**Université KASDI-MERBAH Ouargla**

**Faculté des Sciences Appliquées**

**Département de Génie des Procédés**

# Mémoire

Présenté pour l'obtention du diplôme de

## MASTER ACADEMIQUE

**Domaine :** Sciences et Technologies.
**Filière :** Génie des Procédés.
**Spécialité** : Génie Chimique.

Présenté par :

Youcef BEN YOUCEF

**Thème :**

# Simulation par les réseaux de neurones du comportement dynamique d'un réacteur continu parfaitement agite

Soutenu publiquement le : /10/2020
Devant le jury composé de :

| | | | |
|---|---|---|---|
| Mr. | MAA | Président | UKM Ouargla. |
| Mr. | MCA | Examinateur | UKM Ouargla. |
| Mr. Salah DOUNIT | Pr | Encadreur | UKM Ouargla. |

Année universitaire : 2019/2020

# Remerciement

*Avant tout, je remercie le bon Dieu, le tout puissant de m'avoir donné la patience et la force nécessaire pour mener à terme ce travail.*

*Ensuite, Mes sincères remerciements vont à **Pr. S. DOUNIT** pour son aide, ses conseils précieux, ses encouragements incessants durant la réalisation de ce travail, car il s'est beaucoup investi pour que ce travail soit un succès espéré.*

*Je tiens à témoigner toute ma reconnaissance à **Mr**....., président du jury de soutenance, à **Mr**....., examinateur de ce manuscrit, d'avoir accepté de juger ce travail. Je les remercie d'avance pour leurs remarques et suggestions.*

*Je tiens aussi à témoigner ma reconnaissance à toute les personnes ayant aidé de près ou de loin et m'ont apporté leurs sollicitudes pour accomplir de ce travail.*

# DÉDICACE

*À mes parents*

*À mes frères et sœurs*

*A tous mes enseignants*

*A tous mes amis*

SOMMAIRE :

SOMMAIRE : ---------- I

Liste des figures ---------- IV

Liste des tableaux ---------- IV

INTRODUCTION GENERALE : ---------- 2

**CHAPITRE I : ÉLEMENTS DE BIBLIOGRAPHIE** ---------- 3

I. LES RÉSEAUX DE NEURONES : ---------- 4

I.1. Introduction : ---------- 4

I.2. Historique : ---------- 4

I.3. Le neurone biologique. ---------- 6

I.4. Le neurone formel : ---------- 6

I.5. Fonction d'activation ---------- 7

I.6. Architecture des réseaux de neurones. ---------- 8

I.6.1. Les réseaux de neurones non bouclés : ---------- 8

I.6.2. Les réseaux de neurones bouclés : ---------- 9

I.7. Apprentissage du réseau : ---------- 10

I.7.1. Apprentissage supervisé : ---------- 10

I.7.2. Apprentissage renforcé : ---------- 11

I.7.3. Apprentissage non supervisé. ---------- 11

I.8. Conception d'un réseau de neurones : ---------- 11

I.9. Modélisation de procédé : ---------- 12

I.10. Applications : ---------- 13

I.11. Les avantages des réseaux de neurones : ---------- 13

I.12. Les inconvénients des réseaux de neurones : ---------- 14

I.13. Conclusion : ---------- 14

II. LES RÉACTEURS CHIMIQUES : ---------- 15

II.1. Définition : ---------- 15

II.2. Critères de classification des réacteurs : ---------- 15

II.2.1. Nature des phases en présence :---------- 16

II.2.2. Mode de circulation des phases. ---------- 16

II.2.3. Le régime thermique.---------- 16

II.2.4. Mode de fonctionnement : ---------- 17

II.2.5. Mode d'écoulement de mélange réactionnel. ---------- 17

III. LE PROPYLÈNE GLYCOL ---------- 18

III.1. Définition : ---------- 18

III.2. Utilisation.---------- 19

**CHAPITRE II : PARTIE PRATIQUE ET MODELISATION** ---------- 20

I. Introduction :---------- 21

II. Base et algorithme d'apprentissage : ---------- 21

III.L'algorithme de rétro propagation : ---------- 21

III.1. Cas de la couche de sortie : ---------- 22

III.2. Cas de la couche cachée : ---------- 25

IV.Présentation du système modélisé : ---------- 28

IV.1. Production de propylène glycol dans un RCPA avec refroidissement externe : 28

IV.2. Caractéristiques du réacteur et conditions opératoires : ---------- 29

IV.3. C Comparaison résolution par transformée de Laplace et transformée en Z. :-- 30

IV.3.1. La première méthode : La transformée de Laplace ---------- 31

VI.3.2 Deuxième méthode : Transformée en Z : ---------- 32

V. L'utilisation de logiciel Fortran :---------- 35

VI. Synthèse du modèle neuro-mimétique du réacteur continu parfaitement agité :---------- 35

VI.1. Perturbation sur la concentration de « A » à l'entrée.---------- 35

VI.1.1. Génération de la base de données.---------- 35

VI.1.1.A. Pour l'espèce B :---------- 35

VI.1.1.B. Pour l'espèce C :---------- 40

VI.1.2. Synthèse du modèle neuronal :---------- 45

VI.2. Perturbation sur le débit volumique du liquide. ---------- 47

VI.2.1. Génération de la base de données :---------- 47

VI.2.2. Synthèse du modèle neuronal :---------- 51

VII. Conclusion : ---------- 53

CONCLUSION GENERALE : ---------- 54

BIBLIOGRAPHIE---------- 55

# Liste des figures

Figure I.1 Neurone biologique. ---------- 6

Figure I.2 : La structure d'un neurone artificiel.---------- 7

Figure I.3 : Différents types de fonction de transfert pour le neurone artificiel.---------- 8

Figure I.4 : Architecture d'un réseau de neurones non bouclé.---------- 9

Figure I.5 : Architecture d'un réseau de neurones bouclé. ---------- 10

Figure I.6. Organigramme de conception d'un réseau de neurones.---------- 12

Figure I.7. Formule chimique du propylène glycol.---------- 18

Figure II.1 Organigramme représentant l'algorithme de réseau de neurone du modèle. ------ 28

Figure II.2 Schéma d'un CSTR avec double enveloppe de refroidissement. ---------- 30

Figure II.3 : Les courbes des équations continu et discrète du CAS ---------- 34

Figure II.4 Concentration de réactif B en fonction de temps ---------- 40

Figure II.5 Concentration de produit C en fonction de temps ---------- 45

Figure II.6 Architecture de réseau du modèle---------- 46

Figure II.7 Évolution de la sortie du procédé et celle du réseau---------- 47

Figure II.8 Variations de la concentration de A en fonction de temps (échelon sur le débit volumique) ---------- 50

Figure II.9 Architecture de réseau du modèle de Q ---------- 51

Figure II.10 Signal de l'entrée (variation du débit volumique). ---------- 52

Figure II.11: comparaison entre la sortie prédite par le réseau neuronal et la solution exacte. 53

# Liste des tableaux

Tableau I.1 Propriétés du propylène glycol. ---------- 19

Tableau II.1 Paramètres du réacteur et de la cinétique réactionnelle. ---------- 29

Tableau II.2 Propriétés thermodynamiques des espèces ---------- 29

# INTRODUCTION GENERALE :

Les réseaux de neurones, fabriques de structures cellulaires artificielles, constituent une approche permettant d'aborder sous des angles nouveaux les problèmes de perception, de mémoire, d'apprentissage et de raisonnement. Ils s'avèrent aussi des alternatives très prometteuses pour contourner certaines des limitations des ordinateurs classiques. Grace à leur traitement parallèle de l'information et à leurs mécanismes inspirés des cellules nerveuses (neurones), ils infèrent des propriétés émergentes permettant de solutionner des problèmes jadis qualifiés de complexes [1].

