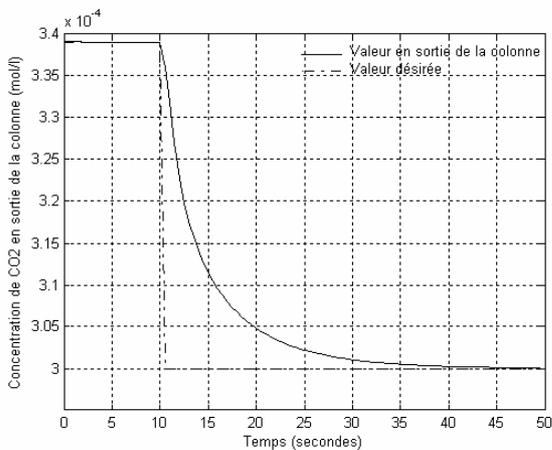


Figure 4.4 Réponse du système pour un changement de consigne de $3.39 \cdot 10^{-4}$ mol/l à $3.0 \cdot 10^{-4}$ mol/l.

Afin de tester la robustesse de la commande par rapport aux perturbations. On fait des variations sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne ainsi que sur le débit volumique de la phase gazeuse. Les figures 4.5 et 4.6 présentent la réponse du système soumis à des perturbations de +5% et de +15 % sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne C_{ge} .

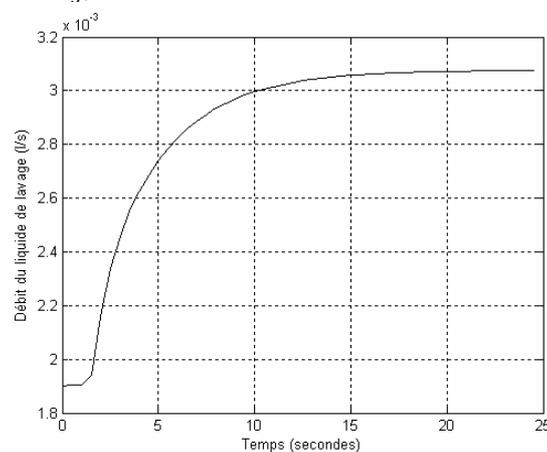
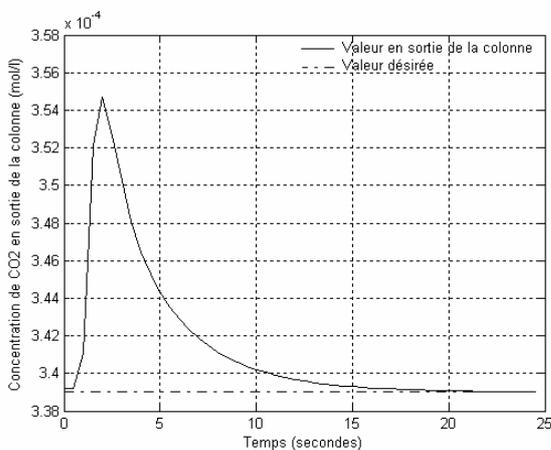


Figure 4.5 Régulation PI pour une perturbation de +5% sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne

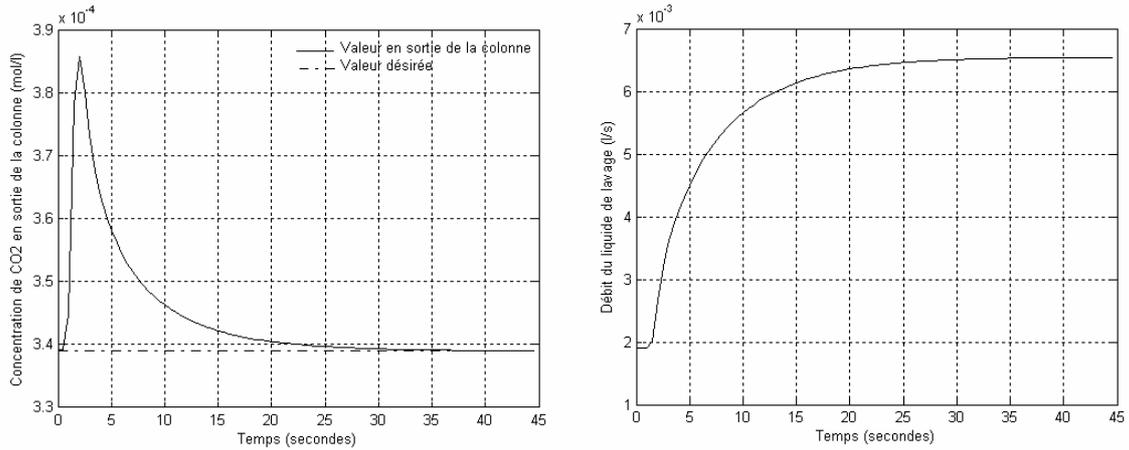


Figure 4.6 Régulation PI pour une perturbation de +15% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne

Les figures 4.7 et 4.8 présentent la réponse du système soumis à des perturbations de -5% et de -15 % sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne C_{ge} .

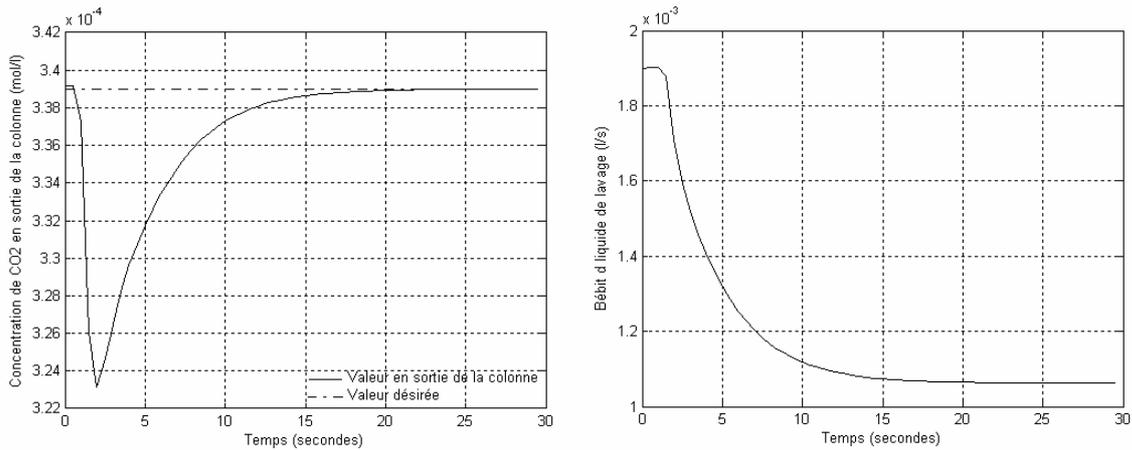


Figure 4.7 Régulation PI pour une perturbation de -5% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne

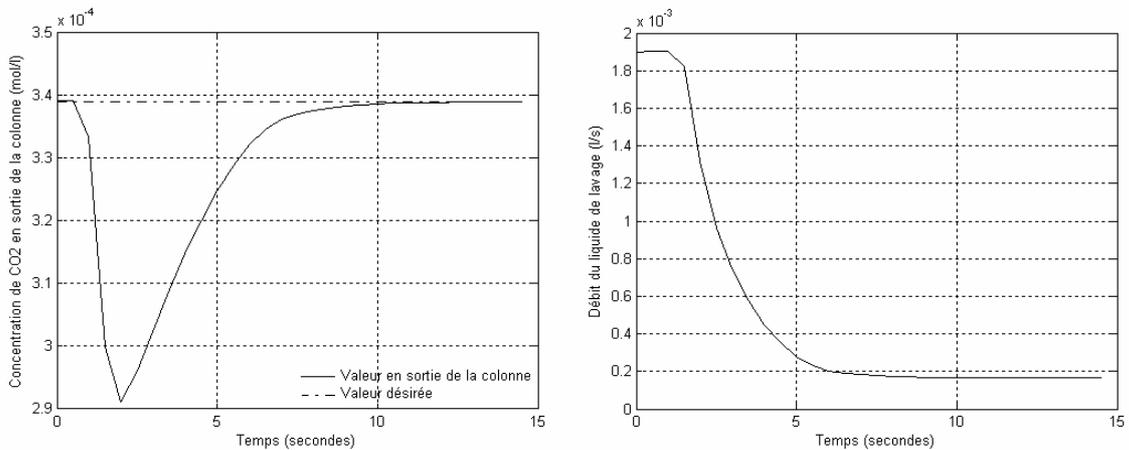


Figure 4.8 Régulation PI pour une perturbation de -15% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne

Les figures 4.9 et 4.10 présentent la réponse du système soumis à des perturbations de +10% et de +30 % sur le débit volumique de la phase gazeuse G .

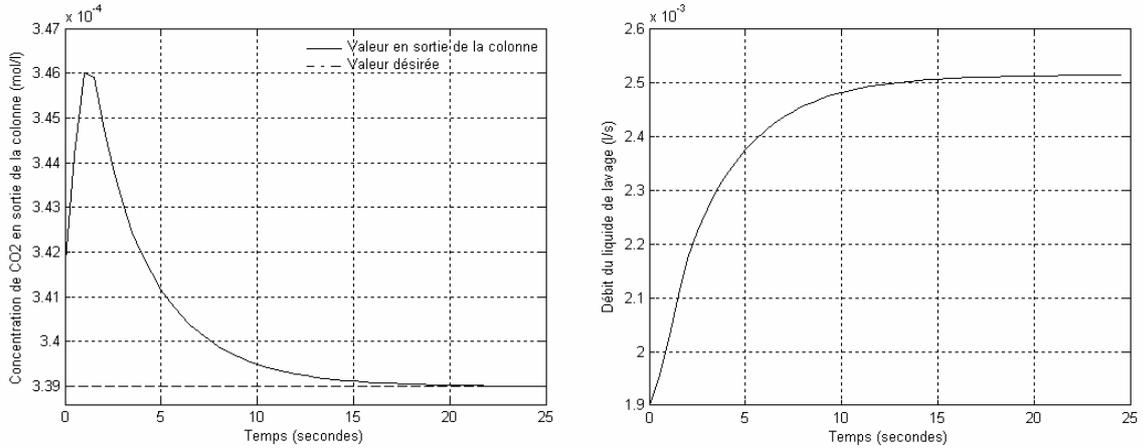


Figure 4.9 Régulation PI pour une perturbation de +10% sur le débit volumique de la phase gazeuse

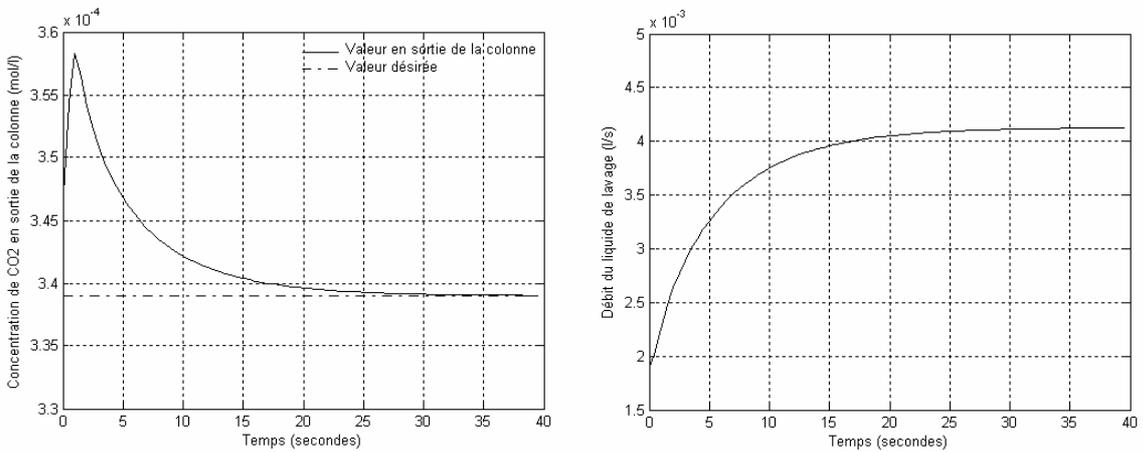


Figure 4.10 Régulation PI pour une perturbation de +30% sur le débit volumique de la phase gazeuse

Les figures 4.11 et 4.12 présentent la réponse du système soumis à des perturbations de -10% et de -30 % sur le débit volumique de la phase gazeuse G .