Les réseaux de neurones artificiels appartiennent à la catégorie des techniques statistiques de classification automatique. Leur architecture ainsi que leur fonctionnement, qui sont inspirés par la massive inter connectivité du cerveau humain et sa capacité à résoudre des problèmes non linéaires sans faire d'hypothèses à priori sur les données, en font un outil performant dans l'abstraction et la visualisation de données.

L' objectif de notre étude est de modéliser un système dynamique décrit par une équation différentielle par les réseaux de neurones. Nous avons choisi de modéliser le comportement dynamique d' un réacteur continu parfaitement agité lors de la mise en œuvre de la réaction de synthèse du propylène glycol par hydrolyse de l'oxyde de propylène. Le propylène glycol ($CH3 - CHOH - CH2OH$) est une composition chimique à multiples usages. Dénommé 1,2 diol ou dihydroxypropane ou encore methylglycole, il fait partie des compositions chimiques des groupes hydroxyle à forme géminale ou vicinale (c'est dire composition à deux ou plusieurs atomes collés avec un autre similaire).

La première partie de ce mémoire est consacrée à la présentation d'un aperçu général sur les réseaux de neurones c'est-à-dire leur architecture, leur fonctionnement, leur utilisation, et leur type…etc. Ensuite, on présente un état de l'art sur les types des réacteurs chimiques, critère de classification et leur fonctionnement. Dans la partie pratique, on s'intéresse à la méthode de génération des bases de données relatives à l'apprentissage et à la validation du modèle. La synthèse des réseaux et la validation des prédictions constitue la dernière section de ce mémoire.

# Chapitre I : Éléments de bibliographie

# I. LES RÉSEAUX DE NEURONES :

## I.1. Introduction :

Les réseaux de neurones connaissent depuis quelques années un succès croissant dans divers domaines des sciences de l'ingénieur, celui du génie des procédés n'échappe pas à cette règle. Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'application des réseaux de neurones aux procédés chimiques.

Nous commençons donc cette première partie de ce chapitre par l'historique des réseaux de neurones, nous présenterons ensuite les définitions et notations de base relatives aux réseaux de neurones, nous poursuivrons en exposant les types et la méthodologie d'apprentissage. Nous terminerons par la présentation de diverses applications qui sont destinées à montrer que dans le domaine des procédés chimiques ils sont très adaptés.

## I.2. Historique : [1]

L'origine de l'inspiration des réseaux de neurones artificiels remonte à *1890* où W. James, célèbre psychologue américain, introduit le concept de mémoire associative. Il propose ce qui deviendra une loi de fonctionnement pour l'apprentissage des réseaux de neurones, connue plus tard sous le nom de loi de Hebb. Quelques années plus tard, en *1949,* J. Mc Culloch et W. Pitts donnent leurs noms à une modélisation du neurone biologique (un neurone au comportement binaire). Ce sont les premiers à montrer que des réseaux de neurones formels simples peuvent réaliser des fonctions logiques, arithmétiques et symboliques complexes. C'est ensuite que D. Hebb, physiologiste américain, présente en *1949* les propriétés des neurones par le conditionnement chez l'animal. Ainsi, un conditionnement de type pavlovien tel que, nourrir tous les jours à la même heure un chien, entraîne chez cet animal la sécrétion de salive à cette heure précise même en l'absence de nourriture.

La loi de modification des propriétés des connexions entre neurones qu'il propose, explique en partie ce type de résultats expérimentaux.

Les premiers succès de cette discipline remontent à *1957,* lorsque F. Rosenblatt développe le modèle du Perceptron. Il construit le premier neuro-ordinateur basé sur ce modèle et l'applique au domaine de la reconnaissance des formes. Notons qu'à cette époque les moyens à sa disposition étaient limités et c'était une prouesse technologique que de réussir à faire fonctionner correctement cette machine plus de quelques minutes. C'est alors qu'en *1960,*

l'automaticien B. Widrow développe le modèle Adaline (Adaptative Linear element). Dans sa structure, le modèle ressemble au Perceptron, cependant la loi d'apprentissage est différente.

Celle-ci est à l'origine de l'algorithme de rétropropagation de gradient très utilisé aujourd'hui avec les Perceptrons Multi Couches. M. Minsky et S. Papert publient ensuite en *1969* un ouvrage qui met en évidence les limitations théoriques du Perceptron. Ces limitations concernent l'impossibilité de traiter des problèmes non linéaires en utilisant ce modèle.

Quelques années d'ombre se sont ensuite succédées de *1967* à *1982*. Le renouveau de cette discipline reprend en *1982* grâce à J. J. Hopfield, un physicien reconnu. Au travers d'un article court, clair et bien écrit, il présente une théorie du fonctionnement et des possibilités des réseaux de neurones. Alors que les auteurs s'acharnent jusqu'alors à proposer une structure et une loi d'apprentissage, puis à étudier les propriétés émergentes, J. J. Hopfield fixe préalablement le comportement à atteindre par son modèle et construit, à partir de là la structure et la loi d'apprentissage correspondant au résultat escompté. Ce modèle est aujourd'hui encore très utilisé pour des problèmes d'optimisation. On peut citer encore la Machine de Boltzmann en *1983* qui était le premier modèle connu, apte à traiter de manière satisfaisante les limitations recensées dans le cas du Perceptron. Mais l'utilisation pratique s'avère difficile, la convergence de l'algorithme étant extrêmement longue (les temps de calcul sont considérables). C'est ensuite qu'en *1985* la rétro-propagation de gradient apparaît. C'est un algorithme d'apprentissage adapté au Perceptron Multi Couches. Sa découverte est réalisée par trois groupes de chercheurs indépendants. Dès cette découverte, nous avons la possibilité de réaliser une fonction non linéaire d'entrée/sortie sur un réseau, en décomposant cette fonction en une suite d'étapes linéairement séparables. Enfin, en *1989* Moody et Darken exploitent quelques résultats de l'interpolation multi variables pour proposer le Réseau à Fonctions de base Radiales (*RFR*), connu sous l'appellation anglophone *Radial Basis Function network* (*RBF*). Ce type de réseau se distingue des autres types de réseaux de neurones par sa représentation locale.

De nos jours, l'utilisation des réseaux de neurones dans divers domaines ne cesse de croître. Les applications en sont multiples et variées.

### I.3. Le neurone biologique.

En biologie, un neurone est une cellule nerveuse dont la fonction est de transmettre un signal électrique dans certaines conditions. Il agit comme un relai entre une couche de neurones et celle qui la suit. Les caractéristiques des neurones sont encore mal connues (et font l'objet de recherches) mais on connait leur principe d'action. [2]

Le corps d'un neurone **Figure I.1** est relié d'une part à un ensemble de dendrites (entrées du neurone) et d'autre part à un axone, partie étirée de la cellule, qui représentera pour nous sa sortie. Le neurone étudié est connecté aux neurones qui l'environnent : il reçoit au niveau de ses dendrites les signaux électriques des neurones "en amont", propagés par les axones de ces derniers. Les charges électriques s'accumulent dans le neurone jusqu'à dépasser un certain seuil : à ce moment-là, la transmission du signal électrique se déclenche via son axone vers d'autres neurones "en aval". La transmission entre deux neurones n'est pas directe. En fait, il existe un espace intercellulaire de quelques dizaines d'Angströms entre l'axone du neurone afférent et les dendrites du neurone efférent. La jonction entre deux neurones est appelée synapse.

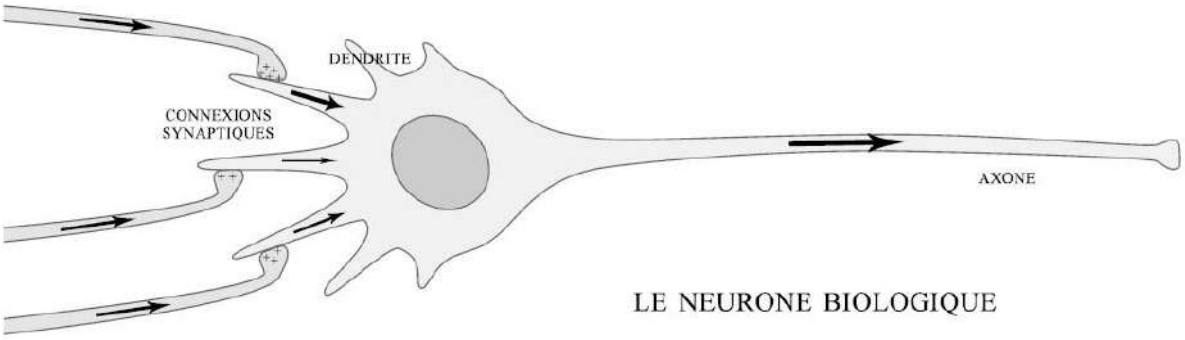



**Figure I.1 Neurone biologique.**

### I.4. Le neurone formel : [1]

La **Figure I.2** montre la structure d'un neurone artificiel. Chaque neurone artificiel est un processeur élémentaire. Il reçoit un nombre variable d'entrées en provenance de neurones amonts. À chacune de ces entrées est associée un poids *w*, abréviation de weight (« poids » en anglais) représentatif de la force de la connexion. Chaque processeur élémentaire est doté d'une sortie unique, qui se ramifie ensuite pour alimenter un nombre variable de neurones avals. À chaque connexion est associée un poids.

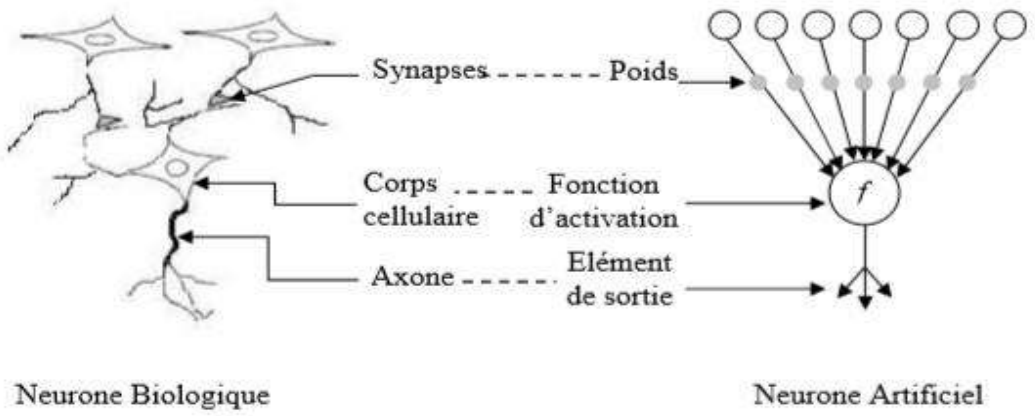



**Figure I.2 : La structure d'un neurone artificiel.**

Le neurone réalise alors trois opérations sur ses entrées :

- *Pondération :* multiplication de chaque entrée par un paramètre appelé poids de connexion selon l'expression suivante :

$$e_i = \sum_{j=1}^{n} W_{ij} * X_i$$

Où :

$e_i$ : Entrée globale du neurone i

$X_i$ : Signaux d'entrée du neurone i

$W_{ij}$ : Poids associé au signal reliant le neurone i au neurone j de la couche précédente.

- *Sommation :* une sommation des entrées pondérées est effectuée
- *Activation :* passage de cette somme dans une fonction, appelée fonction d'activation.

La valeur calculée est la sortie du neurone qui est transmise aux neurones suivants.

### I.5. Fonction d'activation : [1]

La fonction d'activation (ou fonction de transfert) sert à convertir le résultat de la somme pondérée des entrées d'un neurone en une valeur de sortie. Cette conversion s'effectue par un calcul de l'état du neurone en introduisant une non-linéarité dans le fonctionnement du neurone. Les fonctions de seuillage présentent généralement trois intervalles :

- En dessous du seuil, le neurone est non actif.
- Aux alentours du seuil, une phase de transition.
- Au-dessus du seuil, le neurone est actif.

Il existe de nombreuses formes possibles pour la fonction de transfert. Les plus courantes sont présentées sur la **Figure 1.3**

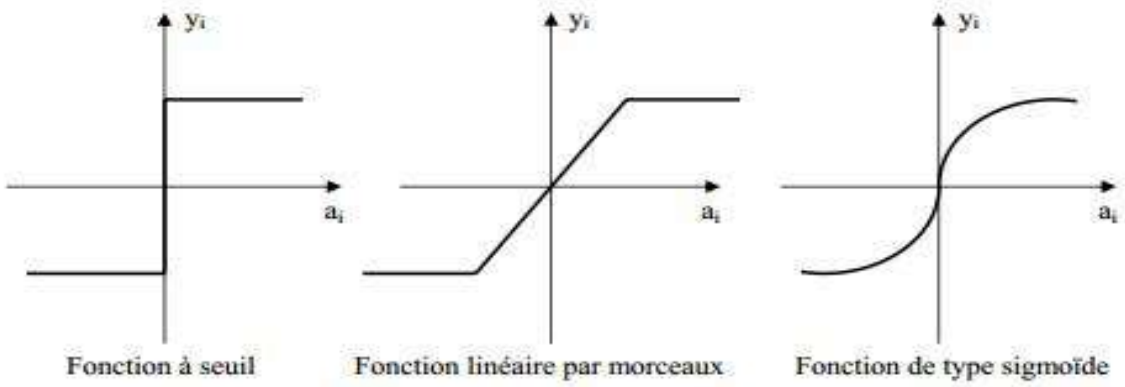



**Figure I.3 : Différents types de fonction de transfert pour le neurone artificiel.**

La fonction sigmoïde se présente comme une approximation continûment dérivable de la fonction d'activation linéaire par morceaux ou de la fonction seuil. Elle présente l'avantage d'être régulière, monotone, continûment dérivable, et bornée entre 0 et 1 :

$$f(x) = \frac{1}{1+e^{(-x)}}$$

### I.6. Architecture des réseaux de neurones.

Un réseau neuronal se compose de plusieurs neurones ordonnés dans des plans appelés couches. Les neurones peuvent être reliés par des connexions pondérées avec les neurones des autres couches ou avec celles de la même couche.