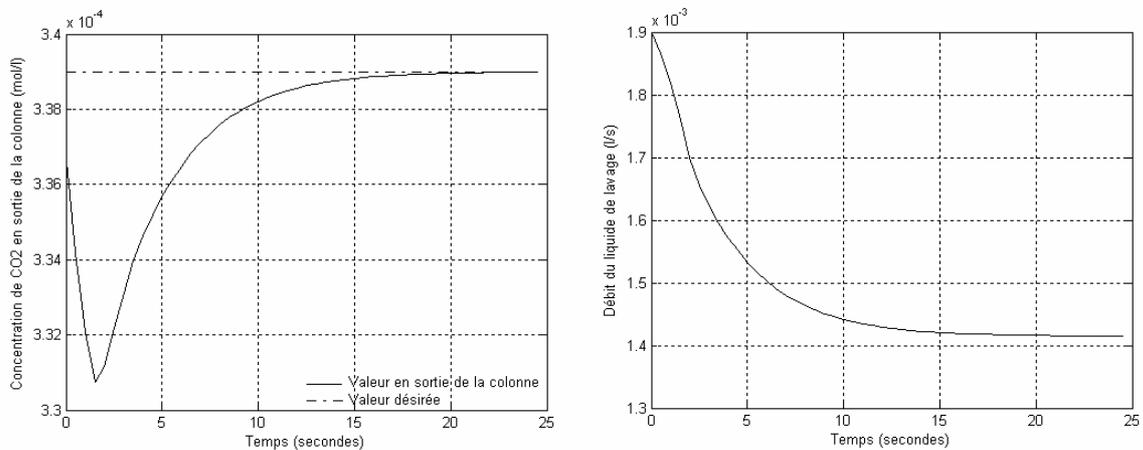


Figure 4.11 Régulation PI pour une perturbation de -10% sur le débit volumique de la phase gazeuse

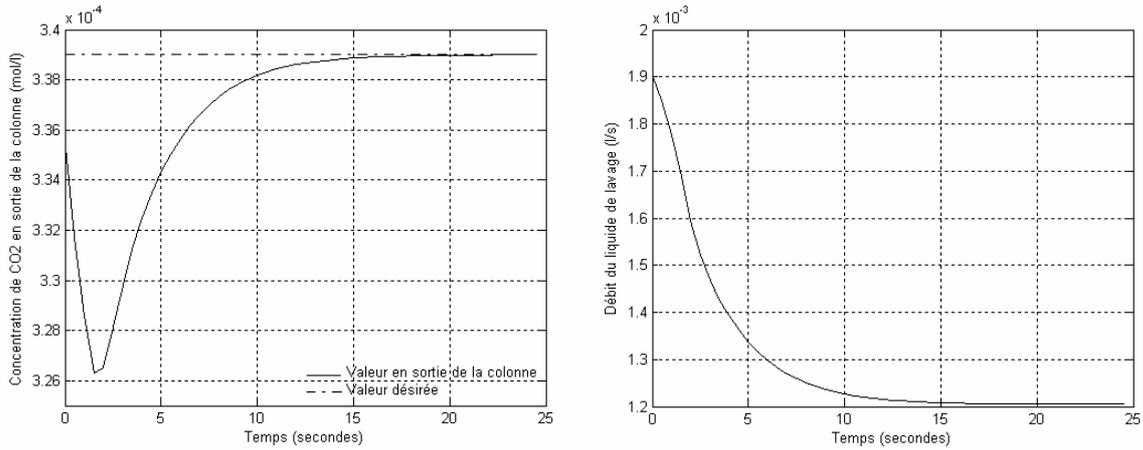


Figure 4.12 Régulation PI pour une perturbation de -30% sur le débit volumique de la phase gazeuse

Les figures 4.13, 4.14, 4.15 et 4.16 présentent la réponse du système soumis à des perturbations mixtes, sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne et sur le débit volumique de la phase gazeuse G .

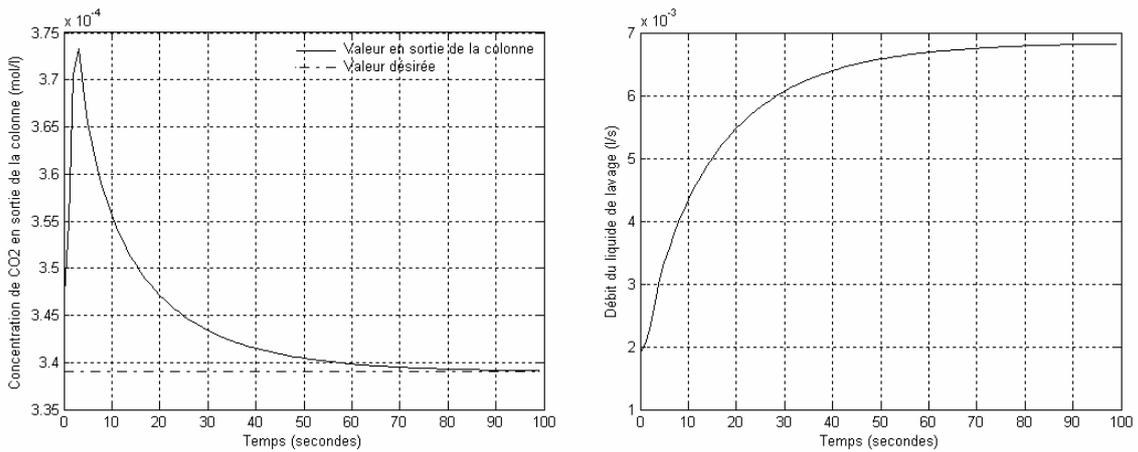


Figure 4.13 Régulation PI pour une perturbation de +5% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne et une perturbation de +30% sur le débit volumique de la phase gazeuse

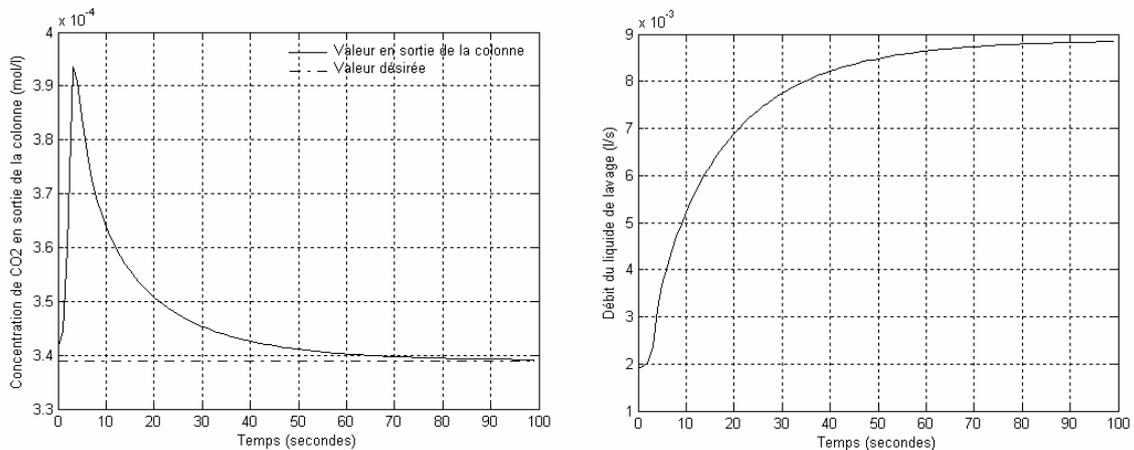


Figure 4.14 Régulation PI pour une perturbation de +15% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne et une perturbation de +10% sur le débit volumique de la phase gazeuse

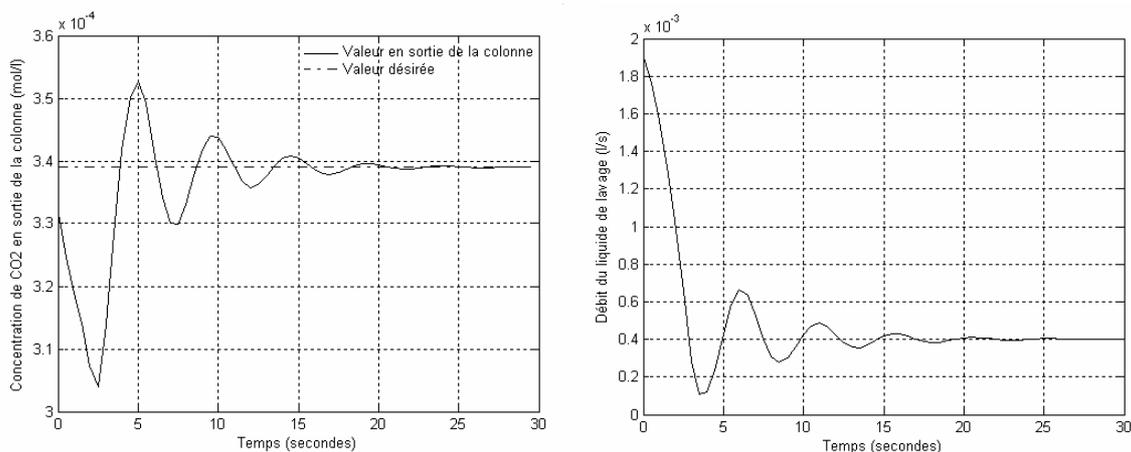


Figure 4.15 Régulation PI pour une perturbation de -5% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne et une perturbation de -30% sur le débit volumique de la phase gazeuse

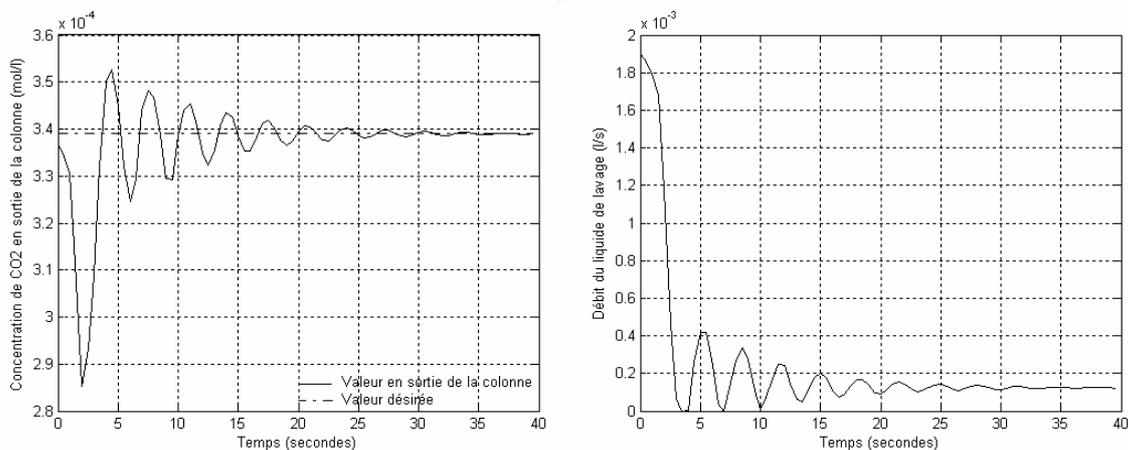


Figure 4.16 Régulation PI pour une perturbation de -15% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne et une perturbation de -10% sur le débit volumique de la phase gazeuse

Nous pouvons remarquer que contrôleur PI stabilise la concentration de CO₂ en sortie de la colonne à sa valeur désirée avec une bonne précision. Les réponses obtenus résultats obtenus montres que les perturbations sont bien prises en charge.

Les figures (4.13 à 4.16) présentent la réponse du système poussé à l'extrême par des perturbations combinées, ce qui justifie la présence des oscillations.

4.3 Commande neuronale par équivalence certaine

Cette approche consiste à construire un modèle neuronal direct du processus. En supposant que le modèle coïncide parfaitement avec le processus réel (principe d'équivalence certaine), une stratégie de commande est établie en s'appuyant sur le réseau estimateur (Figure 4.17)[Rand 95].

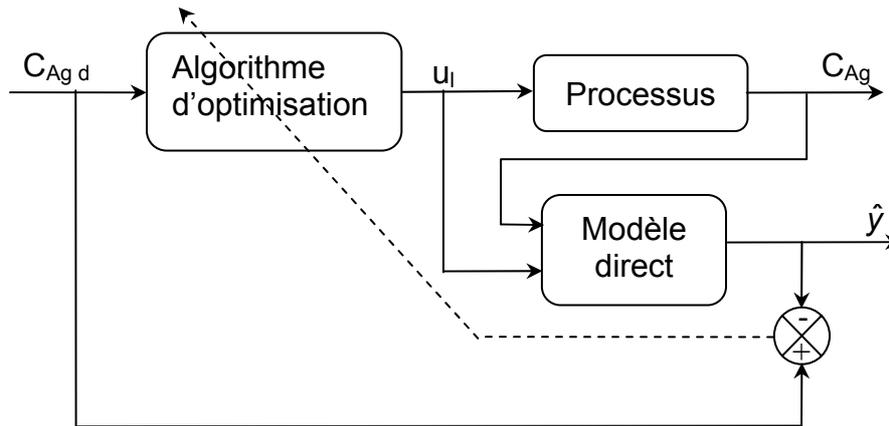


Figure 4.17 Commande neuronale par identification du modèle neuronal direct

La stratégie de commande se base souvent sur des méthodes d'optimisation d'un critère portant sur les sorties prédites afin qu'elles soient le plus proche possible d'un comportement de référence et éventuellement sur les variables de commande afin d'assurer une conduite sans à-coups.