On distingue deux structures de réseau, en fonction du graphe de leurs connexions, c'est-à-dire du graphe dont les nœuds sont les neurones et les arêtes les « connexions » entre ceux-ci :

- Les réseaux de neurones statiques (ou acycliques, ou non bouclés).
- Les réseaux de neurones dynamiques (ou récurrents, ou bouclés).

#### I.6.1. Les réseaux de neurones non bouclés :

Un réseau de neurone non bouclé (dit aussi statique) est donc représenté graphiquement par un ensemble de neurones connectés entre eux, l'information circulant des entrées vers les sorties sans « retour en arrière » ; c'est-à-dire à partir d'un neurone quelconque, en suivant les connexions, on ne peut pas revenir au neurone de départ. [4]

La **Figure 1.4** représente un réseau de neurones non bouclé qui a une structure particulière, très fréquemment utilisée : il comprend des entrées, une couche de neurones "cachés" et des neurones de sortie. Les neurones de la couche cachée ne sont pas connectés entre eux. Cette structure est appelée *Perceptron multicouche*.

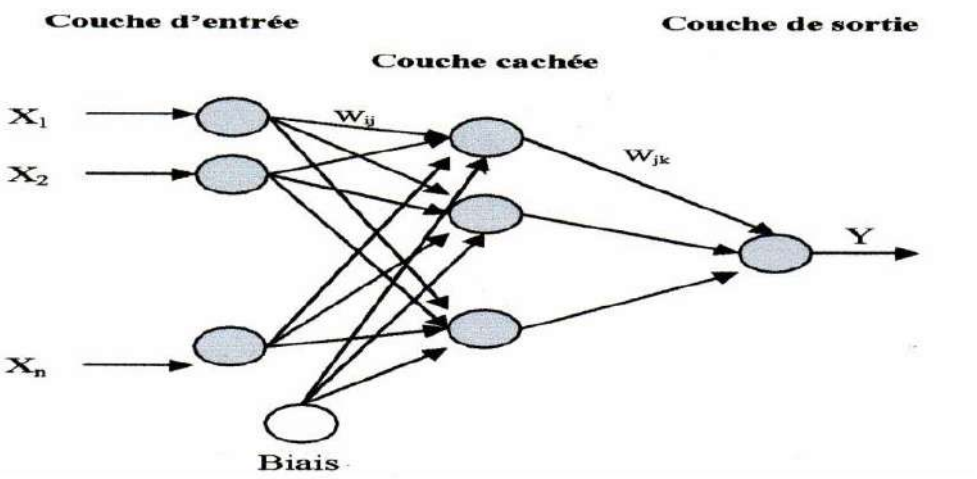



**Figure I.4 : Architecture d'un réseau de neurones non bouclé.**

I.6.2. Les réseaux de neurones bouclés :

L'architecture la plus générale pour un réseau de neurones est le « réseau bouclé », dont le graphe des connexions est cyclique : lorsqu'on se déplace dans le réseau en suivant le sens des connexions, il est possible de trouver au moins un chemin qui revient à son point de départ (un tel chemin est désigné sous le terme de « cycle »). La sortie d'un neurone du réseau peut donc être fonction d'elle-même ; cela n'est évidemment concevable que si la notion de temps est explicitement prise en considération. Un réseau de neurones bouclé à temps discret est donc régi par une (ou plusieurs) équations aux différences non linéaires, résultant de la composition des fonctions réalisées par chacun des neurones et des retards associés à chacune des connexions. Les réseaux de neurones bouclés sont utilisés pour effectuer des tâches de modélisation de systèmes dynamiques, de commande de processus, ou de filtrage. [4]

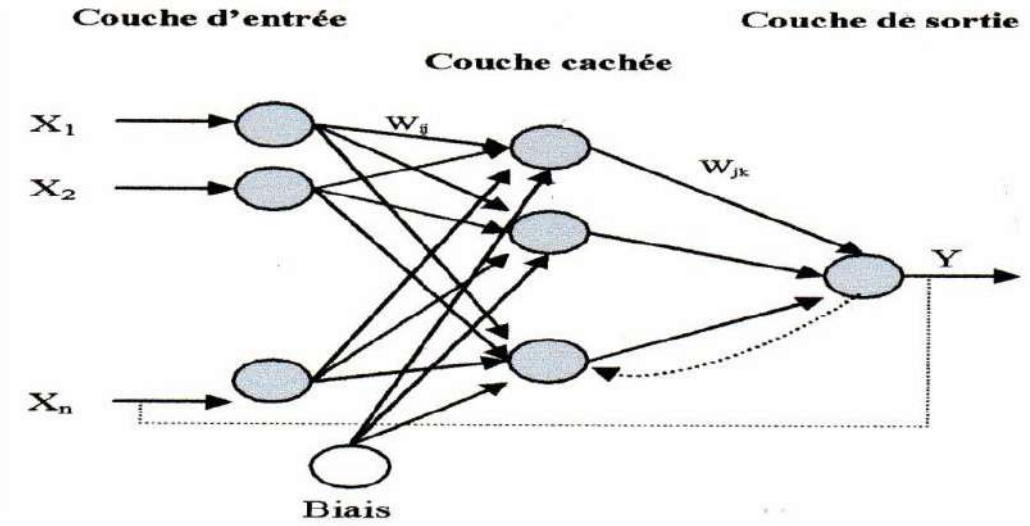



**Figure I.5 : Architecture d'un réseau de neurones bouclé.**

**I.7. Apprentissage du réseau :** [5]

L'apprentissage est une phase du développement d'un réseau de neurones durant laquelle le comportement du réseau est modifié jusqu'à l'obtention du comportement désiré. Toute l'information que peut contenir un réseau neuronal réside dans les poids synaptiques. L'apprentissage consiste donc à ajuster ces derniers de telle façon qu'il puisse générer correctement la sortie correspondante à chaque point de l'espace d'entrée.

Il existe de nombreux types de règles d'apprentissage qui peuvent être regroupées en trois catégories : les règles d'apprentissage supervisé, non supervisé et renforcé. Mais l'objectif fondamental de l'apprentissage reste le même : soit la classification, l'approximation de fonction ou encore la prévision

*I.7.1. Apprentissage supervisé :*

Un apprentissage est dit supervisé lorsque l'on force le réseau à converger vers un état final précis, en même temps qu'on lui présente un motif. Ce genre d'apprentissage est réalisé à l'aide d'une base d'apprentissage, constituée de plusieurs exemples de type entrées-sorties. La procédure usuelle dans le cadre de la prévision est l'apprentissage supervisé qui consiste à associer une réponse spécifique désirée à chaque signal d'entrée. La modification des poids s'effectue progressivement jusqu'à ce que l'erreur (ou l'écart) entre les sorties du réseau (ou résultats calculés) et les résultats désirés soient minimisés. Cet apprentissage n'est possible

que si un large jeu de données est disponible et si les solutions sont connues pour les exemples de la base d'apprentissage.

*I.7.2. Apprentissage renforcé :*

L'apprentissage renforcé est une technique similaire à l'apprentissage supervisé à la différence qu'au lieu de fournir des résultats désirés au réseau, on lui accorde plutôt un grade (ou score) qui est une mesure du degré de performance du réseau après quelques itérations. Les algorithmes utilisant la procédure d'apprentissage renforcé sont surtout utilisés dans le domaine des systèmes de contrôle.

*I.7.3. Apprentissage non supervisé.*

L'apprentissage non supervisé consiste à ajuster les poids à partir d'un seul ensemble d'apprentissage formé uniquement de données. Aucun résultat désiré n'est fourni au réseau. Qu'est-ce que le réseau apprend exactement dans ce cas ? L'apprentissage consiste à détecter les similarités et les différences dans l'ensemble d'apprentissage. Les poids et les sorties du réseau convergent, en théorie, vers les représentations qui capturent les régularités statistiques des données. Ce type d'apprentissage est également dit compétitif et/ou coopératif. L'avantage de ce type d'apprentissage réside dans sa grande capacité d'adaptation reconnue comme une auto organisation. L'apprentissage non supervisé est surtout utilisé pour le traitement du signal et l'analyse factorielle.

**I.8. Conception d'un réseau de neurones :** [6]

Les réseaux de neurones réalisent des fonctions non linéaires paramétrées. Leurs mises en œuvre nécessitent :

- La détermination des entrées et des sorties pertinentes, c'est à dire les grandeurs qui ont une influence significative sur le phénomène que l'on cherche à modéliser.
- La collecte des données nécessaires à l'apprentissage et à l'évaluation des performances du réseau de neurones.
- La détermination du nombre de neurones cachés nécessaires pour obtenir une approximation satisfaisante.
- La réalisation de l'apprentissage
- L'évaluation des performances du réseau de neurones à l'issue de l'apprentissage

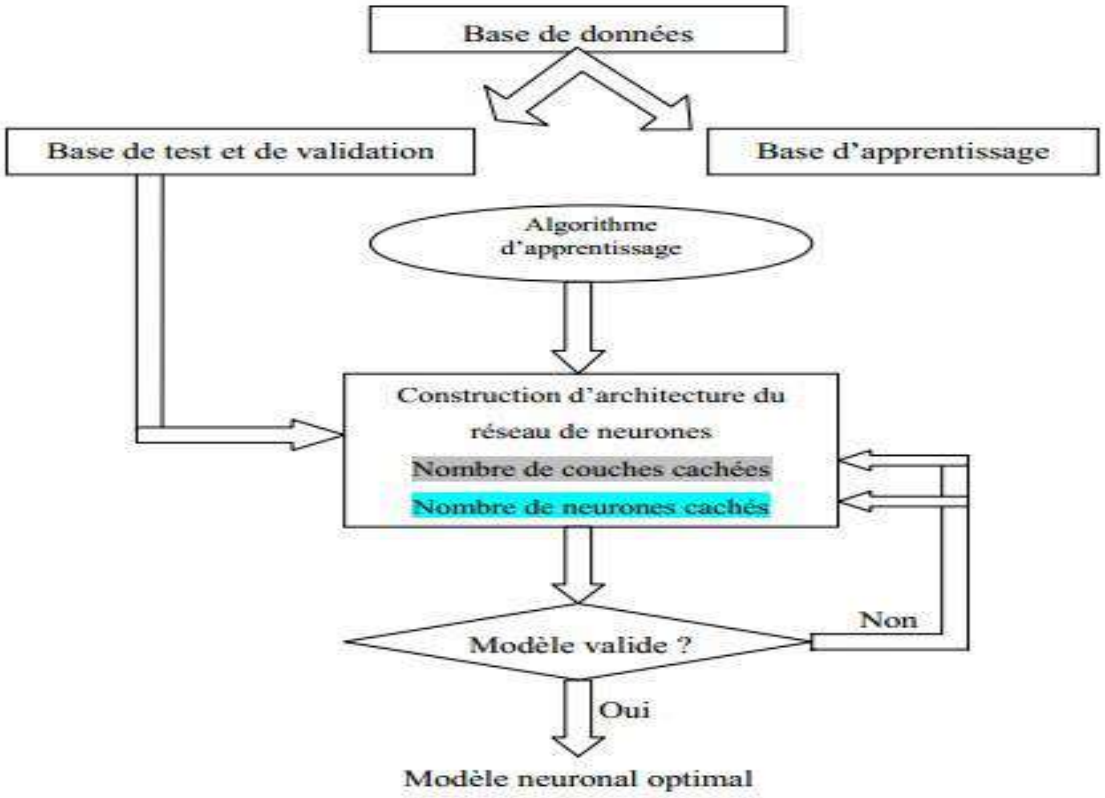



**Figure I.6. Organigramme de conception d'un réseau de neurones.**

### I.9. Modélisation de procédé :

La modélisation par les réseaux de neurones, notamment le perceptron multicouche, passe par deux étapes :

- Le choix d'une architecture adéquate du réseau, c'est-à-dire le nombre de couches cachées, le nombre de neurones dans la couche d'entrée et dans chacune des couches cachées.
- La détermination des poids qui correspondent à une reproduction du comportement du procédé par le réseau. [6]

La détermination du nombre de neurones dans la couche d'entrée se fait de la façon suivante : Considérons un processus qui contient une entrée u et une sortie réelle y. Le réseau de neurones génère une sortie future ŷ(k+1) à partir des entrées présente et passées ainsi que les sorties présentes et passées. Pour obtenir un modèle décrivant ce processus nous déterminons une certaine fonction F relient la sortie à l'entrée, c'est-à-dire nous simulons cette fonction de transfert F du procédé par une équation de type :

$$\hat{Y}(k+1) = F\left[u(k), u(k-1), u(k-2)....y(k), y(k-1), (k-2)....\right]$$

$y(k)$ : La sortie actuelle du système.

$u(k)$ : L'entrée actuelle du système.