4.3.1 Description de la commande par équivalence certaine

L'objectif est de minimiser l'erreur entre la consigne et la sortie prédite par le réseau de neurones dont le comportement est supposée identique à ce lui du processus. Le critère choisi est :

$$J(k) = \frac{1}{2} (C_{Ag,d}(k+1) - \hat{y}(k+1))^2 \quad (4.4)$$

où $\hat{y}(k)$ représente la sortie prédite du processus (sortie du réseau de neurones) et $C_{Ag,d}(k)$ est la concentration désirée.

L'algorithme d'optimisation utilisé est une descente de gradient. La commande à appliquée à l'instant $(k+1)$ est calculée à l'instant k tel que :

$$u_l(k+1) = u_l(k) + \Delta u_l(k-1) \quad (4.5)$$

avec

$$\Delta u_l(k) = -\eta \frac{dJ}{du_l} = -\eta \frac{dJ}{d\hat{y}} \frac{d\hat{y}}{du_l} \quad (4.6)$$

$$\Delta u_l = \eta (C_{Ag,d}(k+1) - \hat{y}(k+1)) \frac{d\hat{y}}{du_l} \quad (4.7)$$

où η est le pas de descente de gradient

le réseau de neurones est celui décrit au paragraphe 3.4.3.2 dont la sortie est donné par

$$\hat{y} = \sum_{i=1}^{15} w_{si} f(A_i) + b_s \quad (4.8)$$

avec

$$A_i = \sum_{j=1}^4 w_{eij} p_j + b_{ei}, \quad i = 1, \dots, 15 \quad (4.9)$$

où les p_j sont les composantes du vecteur d'entrée P défini par :

$$P = \begin{bmatrix} u_i(k) \\ u_i(k-1) \\ C_{Ag}(k) \\ C_{Ag}(k-1) \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

et :

w_{eij} sont les éléments de la matrice $W_e(15 \times 4)$ des poids de la couche d'entrée.

w_{si} sont les éléments du vecteur $W_s(15 \times 1)$ des poids de la couche de sortie.

b_{ei} sont les éléments du vecteur B_e des biais des neurones de la couche cachée.

b_s est le biais du neurone de la couche de sortie.

alors

$$\frac{d\hat{y}}{du_i} = \sum_{i=0}^{15} w_{si} \frac{df(A_i)}{du_i} \quad (4.11)$$

avec : u_i est le premier élément du vecteur P .

La fonction d'activation utilisée pour la couche cachée est la tangente hyperbolique (sigmoïde) :

$$f(A_i) = \frac{\exp(A_i) - \exp(-A_i)}{\exp(A_i) + \exp(-A_i)} \quad (4.12)$$

on aura donc,

$$\frac{df(A_i)}{du_i} = \frac{4w_{eij}}{(\exp(A_i) + \exp(-A_i))^2} \tag{4.13}$$

4.3.2 Application à la commande de la colonne d'absorption

Le schéma de principe du système de commande est représenté par la figure 4.18

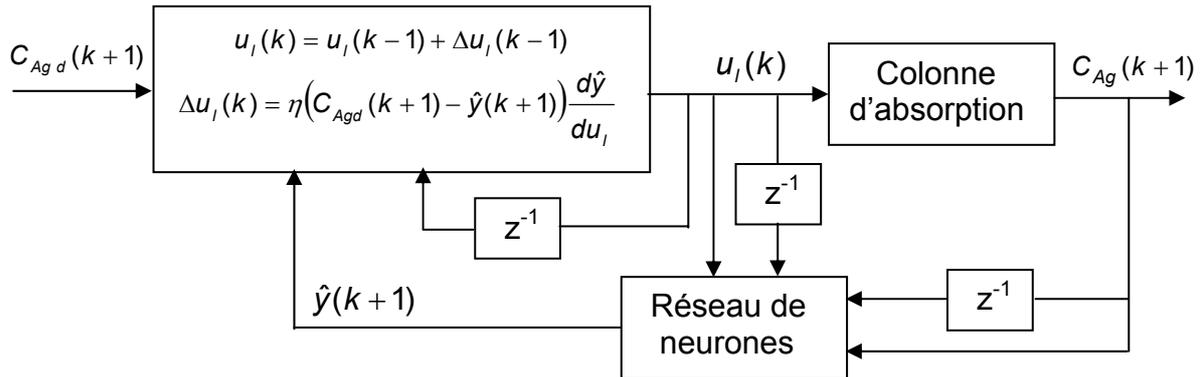


Figure 4.18 Schéma de principe du système de commande

4.3.3 Résultats de simulation

Les figures 4.19 et 4.20 montrent l'évolution de la concentration de CO₂ pour un changement de consigne. On remarque que pour un changement de consigne de 3.39 10⁻⁴ mol/l à 3.8 10⁻⁴ mol/l, la sortie du système atteint la réponse désirée au bout de 7 secondes par contre dans le cas d'un changement de 3.39 10⁻⁴ mol/l à 3.0 10⁻⁴ mol/l, la concentration de CO₂ en sortie de la colonne mis environs 18 secondes pour atteindre la référence désirée.

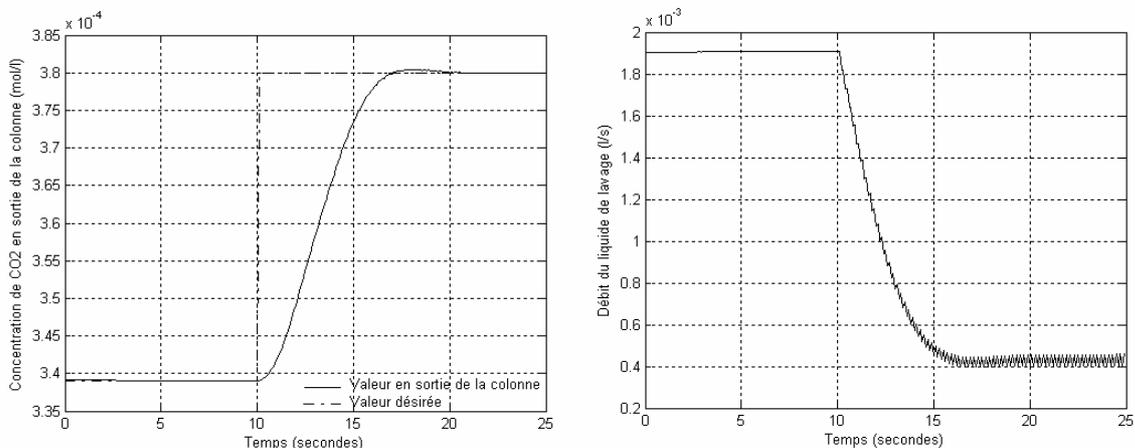


Figure 4.19 Réponse du système pour un changement de consigne de 3.39 10⁻⁴ mol/l à 3.8 10⁻⁴ mol/l.

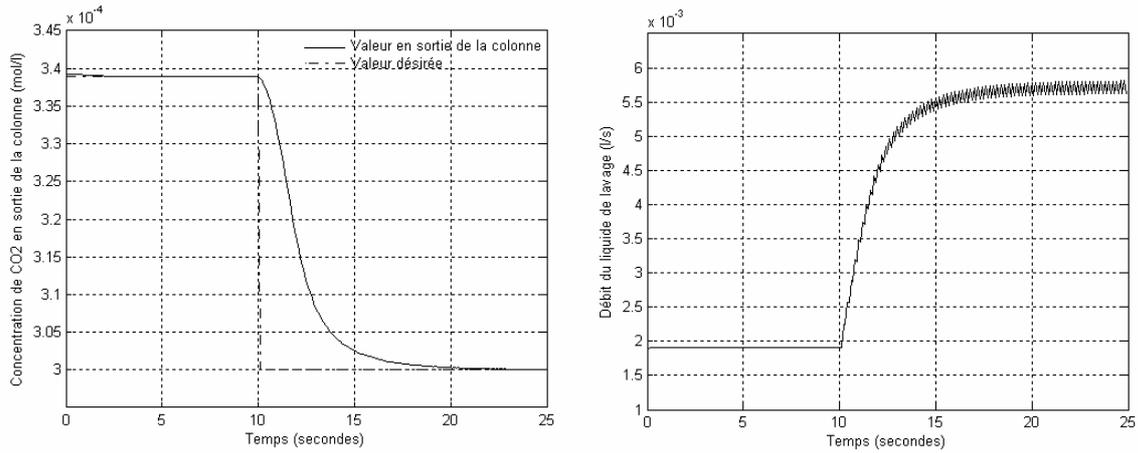


Figure 4.20 Réponse du système pour un changement de consigne de 3.39×10^{-4} mol/l à 3.0×10^{-4} mol/l.

Afin de tester la robustesse de la commande par rapport aux perturbations, on fait des variations sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne ainsi que sur le débit volumique de la phase gazeuse. Les figures 4.21 et 4.22 présentent la réponse du système soumis à des perturbations de +5% et de +15 % sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne C_{ge} .

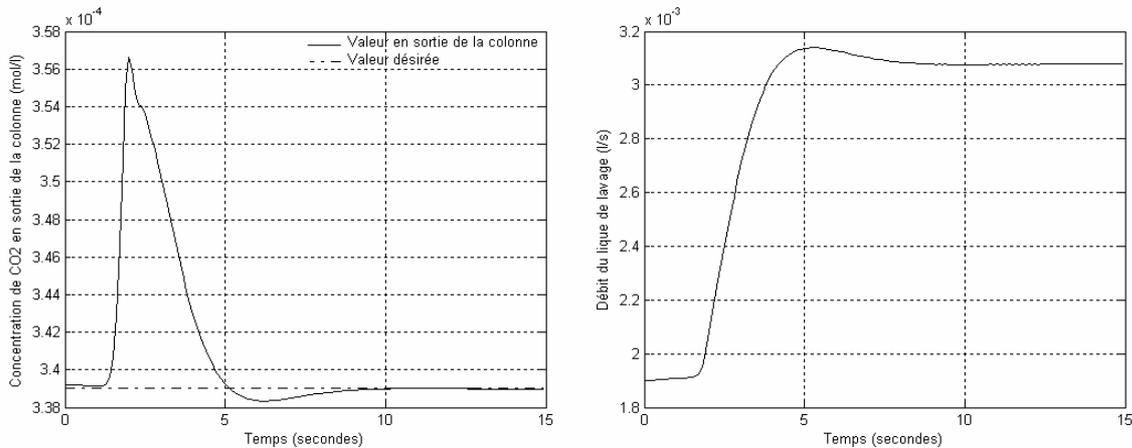


Figure 4.21 Commande neuronale à équivalence certaine de la colonne d'absorption pour une perturbation de +5% sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne

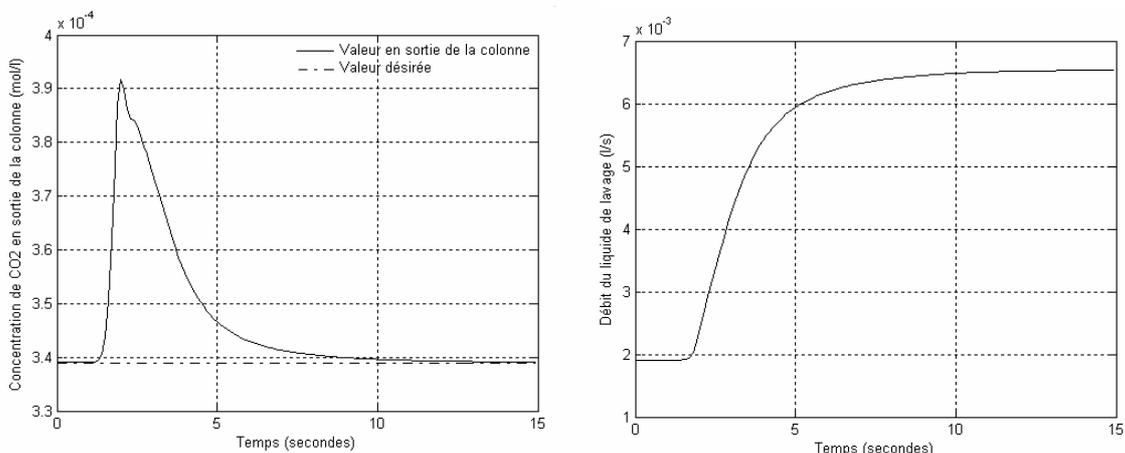


Figure 4.22 Commande neuronale à équivalence certaine de la colonne d'absorption pour une perturbation de +15% sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne

Les figures 4.23 et 4.24 présentent la réponse du système soumis à des perturbations de -5% et de -15 % sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne C_{ge} .