$F(.)$ : Fonction non linéaire quelconque

On est donc ramené à l'approximation d'une fonction non linéaire F. L'erreur de prédiction (écart entre la sortie réelle et la sortie générée par le modèle) est alors définie par :

$$E(k+1) = y(yk+1) - \hat{y}(k+1)$$

### I.10. Applications : [1]

Les réseaux de neurones servent aujourd'hui à toutes sortes d'applications dans divers domaines. Par exemple, un autopilote pour avion a été développé, ou encore un système de guidage pour automobile, des systèmes de lecture automatique de chèques bancaires et d'adresses postales ont été conçu, des systèmes de traitement du signal pour différentes applications militaires, un système pour la synthèse de la parole sont produits, des réseaux sont aussi utilisés pour bâtir des systèmes de vision par ordinateur, pour faire des prévisions sur les marchés monétaires, pour évaluer le risque financier ou en assurance, pour différents processus manufacturiers, pour le diagnostic médical, pour l'exploration pétrolière ou gazière, en robotique, en télécommunication … etc.

Les réseaux de neurones ont aujourd'hui un impact considérable et, il y a fort à parier, que leur importance ira grandissant dans le futur.

### I.11. Les avantages des réseaux de neurones : [7]

- La capacité de modéliser des problèmes complexes.
- La capacité d'apprendre avec des données qui contiennent des bruits.
- La capacité d'extraire l'information nécessaire à partir d'un nombre fini d'exemples.
- La capacité de modéliser des problèmes qui présentent une grande variété de données multidimensionnelles.
- La facilité de l'implantation de la méthode d'apprentissage en continu pour les réseaux neuroniques justifie à elle seule l'utilisation de ces réseaux pour la commande des procédés.

### I.12. Les inconvénients des réseaux de neurones : [7]

- La capacité de prédiction n'est pas toujours améliorée avec plus d'apprentissage, les résultats obtenus avec lesquels il a été entraîné sont précis, mais la prédiction avec les données qui n'appartiennent pas à l'ensemble d'entraînement est faible (problème de sur - apprentissage).
- Il peut avoir une erreur moyenne très petite avec les données d'apprentissage, mais il peut ne pas justifier cette performance avec les données d'un test indépendant (problème de généralisation).
- L'absence d'interprétation de valeurs de poids (les connexions) et l'impact relatif de chaque variable d'entrée sur les variables de sorties.

### I.13. Conclusion :

Dans cette partie, nous avons introduit les définitions essentielles relatives aux réseaux de neurones. Nous avons notamment distingué entre les réseaux de neurones non bouclés ou statiques, qui réalisent des fonctions non linéaires et ceux bouclés ou dynamiques, qui réalisent des équations aux différences non linéaires. Nous avons aussi mis l'accent sur l'utilisation des réseaux de neurones comme outils de modélisation par apprentissage. Enfin, nous avons décrit les applications des réseaux de neurones en procédés chimiques.

# II. LES RÉACTEURS CHIMIQUES :

Les réacteurs chimiques sont le cœur de tous procédés chimiques. En effet les réacteurs agités continu ont une place non négligeable dans ce domaine. Ces derniers se divisent en deux catégories selon la prédominance des phénomènes mis en jeux : les phénomènes à dominante hydrodynamique (écoulement monophasique ou poly-phasique, création et suppression d'interface entre phases, etc.), et les phénomènes physiques à dominante cinétique relevant de la science des transferts. Ces derniers se produisant soit à l'intérieur d'une phase homogénéisation des concentrations et des températures), soit entre phases (dissolution d'un gaz dans un liquide) [9]

Nous commencerons, dans un premier temps, par une étude bibliographique sur les réacteurs chimiques dans laquelle seront présentées différents types de réacteurs avec classification des réacteurs chimiques en génie des procèdes.

## II.1. Définition :

Un réacteur chimique est tout appareillage permettant de réaliser une réaction chimique, c'est-à-dire de transformer des espèces moléculaires en d'autres espèces moléculaires déterminées. L'appellation des réacteurs chimiques est limitée aux cas ou la transformation chimique est effectuée dans le but de produire une ou plusieurs espèces chimiques déterminées ou d'éliminer d'un mélange un ou plusieurs composés. [9]

## II.2. Critères de classification des réacteurs : [7]

La classification des réacteurs chimiques repose sur des critères bien définis. Ces critères de classification permettent de définir un ensemble de catégories de réacteurs et d'identifier ainsi un quelconque réacteur selon ses caractéristiques pour le classer sous la catégorie appropriée. On a défini les cinq critères cité ci-dessous, et qui servaient de base à une classification :

- La nature des phases en présence
- Mode de circulation des phases
- Régime thermique
- Mode de fonctionnement
- Mode d'écoulement de mélange réactionnel (degré de mélange).

II.2.1. Nature des phases en présence :

C'est la caractéristique la plus apparente à l'échelle macroscopique

*A- Systèmes monophasiques (Homogène) :* le système réactionnel est constitué par une phase gazeuse ou une seule phase liquide.

*B- Systèmes poly phasiques (Hétérogène) :* il existe dans le milieu réactionnel deux ou plusieurs phases : gaz – liquide ; liquide – liquide ; gaz solide ; liquide – solide ; gaz – liquide – solide.

Le solide peut être aussi bien un catalyseur (n'est pas consommé par la réaction), qu'un réactif ou un produit de la transformation.

II.2.2. Mode de circulation des phases.

On distingue les circulations, à

- Courant parallèles.
- Courant croisés.
- Contre-courant.

II.2.3. Le régime thermique.

La plupart des réactions pratiquées industriellement ont des chaleurs de réaction considérables, que ce soient des réactions exothermique ou endothermique, le réacteur doit être doté des surfaces d'échange thermique capable de transférer la chaleur correspondante dans le sens convenable.

*a- Régime iso thermique :* correspond à une température de fonctionnement constante au cours du temps. Utilisé dans le cas d'un réacteur continu parfaitement agité en régime stationnaire.

*b- Régime non isotherme :* correspond à une température de fonctionnement variable au cours du temps. Utilisé dans le cas de la mise en marche d'un réacteur agité continu et dans le cas d'un réacteur agité discontinu.

*c- Régime adiabatique :* correspond à une surface d'échange nulle entre le réacteur et le milieu extérieur, autrement dit il n'y a pas d'échange de chaleur entre le réacteur et le milieu extérieur.

II.2.4. Mode de fonctionnement :

Ce critère dépend de la construction interne de réacteur et de l'écoulement du mélange réactionnel. En effet ce critère est fixé par les exigences pratiques de l'exploitation du processus chimique.

- *Mode de fonctionnement discontinu (fermé) :* la transformation chimique se déroule en fonction du temps. Il n'y a pas de flux de matière entrant ou sortant du système, Le réacteur discontinu dans ce cas opère d'une manière non-stationnaire.
- *Mode de fonctionnement semi-continu :* est réalisé soit lorsqu'une partie des réactifs est introduite tout au long de l'opération, le déchargement des produits se faisant là encore à la fin de l'opération. Ou bien, lorsque les réactifs étant chargés au début de l'opération, certains produits de la réaction sont progressivement éliminés, tandis que la transformation se déroule.
- *Mode de fonctionnement continu (ouvert) :* les appareillages continus sont dotés d'une ou plusieurs entrées pour introduire les réactifs et d'une ou plusieurs sorties par lesquels les produits de la transformation sont évacués. Le réacteur continu est conçu pour travailler en régime stationnaire.

Pour ce type de réacteurs se manifeste un écoulement interne sous diverses formes, qui dépendant de la structure interne du réacteur et des propriétés physiques du mélange réactionnel. Dans ce sens, il donc indispensable de définir les types d'écoulements pour définir et classer les cas rencontrés, d'où l'intérêt de faire la différence entre ces modes d'écoulements pour attribuer à chaque type réacteurs continus ces caractéristiques qui le différencient par rapport aux autre. [8]

II.2.5. Mode d'écoulement de mélange réactionnel.

Le cheminement des diverses phases de leurs point d'entrée à leur point de sortie peut revêtir diverses formes, qui dépend de la structure de l'appareillage. On a deux principaux types des modes d'écoulements idéaux :

- *Écoulement de type piston (Réacteur tubulaires) :* Le flux de matière se déplace avec une vitesse désignée dans un tube. Dans ce cas, les constituants avancent en se transformant progressivement. C'est ainsi que ce type de réacteur est parfois qualifié de réacteur à gradient de concentrations. Ainsi, les concentrations de chaque espèce chimique (réactifs, produits) dépendent du temps et de l'espace.

- *Écoulement à travers un récipient parfaitement agité (Réacteurs continus parfaitement agité) :* L'écoulement du mélange réactionnel se fait dans une cuve où le mélange réactionnel est considéré parfaitement agité. Ainsi, les concentrations des constituants réactifs entrant sont différentes de celles du milieu réactionnel qui a une composition identique à celle du flux sortant du réacteur. Ceci dit, à l'entrée du réacteur on a donc une discontinuité des concentrations des constituants réactifs dans le flux entrant, alors que dans l'ensemble du milieu réactionnel les concentrations des divers constituants sont uniformes. Ces réacteurs sont désignés en anglais par l'appellation *CSTR* (Continuous Stirred Tank Reactor).

## III.LE PROPYLÈNE GLYCOL

### III.1. Définition :

Le propylène glycol ou propane-1,2-diol, appelé aussi 1,2-dihydroxypropane ou méthyle glycol, est un diol de formule chimique (CH3–CHOH–CH2OH) ayant de nombreux usages industriels ou agro pharmaceutiques, (solvant de pesticides), utilisé aussi à faibles doses comme additif alimentaire. Le propylène glycol est obtenu à partir de la réaction de l'oxyde de propylène avec l'eau pour former du mono propylène glycol, les réactions ultérieures produisant des di-propylène glycol, tri-propylène glycol et autres propylène-glycols, La figure I.6. Représente la formule chimique du propylène glycol, énantiomères (R) _ (-) à gauche et (S) _ (+) à droite et **le tableau I.1** regroupe quelques-unes de ses propriétés.

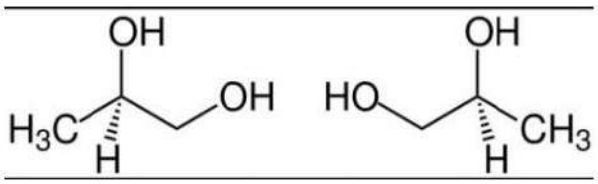



**Figure I.7. Formule chimique du propylène glycol.**

**Tableau I.1 Propriétés du propylène glycol.**

| **Formule brute** | *$C_3H_8O_2$ [Isomère]* |
|---|---|
| **État Physique** | Liquide |
| **Masse Molaire** | 76,0944 ± 0,0036 g/mol |
| **Point de fusion** | -74 °F / -59 °C |
| **Point d'ébullition** | 220 °F / 104 °C |
| **Pression de vapeur** | 0.017198 kPa (25 °C) |
| **Densité** | 1.037 |
| **Viscosité** | 0,581 poise (20 °C) |

**III.2. Utilisation.**

Le propylène glycol est utilisé principalement dans la fabrication de résines de polyesters insaturés, ainsi que dans la fabrication du di propylène glycol et du tri-propylène glycol. C'est également un composant de nombreux produits tels que : formulations d'antigel (automobiles et camions légers), liquide de refroidissement grade U.S.P (laiteries, brasseries, épiceries), liquide de refroidissement grade industriel (systèmes de chauffage et de refroidissement de type industriel et commercial, thermopompes, etc.), fluides hydrauliques, liquides de dégivrage (avions, pistes d'atterrissage), détergents liquides, peintures et vernis (à base de résines alkydes), lubrifiants, plastifiants (encres d'imprimerie).

En tant qu'ingrédient alimentaire, pharmaceutique ou cosmétique, le propylène glycol est classé « généralement reconnu inoffensif » (GRAS, "generally regarded as safe") par la FDA (Food and Drug Administration) américaine. On l'utilise donc comme solvant, émulsifiant, humectant, émollient et agent de conservation de ces produits. [12]

# Chapitre II : Partie pratique et modélisation

# I. Introduction :

Les réseaux de neurones peuvent approximer n'importe quelle fonction continue avec suffisamment de précision à mesure que le nombre de neurones augmente sans limite. En outre, ils ont été appliqués avec succès dans beaucoup de problèmes complexes y compris la reconnaissance de la parole, l'identification des chiffres manuscrits, le diagnostic médical et la modélisation de divers systèmes physiques, chimiques, économiques, ou autres.

Dans cette partie, notre objectif est de modéliser un système dynamique décrit par un ensemble d'équations différentielles non linéaires. Il s'agit en l'occurrence d'un réacteur continu parfaitement agité dans lequel la réaction de premier ordre de synthèse du propylène glycol à partir de l'hydrolyse de l'oxyde de propylène est mise en œuvre. Ce modèle permettra de tester la stabilité du réacteur lorsque certaines de ses entrées sont perturbées par rapport à leurs valeurs en régime permanent.

# II. Base et algorithme d'apprentissage : [6]

Les réseaux de neurones artificiels ont la capacité de stoker de la connaissance empirique et de la rendre disponible à l'usage. Les habiletés de traitement des réseaux vont être stockées dans les poids synaptiques, obtenus par des processus d'adaptation ou d'apprentissage. L' objectif de l' apprentissage est de fourni une méthode aux réseaux afin qu' il puisse ajuster ses paramètres lorsqu' on lui présente des exemples à traiter.

Presque la totalité des réseaux de neurones on en commun un même protocole d'apprentissage celui-ci comporte quatre étapes :

- **Étape 1 :** Initialisation des poids synaptique avec des petites valeurs aléatoires.
- **Étape 2 :** Présentation du patron d'entre et propagation de l'activation des neurones.
- **Étape 3 :** Calcule de l'erreur qui dépend de la différence entre l'activation des neurones et le patron de référence.
- **Étape 4 :** Calcule du vecteur de correction à partir des valeurs de erreurs avec lequel on effectue la correction des poids synaptiques.

Les Étapes 2-3-4 sont répétées jusqu'à la fin de l'apprentissage.