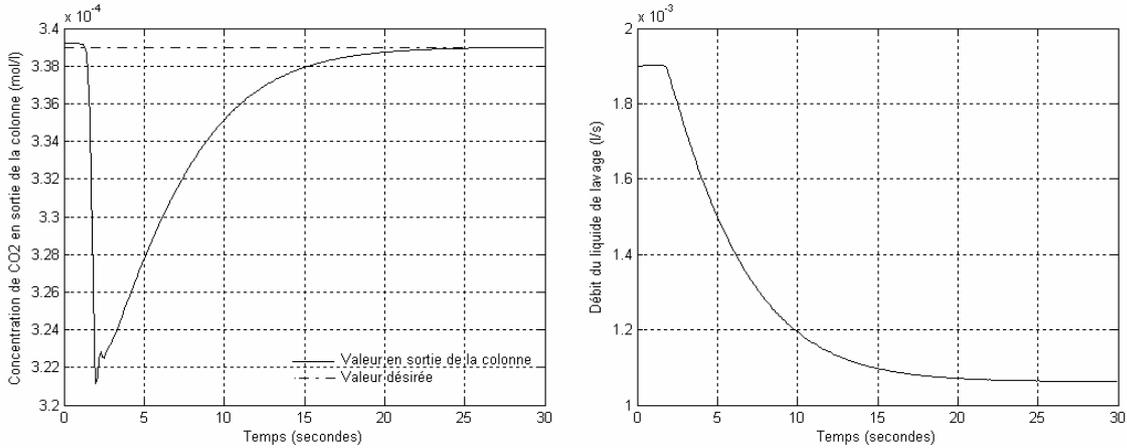


Figure 4.23 Commande neuronale à équivalence certaine de la colonne d'absorption pour une perturbation de -5% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne

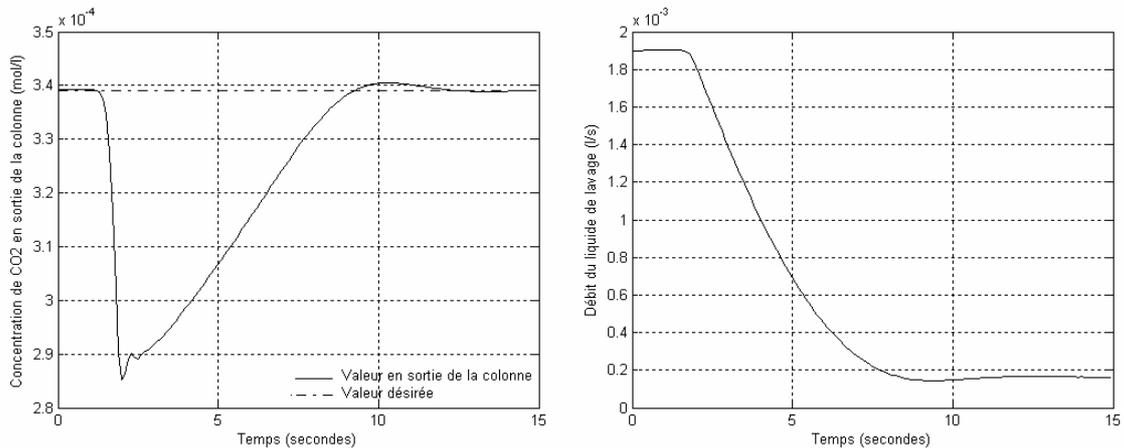


Figure 4.24 Commande neuronale à équivalence certaine de la colonne d'absorption pour une perturbation de -15% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne

Les figures 4.25 et 4.26 présentent la réponse du système soumis à des perturbations de +10% et de +30 % sur le débit volumique de la phase gazeuse G .

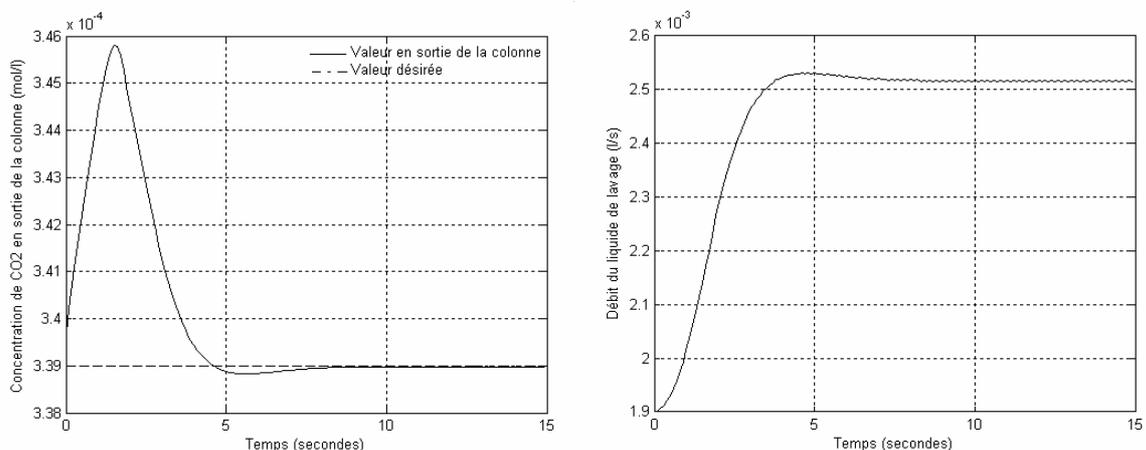


Figure 4.25 Commande neuronale à équivalence certaine de la colonne d'absorption pour une perturbation de +10% sur le débit volumique de la phase gazeuse

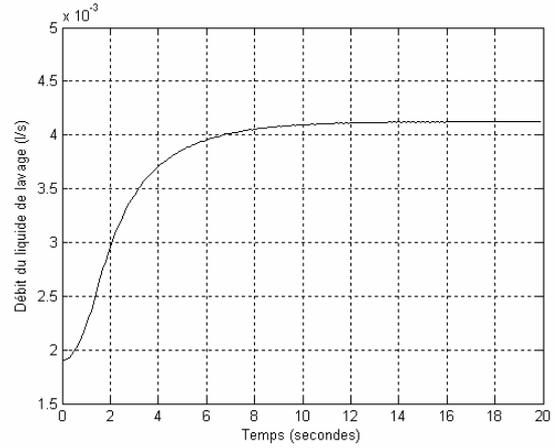
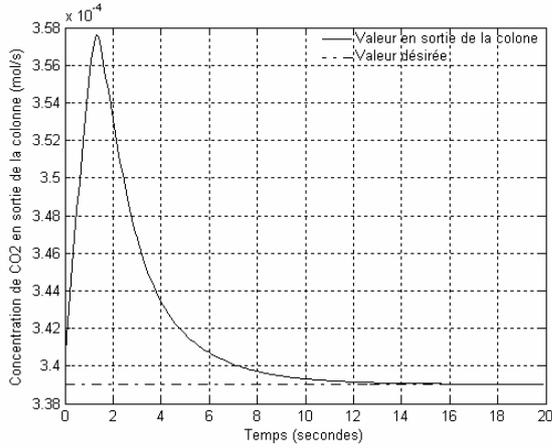


Figure 4.26 Commande neuronale à équivalence certaine de la colonne d'absorption pour une perturbation de +30% sur le débit volumique de la phase gazeuse

Les figures 4.27 et 4.28 présentent la réponse du système soumis à des perturbations de -10% et de -30 % sur le débit volumique de la phase gazeuse G .

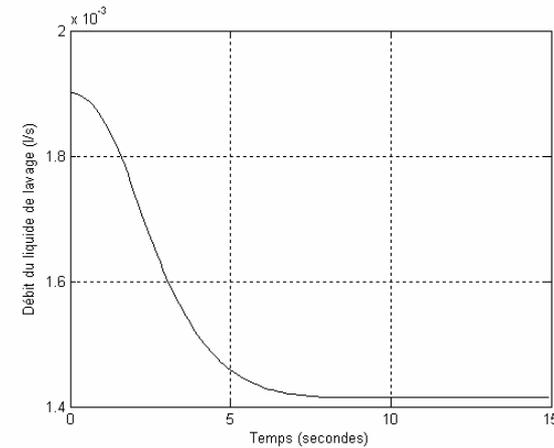
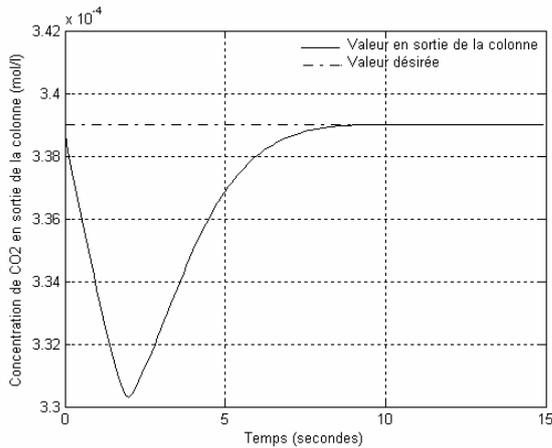


Figure 4.27 Commande neuronale à équivalence certaine de la colonne d'absorption pour une perturbation de -10% sur le débit volumique de la phase gazeuse

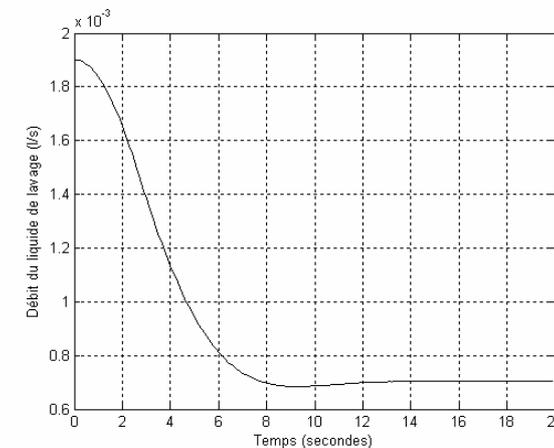
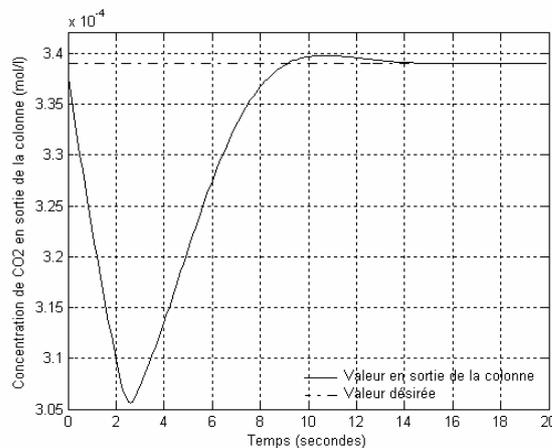


Figure 4.28 Commande neuronale à équivalence certaine de la colonne d'absorption pour une perturbation de -30% sur le débit volumique de la phase gazeuse

Les figures 4.29, 4.30, 4.31 et 4.32 présentent la réponse du système soumis à des perturbations mixtes : sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne et sur le débit volumique de la phase gazeuse G .

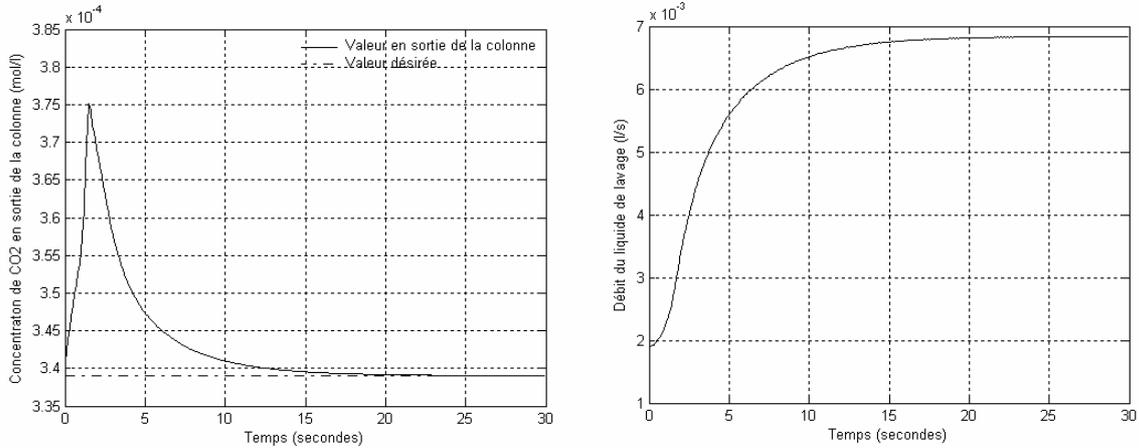


Figure 4.29 Commande neuronale à équivalence certaine de la colonne d'absorption pour des perturbations de +5% sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne et de +30% sur le débit volumique de la phase gazeuse

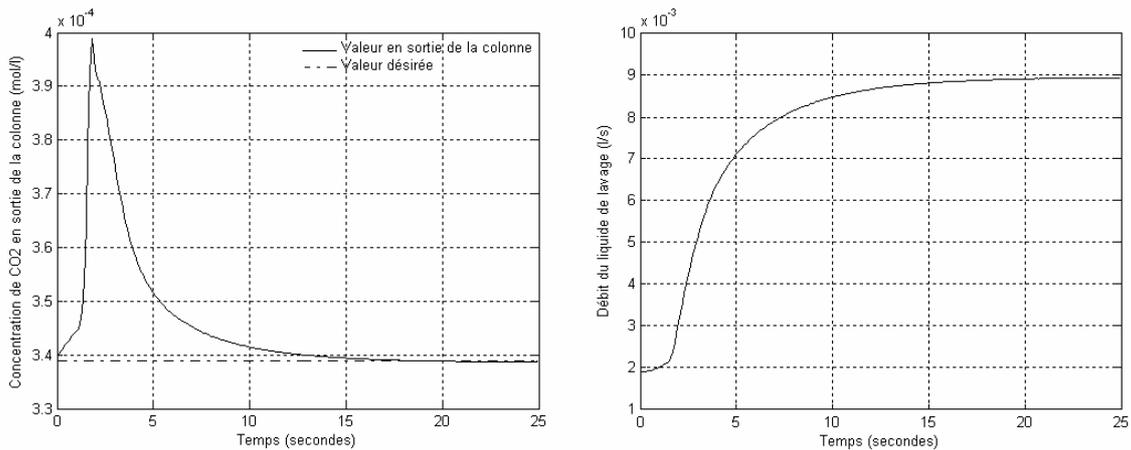


Figure 4.30 Commande neuronale à équivalence certaine de la colonne d'absorption pour des perturbations de +15% sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne et de +10% sur le débit volumique de la phase gazeuse

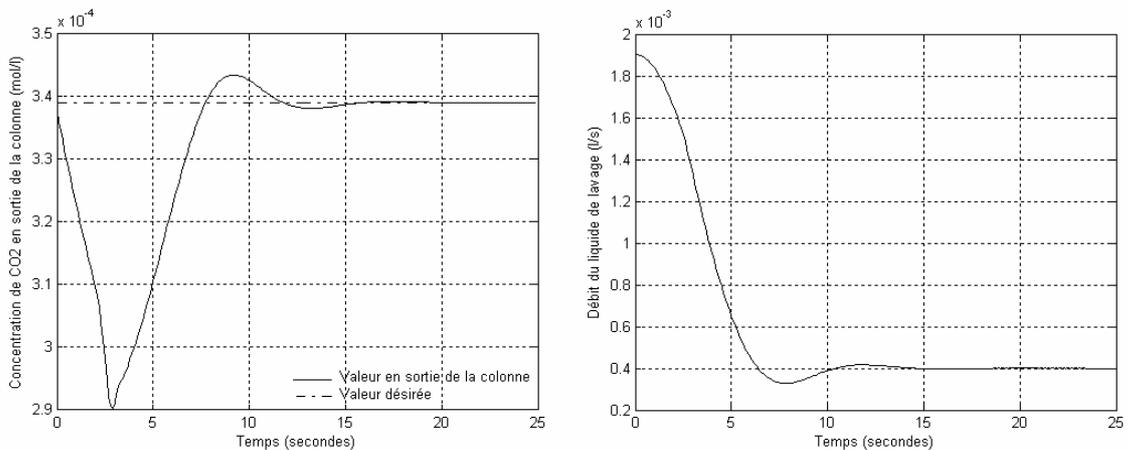


Figure 4.31 Commande neuronale à équivalence certaine de la colonne d'absorption pour des perturbations de -5% sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne et de -30% sur le débit volumique de la phase gazeuse

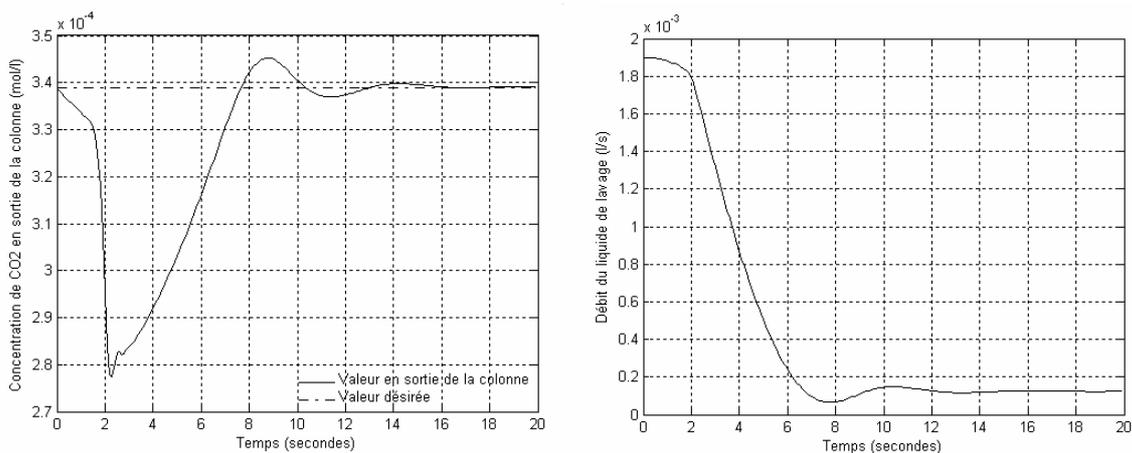


Figure 4.32 Commande neuronale à équivalence certaine de la colonne d'absorption pour des perturbations de -15% sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne et de -10% sur le débit volumique de la phase gazeuse

En premier lieu, nous constatons que les réseaux de neurones ont une bonne aptitude à conduire le système vers la valeur de consigne. Les figures 4.19 et 4.20 montrent la réponse de la colonne pour un changement de consigne. Dans les deux cas, la concentration du CO_2 en sortie de la colonne se stabilise à la valeur désirée : après 7 secondes pour un passage de la consigne de 3.39×10^{-4} mol/l à 3.9×10^{-4} mol/l et après 11 secondes pour un passage de la consigne de 3.39×10^{-4} mol/l à 3.8×10^{-4} mol/l.

En ce qui concerne les perturbations, qu'elles soient sur le débit volumique de la phase gazeuse ou sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne, sont bien prises en charge. Nous notons aussi que les variations sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne induisent un retard sur la réponse du système.

4.4 Commande prédictive neuronale de la colonne d'absorption

La commande linéaire à modèle prédictive (LMPC) est la technique de commande la plus importante pour les processus industriels après le contrôleur PID [Vand 97]. La LMPC est certainement, la stratégie de commande la plus utilisée dans les processus industriels [Garc 89]. Les raisons de ce succès incluent la facilité relative avec laquelle LMPC peut manipuler des caractéristiques de processus, telles que le délai, les entrées, les sorties. Ceci est dû à sa robustesse par rapport aux variations de paramètres et aux temps morts. LMPC est une classe d'algorithmes de commande, où un modèle dynamique linéaire est employé pour prévoir et optimiser l'évolution du processus, qui inclut la commande prédictive généralisée [Rich 78] et la commande par la matrice dynamique [Cutl 79].

Récemment, plusieurs algorithmes du type MPC ont été étendue à la commande non linéaire [Rawl 94] et [Hens 98]. Généralement, les applications de MPC non linéaire sont basées sur les réseaux de neurones [Pott 92]. Parmi les applications temps réel de MPC basé réseau de neurones on peut citer : contrôle d'un système de niveau liquide [Evan 94], contrôle d'un réacteur de neutralisation [Pott 97] [Drae 95].

4.4.1 Principe de la commande prédictive neuronale

Le principe de base de cet algorithme est d'utiliser un modèle pour bâtir une prédiction du comportement futur du procédé. Cette prédiction est comparée au comportement désiré, ce qui permet de déterminer les modifications de la commande à effectuer sur un certain horizon pour atteindre la référence. A chaque itération, seule la première action de commande calculée est appliquée au procédé. De plus, la trajectoire prédite est adaptée en fonction de l'évolution du procédé afin de tenir compte des perturbations. La figure 4.33 résume les éléments principaux de cette stratégie.

Le contrôleur à réseau de neurones qui est utilisé dans cette partie emploie un modèle basé sur un réseau de neurones pour prédire le comportement futur du système. Le contrôleur calcule alors la commande qui optimise les performances du système sur un horizon de temps spécifié.

La première étape dans le processus de la conception de la commande prédictive neuronale est de déterminer le réseau de neurones (identification du système). Puis, le réseau de neurones est utilisé par le contrôleur pour prédire les futures actions de commande.

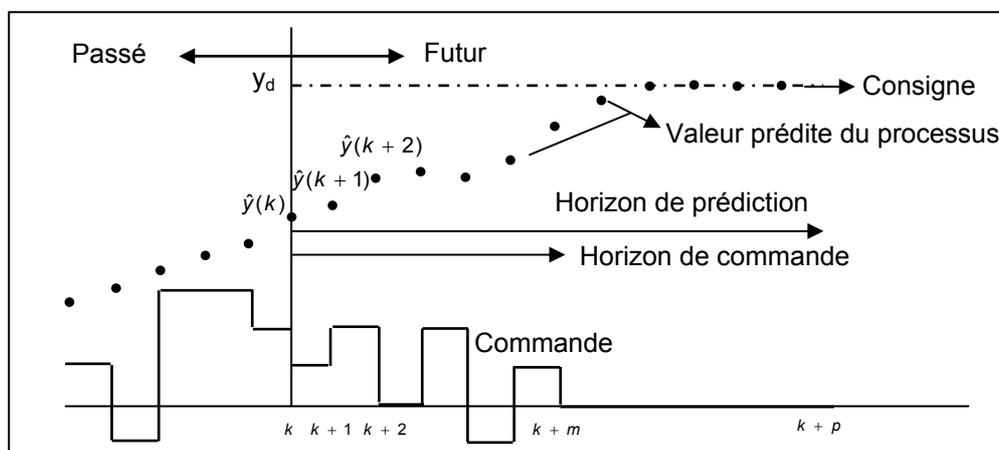


Figure 4.33 Principe de la commande prédictive

4.4.2 Commande prédictive neuronale de la colonne d'absorption

La stratégie de commande prédictive neuronale est basée sur la technique d'horizon de prédiction [Solo 96]. Le réseau de neurones prédit la réponse du système sur un intervalle de temps spécifié. La prédiction est utilisée par le programme d'optimisation pour déterminer le signal de commande qui minimise le critère de performance ci-dessous sur un horizon spécifié.

$$J = \sum_{j=N_1}^{N_2} (C_{Agd}(t+j) - \hat{y}(t+j))^2 + \rho \sum_{j=1}^{N_u} (u'(t+j-1) - u'(t+j-2))^2 \quad (4.14)$$

avec

$$U'(t) = [u'(t) \quad u'(t+N_u-1)]^T \quad (4.15)$$

où $U'(t)$ est le vecteur de commandes tests.

$$u'(t+j) = u'(t+N_u-1) \quad \text{pour } j \geq N_u \quad (4.16)$$

où N_1 et N_2 définissent l'horizon sur lequel l'erreur est évaluée, N_u défini l'horizon sur lequel le signal commande est évalué. La variable u' est le signal de commande test, y_d est la réponse désirée et \hat{y} est la sortie du modèle réseau de neurones. La valeur de ρ détermine la contribution sur les commandes tests de l'erreur quadratique dans le critère de performance.

Le critère J est minimisé en utilisant l'algorithme de backtraking [Denn 83].

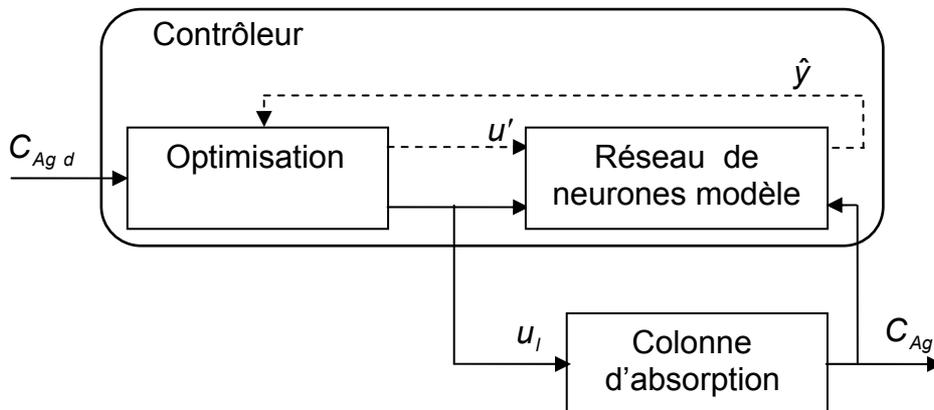


Figure 4.34 Schéma de la commande prédictive neuronale

Le diagramme de la figure ci-dessus illustre la stratégie de commande prédictive neuronale. Le contrôleur est composé d'un réseau de neurones modèle et

d'un bloc d'optimisation. Le bloc d'optimisation détermine les composantes du vecteur $U'(t)$ minimisant J , puis la commande optimale $u'(t)$ sera appliquée au système (la colonne d'absorption) et constituera $u(t)$.

Les aspects importants de l'algorithme de la commande MPC sont :

- A chaque période, le bloc d'optimisation génère un vecteur des commandes possibles $U'(t)$, seul l'élément optimal $u'(t)$ est pris en compte. Les autres éléments du vecteur des solutions sont négligés.
- En minimisant la fonction de coût (4. 14), pour $N_u < N_2$, l'action de commande reste constante au-delà de l'horizon de commande (équation 4.16). De plus, si les variations des futurs points de réglage pour l'horizon de prévision sont inconnues alors le point de réglage courant est maintenu.
- Le contrôleur a quatre paramètres à régler N_1 , N_2 , N_u et ρ . N_1 devrait être choisi équivalent au temps mort t_d [Solo 96] [Drae 95]. Puisque $u'(t)$ n'a aucun effet sur les sorties $\hat{y}(t+j)$ avec $j < t_d$. Ainsi les paramètres principaux à régler sont N_2 , N_u et ρ .

4.4.3 Résultats de simulation

Les figures 4.35 et 4.36 montrent l'évolution de la concentration de CO_2 pour un changement de consigne. On remarque que pour un changement de consigne de $3.39 \cdot 10^{-4}$ mol/l à $3.8 \cdot 10^{-4}$ mol/l, la sortie du système atteint la réponse désirée au bout de 3 secondes par contre dans le cas d'un changement de $3.39 \cdot 10^{-4}$ mol/l à $3.0 \cdot 10^{-4}$ mol/l, la concentration de CO_2 en sortie de la colonne mis environs 4 secondes pour atteindre la référence désirée.

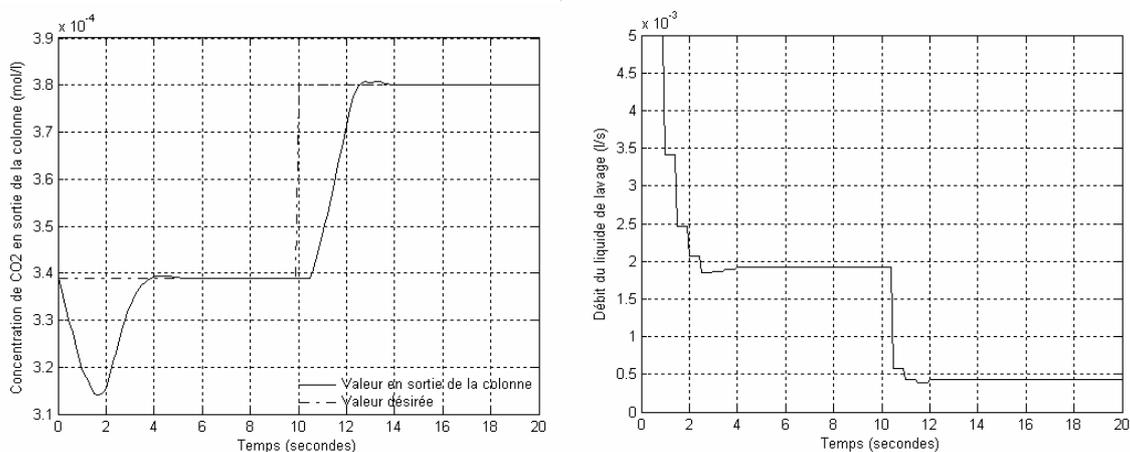


Figure 4.35 Commande NPC de la colonne d'absorption pour un changement de consigne de $3.39 \cdot 10^{-4}$ mol/l à $3.8 \cdot 10^{-4}$ mol/l.

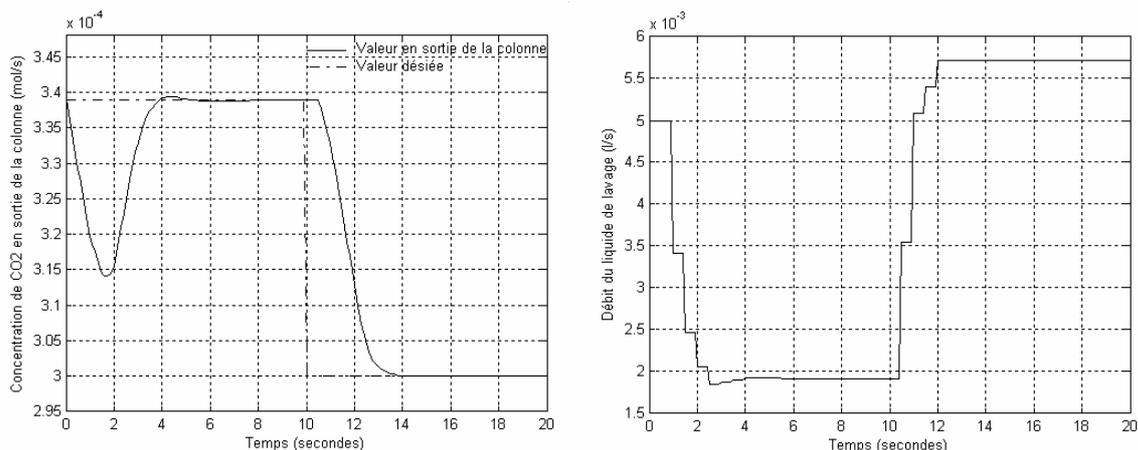


Figure 4.36 Commande NPC de la colonne d'absorption pour un changement de consigne de $3.39 \cdot 10^{-4}$ mol/l à $3.0 \cdot 10^{-4}$ mol/l.

Afin de tester la robustesse de la commande par rapport aux perturbations, on fait des variations sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne ainsi que sur le débit volumique de la phase gazeuse. Les figures 4.37 et 4.38 présentent la réponse du système soumis à des perturbations de +5% et de +15 % sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne C_{ge} .

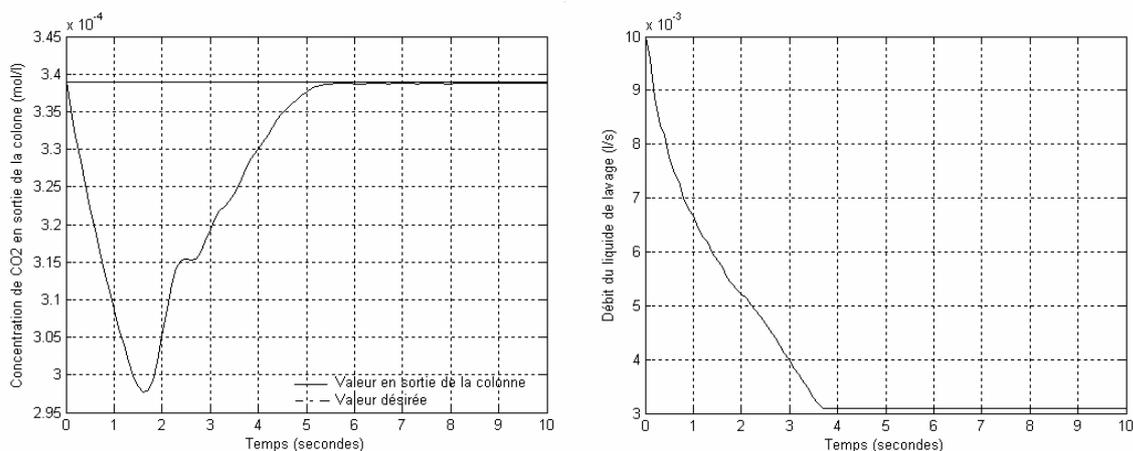


Figure 4.37 Commande NPC de la colonne d'absorption pour une perturbation de +5% sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne

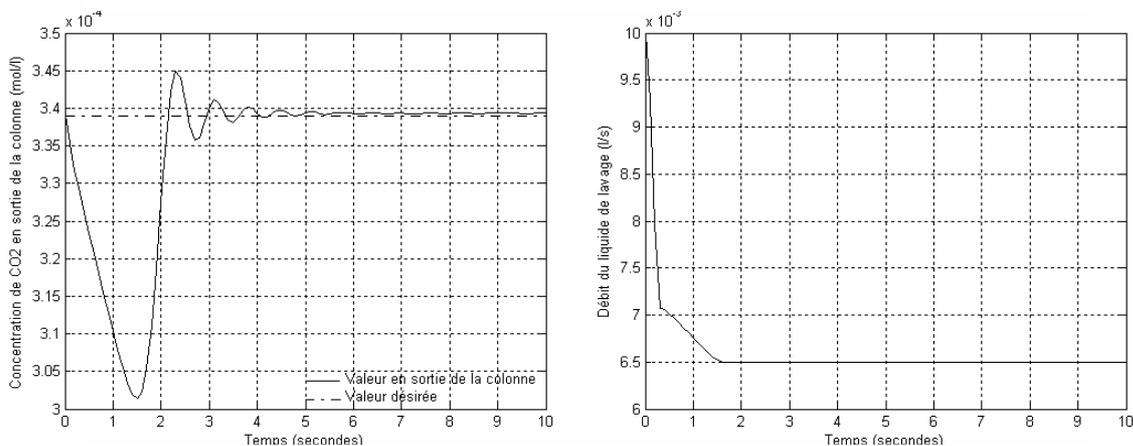


Figure 4.38 Commande NPC de la colonne d'absorption pour une perturbation de +15% sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne

Les figures 4.39 et 4.40 présentent la réponse du système soumis à des perturbations de -5% et de -15 % sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne C_{ge} .

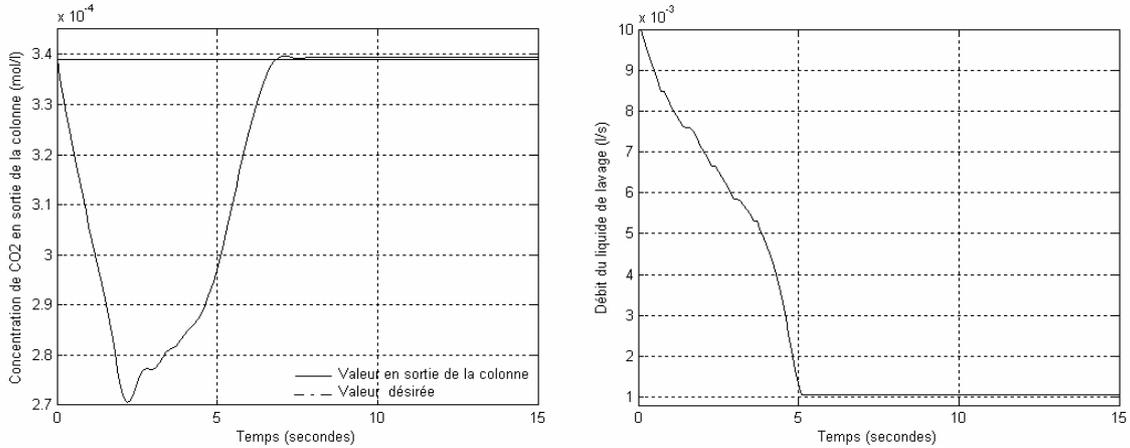


Figure 4.39 Commande NPC de la colonne d'absorption pour une perturbation de -5% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne

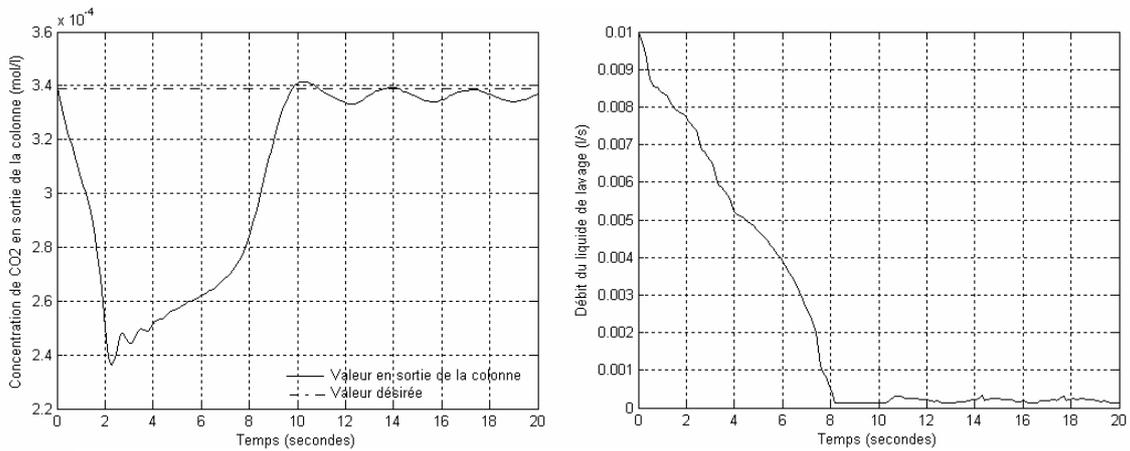


Figure 4.40 Commande NPC de la colonne d'absorption pour une perturbation de -15% sur la concentration de CO₂ en entrée de la colonne

Les figures 4.41 et 4.42 présentent la réponse du système soumis à des perturbations de +10% et de +30 % sur le débit volumique de la phase gazeuse G .

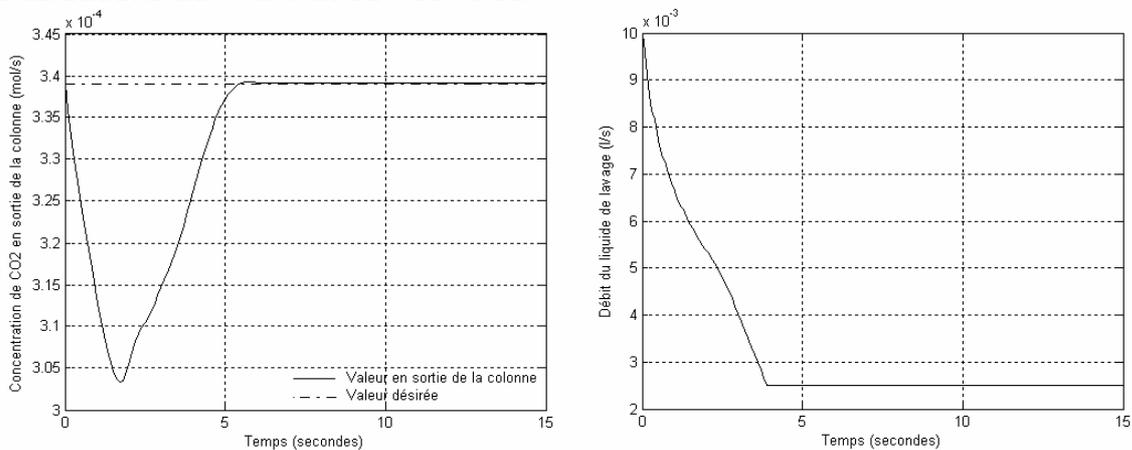


Figure 4.41 Commande NPC de la colonne d'absorption pour une perturbation de +10% sur le débit volumique de la phase gazeuse

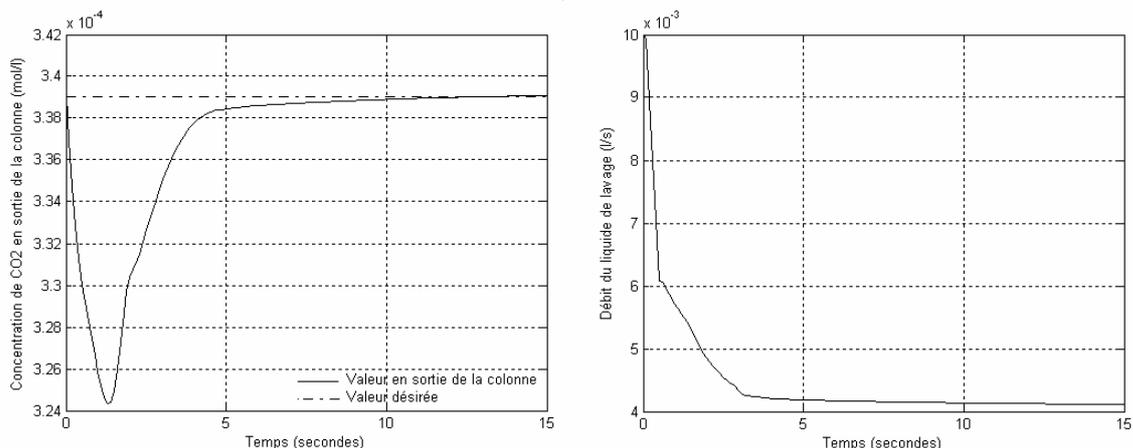


Figure 4.42 Commande NPC de la colonne d'absorption pour une perturbation de +30% sur le débit volumique de la phase gazeuse

Les figures 4.43 et 4.44 présentent la réponse du système soumis à des perturbations de -10% et de -30 % sur le débit volumique de la phase gazeuse G .

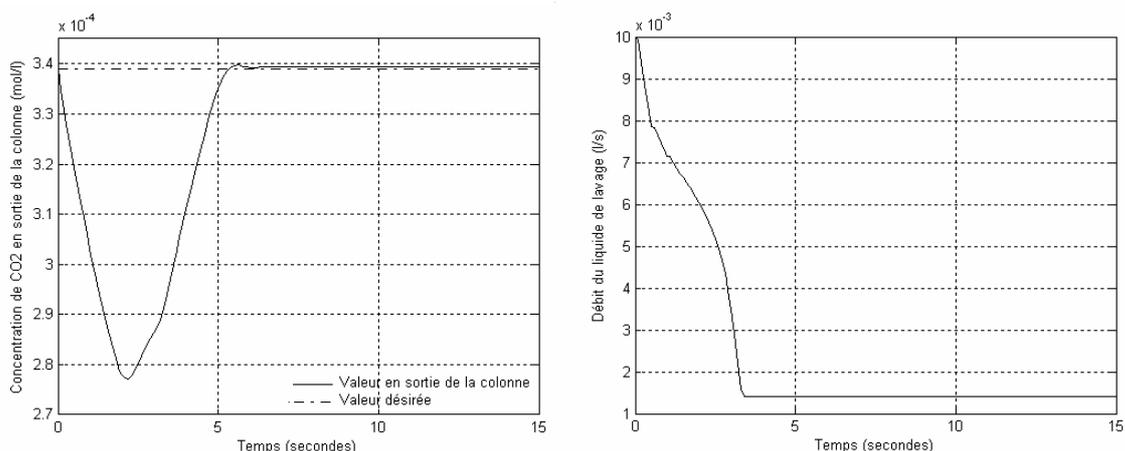


Figure 4.43 Commande NPC de la colonne d'absorption pour une perturbation de -10% sur le débit volumique de la phase gazeuse

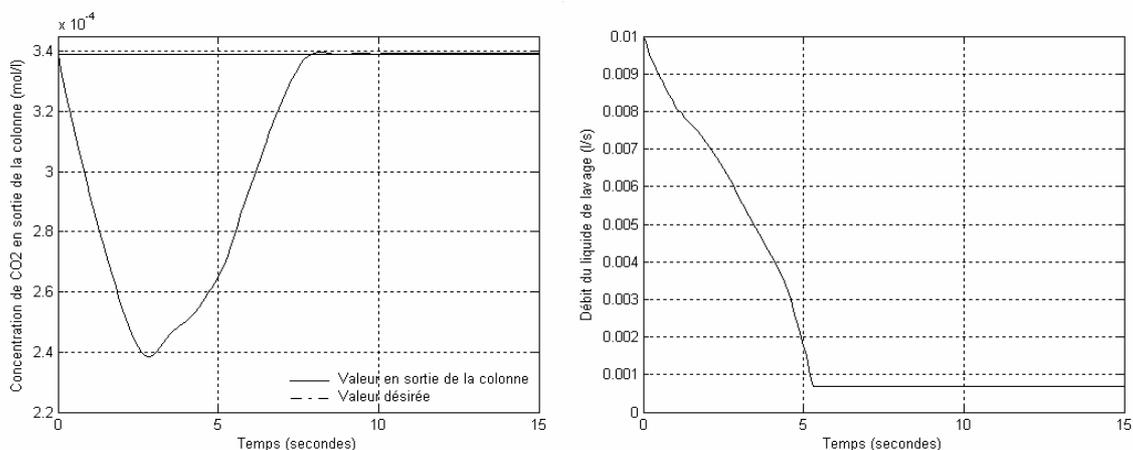


Figure 4.44 Commande NPC de la colonne d'absorption pour une perturbation de -30% sur le débit volumique de la phase gazeuse

4.5 Etude comparative

Nous nous proposons de faire une étude comparative portant sur les résultats obtenus précédemment qui peuvent se décomposer en trois cas :

1. Variation du point de consigne. Le point de consigne passe de sa valeur nominale $3.39 \cdot 10^{-4}$ mol/l à $3.8 \cdot 10^{-4}$ mol/l. Par la suite le point de consigne est diminué à $3 \cdot 10^{-4}$ mol/l. Cette simulation permet d'analyser le comportement en suivi de trajectoire des lois de commande ;
2. Variation de la concentration de CO_2 en entrée de la colonne qui permet d'analyser le comportement des lois de commande par rapport aux perturbations ;
3. Variation du débit volumique de la phase gazeuse pour analyser la robustesse de l'algorithme vis à vis d'une variation du rythme de fonctionnement.

Pour mener à bien notre analyse, nous utiliserons les deux critères suivants qui sont des indices de performance classiques [Kuo 98].

- 1- **DM** : ce critère détermine la déviation maximale entre la solution optimale et la variable optimale.

$$DM = \max |e(t)| \quad (4.14)$$

- 2- **ISE** : ce critère permet d'évaluer l'erreur globale sur la solution et pénalise tous les écarts importants.

$$ISE = \int (e(t))^2 dt \quad (4.15)$$

Les indices de performance pour l'ensemble des simulations sont présentés dans le tableau 3. Comme le montre le tableau, dans le cas de variation du point de consigne la commande prédictive neuronale présente de meilleures performances, dans le cas des perturbations sur la concentration de CO_2 en entrée de la colonne, la commande neuronale par équivalence certaine présente de meilleures performances pour des perturbations positives par contre pour des perturbations négatives c'est la commande prédictive neuronale qui présente de meilleures performances.

Finalement, l'analyse des perturbations sur le débit volumique de la phase gazeuse par les indices de performances met clairement en évidence la meilleure performance de l'algorithme PI.

Type de perturbation	Sens de perturbation	Indice de performance	Régulation PI	Commande neuronale par équivalence certaine	Commande prédictive neuronale
Variation du point de consigne	de $3.39 \cdot 10^{-4}$ mol/l à $3.8 \cdot 10^{-4}$ mol/l	DM	$3.42 \cdot 10^{-5}$	$4.32 \cdot 10^{-5}$	$2.78 \cdot 10^{-5}$
		ISE	$0.73 \cdot 10^{-8}$	$1.76 \cdot 10^{-8}$	$0.34 \cdot 10^{-8}$
	de $3.39 \cdot 10^{-4}$ mol/l à $3.0 \cdot 10^{-4}$ mol/l	DM	$3.54 \cdot 10^{-5}$	$1.55 \cdot 10^{-5}$	$1.20 \cdot 10^{-5}$
		ISE	$5.33 \cdot 10^{-9}$	$2.41 \cdot 10^{-9}$	$0.39 \cdot 10^{-9}$
Variation de la concentration de CO ₂ en entrée de la colonne	+15%	DM	$4.68 \cdot 10^{-5}$	$4.24 \cdot 10^{-5}$	$5.67 \cdot 10^{-5}$
		ISE	$1.06 \cdot 10^{-8}$	$0.97 \cdot 10^{-8}$	$3.17 \cdot 10^{-8}$
	-15%	DM	$4.71 \cdot 10^{-5}$	$4.38 \cdot 10^{-5}$	$1.38 \cdot 10^{-5}$
		ISE	$6.29 \cdot 10^{-9}$	$5.59 \cdot 10^{-9}$	$0.23 \cdot 10^{-8}$
Variation du débit volumique de la phase gazeuse	+30%	DM	$1.93 \cdot 10^{-5}$	$1.75 \cdot 10^{-5}$	$1.81 \cdot 10^{-5}$
		ISE	$2.17 \cdot 10^{-9}$	$4.18 \cdot 10^{-9}$	$1.04 \cdot 10^{-9}$
	-30%	DM	$2.57 \cdot 10^{-5}$	$3.34 \cdot 10^{-5}$	$3.05 \cdot 10^{-5}$
		ISE	$2.71 \cdot 10^{-9}$	$3.30 \cdot 10^{-8}$	$2.93 \cdot 10^{-9}$

Tableau 3 Indices de performances.

4.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté l'application de deux stratégies de commande à la commande de la colonne d'absorption. La régulation PI nous a permis de régler la concentration de CO₂ en sortie de la colonne et la commande neuronale par équivalence certaine nous a permis de tester les performances d'une commande non linéaire. L'analyse des performances de ces approches montre que l'utilisation d'un modèle à paramètres répartis permet de tenir compte efficacement des non linéarités du modèle cinétique.

CONCLUSION GÉNÉRALE

Conclusion générale

La performance de la commande d'une colonne d'absorption est limitée principalement par deux facteurs: le comportement non linéaire du système causé par la cinétique de réaction et un délai déterminé par l'hydrodynamique qui peut être très important. Ces problématiques sont des contraintes importantes pour des stratégies de commande traditionnelles qui sont généralement basées sur un modèle obtenu par une réponse à l'échelon. En effet, ce type de modèle ne permet pas de tenir compte des effets non linéaires lors d'une variation du point d'opération.

Afin d'améliorer les performances du système de commande, l'utilisation d'un modèle à paramètres répartis a été considérée. Dans notre cas ce modèle correspond à une équation parabolique tel que présenté précédemment. L'hypothèse de base de notre travail est l'utilisation de ce modèle pour la conception du régulateur afin d'accroître les performances du procédé.

Nous avons présentés une méthode de simulation applicable au système d'équations paraboliques non linéaires, car les méthodes classiques, comme la CTDS, ne sont pas adaptées à la simulation des systèmes non linéaires. Cette approche de résolution numérique présentée par Skeel (1990) permet une résolution beaucoup plus stable et rapide n'est pas affectée par les problèmes de diffusion numérique ou d'oscillation; elle est donc bien adaptée à la résolution en ligne du système d'absorption.

Les réseaux de neurones artificiels sont introduits pour construire un modèle de la colonne afin de l'utiliser pour la commande de la colonne d'absorption.

Trois stratégies de commande originale ont été utilisées, d'abord la commande classique PI a été appliquée à la colonne d'absorption; puis, la commande neuronale par équivalence certaine et la commande prédictive neuronale qui ont permis d'améliorer les performances obtenues par rapport la stratégie classique PI.

Notre travail ne constitue qu'une première étude dans le domaine des processus d'absorption de CO₂ et demande à être poursuivi, en effet de nombreuses structure de commande basées sur les réseaux de neurones peuvent être appliquées. Néanmoins,

les systèmes de commande étudiés démontrent l'intérêt des réseaux de neurones artificiels dans le domaine de la commande des colonnes d'absorption.

Les systèmes de commande proposés dans ce mémoire ne pourront être réellement validés qu'une fois testés sur des processus expérimentaux ou sur simulateur, mais les résultats obtenus nous rendent cependant optimiste à ce sujet.

Nous pouvons proposer comme axe d'études futures, la prise en compte de la variation de la concentration du liquide de lavage en tête de la colonne d'absorption, la prise en compte des variations paramétriques et également faire le diagnostic de la colonne d'absorption.

RÉFÉRENCES
BIBLIOGRAPHIQUES

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [Batt 92] Battiti, R. « *First- and second order methods for learning: Between steepest descent and Newton's method* ». *Neural Computation*, vol. 4, N° 2, pp. 141-166, (1992).
- [Berg 68] Berger, J.A. et Lapidus, L. « *An introduction to the stability of distributed systems via a Lyapunov functional* ». *ACHE Journal* N° 14, pp.558-568. (1968)
- [Bhat 90] Bhat, N.V. and Mcavoy, T.J. « *Use of neural nets for dynamic modelling and control of chemical process systems* », *Computers Chem. Engng.*, Vol. 14, N° 4/5, pp.573-583, (1990)
- [Böhm 98] Böhm, M., Demetriou, M.A. Eich, S. et Osen, I.G. « *Model reference adaptive control of distributed parameter systems* », *SIAM Journal of Control and Optimisation*, Vol. 36, N° 1, pp.33-81. (1998).
- [Chkr 97] Chkravarti, S. et Ray, H. « *Boundary identification and control of distributed parameter systems using singular functions* », In: *American Control Conference*.Albuquerque. pp.2223-2227, (1997).
- [Chri 98a] Christofides, P.D. et Daoutidis, P. « *Nonlinear feedback control of parabolic pde Systems* », *NATO ASI Serie E Applied Science*, N° 353, pp. 371-401. (1998).
- [Chri 98b] Christofides, P.D. « *Robust control of parabolic pde systems* », *Chemical Engineering Science*, Vol. 53, N°16, pp.2949-2965. (1998).
- [Cros 76] Crosby, J.E et Durbin, L.D. « *Design and application of state variable feedback controller for a packed trickle bed column with carbon dioxyde absorption* », *Joint Automatic Control Conference*, West Lafayette, IN (1976).
- [Curt 95] Curtain, R.F. et Zwart, H.J. « *An introduction to Infinite-Dimensional linear Systems Theory* », Springer-Verlag. New York. (1995).
- [Curt 82] Curtain, R.F. « *Finite-dimensional compensator design for parabolic distributed systems with point sensors and boundary input* », *IEEE Transactions on Automatic Control*, Vol. 27, N° 1, pp.98-104, (1982).
- [Cybe 89] Cybenko, G., « *Approximation by Superpositions of a Sigmoidal Function* », *Math. Cont. Sign. Syst.* N° 2, pp. 303-314, (1989).
- [Darw 80] Darwish, M. et Fantin, J. « *Stabilisation and control of absorber tower chemical process* », *Third IFAC/IFIP/IFORS Conference on system Approach for Developement* ,Rabat (1980).
- [Denn 83] Dennis, J. E., and Schnabel R. B., « *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations* », Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1983.
- [Doch 94] Dochain, D. « *Contribution to the analysis and control of distributed parameter systems with application to (bio)chemical processes and robotics* ». Thèse d'agrégation. Université catholique de Louvain, (1994).
- [Drae 95] Draeger A., Engel S. et Ranke H., « *Model predictive Control Using Neural Network* », *IEEE Control System Magazine*, N°10, pp.61-66, (1996)
- [Drak 97a] Drakunov, S. et Barbieri, E. « *Manifold control of a class of distributed parameter systems using modal expansion* », In: *Conference on Decision and Control*. San Diego, pp. 1082-1087, (1997a).
- [Drak 97b] Drakunov, S. et Barbieri, E. « *Sliding surfaes design for distributed parameter Systems* », In: *American Control Conference*. pp.3023-3027, (1997b).
- [El Jai 90] El Jai, A. et Amouroux, M. « *Automatique des systèmes distribués* », Hermès. Paris, (1990).
- [El Jai 86] El Jai, A. et Pritchard, A.J.« *Capteurs et actionneurs dans l'analyse des systèmes distribués* », Masson. Paris, (1986).

- [Erik 84]** Eriksson, K and Thomée, V. « *Galerkin methods for singular boundary value problems in one space dimension* ». Math. Comp., N° 42, pp.345-367. (1984)
- [Even 94]** Evans, J.T. « Investigation of a multi-layer perceptron network to model and control a non-linear system ». Ph.D. Thesis, Liverpool John Moores University, UK. (1994)
- [Farl 93]** Farlow, S.J. « *Partial Differential Equations for Scientists and Engineers* ». 2^{ed}. Dover publications. New York. (1993).
- [Garc 89]** Garcia, C.E., Prett, D.M. and Morari, M. « *Model predictive control: Theory and practice, asurvey* ». Automatica, Vol. 25, pp.335-348, (1989)
- [Gera 90]** Gerald, C.F. et Wheatley, P.O. « *Applied Numerical Analysis* ». Addison -Wesley. New York. (1990).
- [Glow 96]** Glowinski, R. et He, J.W. « *On control problems for some convection-reaction-diffusion Systems* ». In: Conference on Decision and Control (IEEE, Ed.). Kobe,Japan. pp.3717-3722. (1996)
- [Gure 69]** Gurel, O. et Lapidus, L. « *A guide to the generation of lypunov functions* ». Industrial and engineering chemistry Vol .6l, N° 3,pp. 30-41. (1969).
- [Gust 80]** Gustafson, K.E. « *Introduction to Partial Differental equations and Hilbert Space Methods* ». John Wiew and Sons. New York, (1980).
- [Haga 96]** Hagan, M.T., Demuth, H.B. and Beale, M.H. « *Neural Network Design* ». Boston, MA :PWS Publishing, (1996).
- [Haga 94]** Hagan, M.T. and Menhaj, M. « *Training feedforward networks with the Marquardt algorithm* ». IEEE Transactions on Neural Networks, Vol. 5, N° 6, pp. 989-993, (1994).
- [Hanc 95]** Hanczyc, E.M. et Palazoglu, A. « *Nonlinear control of a distributed parameter process: The case of multiple characteristics.* », Industrial Engineering and Chemical Research N° 34, pp.4406-4412, (1995).
- [Hann 95]** Hanna, O.T. et Sandail, O.C. « *Computational Methods in Chemical Engineerting* ». Prentice Hall. Upper Saddle River, NY. (1995).
- [Hech 89]** Hecht-Nielsen, R., « *Theory of the Backpropagation for Neural Network* », in "Proc. Int. Joint Conf. on Neural Networks", Washington D.C, pp.18-22, June 1989, (1989)
- [Hens 98]** Henson, M.A. « *Nonlinear model predictive control: current status and future Directions* ». Computers Chem. Engng., Vol. 23, N°. 2, pp.187-202, (1998)
- [Hong 94]** Hong, K.S. et Bentsman, J. « *Direct adaptive control of parabolic systems: Algorithm synthesis and convergence and stability analysis* ». IEEE Transaction on Automatic Control, Vol. 39, N°10, pp.2018-2033, (1994)
- [Illlo 02]** Illoul, R., Selatnia, A. et Boulerouah, A. « *Commande prédictive généralisée d'une colonne d'absorption* ». 4^{eme} Journées Francophones sur les réacteurs Gaz-Liquide, Liège (2002).
- [Krey 78]** Kreyszig, E. « *Introductory Functional Analysis with Applications* ». John Wiley & Sons. New York. (1978).
- [Kuo 98]** Kuo, E. « *Automatic Control* ». John Wiley et Sons. New York. (1998)
- [Naji 95]** Najim, K., et Ruiz, V. « *Long range predictive control of an absorption packed column* ». Applied Mathematical Journal, Vol. 19, N°1, pp.39-45 (1995).
- [Naji 91]** Najim, K. « *Modelling and self-ajusting control of an absorption column* ». Internationnal Journal of Adaptive Control and Signal Processing, N° 5, pp.335-345 (1991).
- [Nare 90]** Narendra, K. S. and K. Parthasarathy,. « *Identification and Control of Dynamical Systems using Neural Networks* », IEEE Trans. Neural Networks, Vol.1, N°.1, pp 4-27, (1990).
- [Park 95]** Park, S.K.. « *Application of Petrov-Galerkin finite element method to nonlinear transient diffusion-convection-reaction system* ». Chemical Engineering Communication, N°139, pp.159-200, (1995)

- [Petr 80] Petrovski, D. « *A design scheme for multivariable output constrained PI regulators with applications to absorption column* », Automatic Control Theory Applications, N°8, pp.61-69. (1980)
- [Ping 84] Pinglot, D.P. « *Commande optimale et sous optimale d'un système hyperbolique non linéaire : Colonne d'absorption* ». Doctorat d'Etat en Automatique, Toulouse (1984)
- [Pott 97] Pottmann, M. and Seborg, D.E. « *A nonlinear predictive control strategy based on radial basis function models* ». Computers Chem. Engng, vol. 21, pp. 965-980. (1997)
- [Pott 92] Pottmann, M. and Seborg, D.E. « *A nonlinear predictive control strategy based on radial basis function networks* ». Proc. Dycord, pp.351-356. (1992)
- [Rand 95] J.M.Randers, « *Algorithmes génétiques et réseaux de neurones* », édition HERMES, (1995).
- [Rawl 94] Rawlings, J.B., Meadows, E.S. and Muske, K.R. « *Nonlinear model predictive control: a tutorial and survey* ». Proc. Advanced Control of Chemical Processes, pp. 185-197. (1994)
- [Ray 81] Ray, W.H. « *Advanced Process Control* », Vol. 376 of McGraw-Hill Chemical Engineering Series. McGraw-Hill. Montréal, (1981).
- [Ray 78] Ray, W.H. et Lainiotis, D.G. « *Distributed Parameter systems* ». Dekker. New York. (1978)
- [Redd 90] Reddy, J.N. « *An Introduction to the Finite Element Method* ». McGraw-Hill, Montreal. (1993).
- [Rich 78] Richalet, J., Rault, A, Testud, J.L and Papon, J. « *Model predictive heuristic control: application to industrial processes* ». Automatica , Vol. 14, N° 5, pp.413-428. (1978)
- [Rume 86] Rumelhart, D.E., Hinton, G.E., and Williams, R.J. « *Learning representations by backpropagations errors* ».Nature, Vol. 323, pp. 533-536, (1986).
- [Russ 75] Russell, R.D and Shampine, L.F. « *Numerical methods for singular boundary value problems* ». SIAM J.Numer. Anal., N° 12, pp.13-36, (1975).
- [Shan 00] Shang, H., Forbes, F. et Guay, M. « *Feedback control of hyperbolic pde systems* ».In: ADCHEM. Pisa, Italy. (2000)
- [Skee 90] Skeel, R.D and Berzins, M. « *A method for the spatial discretization of parabolic equations in one space variable* ». SIAM Journal Science. Statistical. Comput. Vol.11, N°1, pp.1-32 January 1990, (1990).
- [Sela 02] Selatnia, A. « *Les réacteurs polyphasiques* ». Communication de Louvain. Octobre 2002, (2002)
- [Solo 96] Soloway, D. and Haley, P.J. « *Neural Generalized Predictive Control* ». Proceedings of the 1996 IEEE International Symposium on Intelligent Control, pp. 277-281. (1996).
- [Vand 97] Vandoren, V.J. « *Multivariable controllers enter the mainstream* ». Control Engineering, Vol. 44, N° 4, pp. 107-112. (1997).
- [Ven 76] Ven Der Weg, R. « *Sur la modélisation et l'optimisation d'une colonne d'absorption* ». Thèse de Doctorat d'Etat. Toulouse (1976).
- [Verm 97] Vanna, A. et M. Morbidelli. « *Mathematical Methods in Chemical Engineering* »,Oxford University Press. New York. (1997)
- [Vill 78] Villadsen, J. et Michelsen, M.L. « *Solution of differential equation modes; by polynomial approximation* ». Prentice-Hall International series in the physical and chemical engineering sciences. Prentice Hall. Toronto. (1978)
- [Werb 92] Werbos, P. J., McAvoy, T. and Su, T. « *Neural Networks, System Identification and Control in the Chemical Process Industries* », in D. A. White and D. A. Sofge, Eds., "Handbook of Intelligent Control", Van Nostrand Reinhold, New York, NY (1992)
- [Zieg 95] Ziegler, J.G. and Nichols, N.B. « *Optimum settings for automatic controllers* ».Trans. ASME, Vol. 64, N° 11, pp. 759-768. (1942).