# III. L'algorithme de rétro propagation : [13] [14]

Soit le couple $\vec{x}(n)$ et $\vec{d}(n)$ désignant la $n^e$ donnée d'entrainement du réseau ou :

$$\vec{x}(n) =< x_1(n),....,x_p(n) > \text{ et } \vec{d}(n) = d_1(n),.....,d_q(n) \qquad \textbf{(III.1)}$$

Correspondent respectivement aux p entrées et aux q sorties désirées du système. Cet algorithme consiste, après avoir déterminé l'erreur entre la sortie obtenue par propagation vers l'avant des entrées $\vec{x}(n)$ c' est-à-dire $\vec{y}(n)$ et la sortie exigée $\vec{d}(n)$ exprimée par l'équation **III.2** à rétro propager cette erreur à travers les couches du réseau en allant des sortie vers les entrées.

$$\vec{y}(n) =< y_1(n),....,y_q(n) > \qquad \textbf{(III.2)}$$

### III.1. Cas de la couche de sortie :

L' algorithme de rétro propagation procède à l' adaptation des poids neurone par neurone en commençant par la couche de sortie. Soit l' erreur observée pour le neurone de sortie $e_j(n)$ et la donnée d'en trainement $j$ et la donnée d'en trainement $n$.

$$e_j(n) = d_j(n) - y_j(n) \qquad \textbf{(III.3)}$$

Où $d_j(n)$ correspond à la sortie désirée du neurone $j$ et $y_j(n)$ à sa sortie observée.

- La variable $n$ représentera toujours la donnée d'entrainement c'est-`a-dire le couple contenant un vecteur d'entrées et un vecteur de sorties désirées.
- L'indice $j$ représentera toujours le neurone pour lequel on veut adapter les poids.
- On voit que cette technique dérive de la méthode du gradient qui consiste à minimiser l'erreur globale sur toute la base de données par l'équation ci-dessous :

$$E(n) = \frac{1}{2}\sum_{j\in c} e_j^2(n) \qquad \textbf{(III.4)}$$

Où $E(n)$ est la somme des erreurs quadratiques observées et $C$ est l'ensemble des neurones de sortie.

La sortie $y_j(n)$ du neurone $j$ est définie par :

$$y_1(n) = \varphi\left[v_j(n)\right] = \varphi\left[\sum_{i=0}^{r} w_{ij}(n) y_i(n)\right] \qquad \textbf{(III.5)}$$

Où $\varphi[.]$ est la fonction d'activation du neurone

$v_j(n)$ est la somme pondérée des entrées du neurone $j$.

$w_{ij}(n)$ est le poids de la connexion entre le neurone $i$ de la couche précédente et le neurone $j$ de la couche courante.

$y_1(n)$ est la sortie du neurone $i$ .

On suppose ici que la couche précédente contient $r$ neurone numérotés de 1 à $r$ que les poids $w_{j0}(n)$ correspond au biais du neurone $j$ et que l'entrée $y_0(n)$ =1.

Notons que l'indice $i$ représentera toujours un neurone sur la couche précédente par rapport au neurone $j$ .

En introduisant cette erreur, le réseau va agir sur les poids, puisqu'ils sont les seuls paramètres maniables, pour réduire au minimum l'erreur calculée.

La correction des poids se fait par la modification les poids $w_{ij}(n)$ dans le sens opposé au gradient $\frac{\partial E(n)}{\partial w_{ij}(n)}$ de l'erreur. Cette dérivée partielle représente un facteur de sensibilité. Puisqu'il y a $r$ neurone sur la couche précédent la couche de sortie, il y a aussi $r$ poids à adapter.

Par la règle de chaînage des dérivées partielles, qui nous dit que :

$$\frac{\partial f(y)}{\partial x} = \frac{\partial f(y)}{\partial y} * \frac{\partial y}{\partial x}$$

On obtient :

$$\frac{\partial E(n)}{\partial w_{ji}(n)} = \frac{\partial E(n)}{\partial e_j(n)} . \frac{\partial e_j}{\partial y_j} . \frac{\partial y_j}{\partial v_j} \frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ji}(n)} \qquad \textbf{(III.6)}$$

Et on exprime la variation de poids $\Delta w_{ji}(n)$ sous la forme suivante :

$$\Delta w_{ji}(n) = -\eta \frac{\partial E(n)}{\partial w_{ji}(n)} \qquad \textbf{(III.7)}$$

Avec $0 \leq \eta \leq 1$ représentant un taux d'apprentissage ou gain de l'algorithme.

Évaluons maintenant chacun des termes du gradient.

$$\frac{\partial E(n)}{\partial e_j(n)} = \frac{\partial \left[ \frac{1}{2} \sum_{k \in c} e_k^2(n) \right]}{\partial e_j(n)}$$

$$= \frac{1}{2} . \frac{\partial e_j^2(n)}{\partial e_j(n)}$$

$$= e_j(n)$$

$$\frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} = \frac{\partial \left[ d_j(n) - y_j(n) \right]}{y_j(n)} = -1$$

$$\frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} = \frac{\partial\left[\frac{1}{1+e^{-v_j(n)}}\right]}{v_j(n)}$$

$$= \frac{e^{-v_j(n)}}{\left[1+e^{-v_j(n)}\right]^2}$$

$$= y_j(n)\left[\frac{e^{-v_j(n)}}{1+e^{-v_j(n)}}\right]$$

$$= y_j(n)\left[\frac{e^{-v_j(n)}+1}{1+e^{-v_j(n)}} - \frac{1}{1+e^{-v_j(n)}}\right]$$

$$= y_j(n)\left[1-y_j(n)\right]$$

Et finalement :

$$\frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ji}(n)} = \frac{\partial\left[\sum_{I=0}^{r} \partial w_{ji}(n) y_i(n)\right]}{\partial w_{ji}(n)}$$

$$= \frac{\partial\left[\partial w_{ji}(n) y_i(n)\right]}{\partial w_{ji}(n)}$$

$$= y_i(n)$$

Nous obtenons donc :

$$\frac{\partial E(n)}{\partial w_{ji}(n)} = -e_j(n) y_j(n)\left[1-y_j(n)\right] y_j(n) \qquad \textbf{(III.8)}$$

Et la règle dite « delta » pour la couche de sortie s'exprime par

$$\Delta w_{ji}(n) = -\eta \frac{\partial E(n)}{\partial w_{ji}(n)} = \eta \delta_j(n) y_j(n) \qquad \textbf{(III.9)}$$

Avec $$\delta_j = e_j(n) y_i(n)\left[1-y_j(n)\right] \qquad \textbf{(III.10)}$$

Qui correspond à ce que l'on appelle « gradient local ».

Jusqu'ici, nous avons traité seulement le cas de la couche de sortie. Il reste maintenant à faire l'adaptation des poids sur les couches cachées. Mais le problème est qu'on ne dispose plus de l'erreur observée.

### III.2. Cas de la couche cachée :

Considérons maintenant le cas des neurones sur la dernière couche cachée (le cas des autres couches cachées est semblable).

La variable $n$ désignera toujours la donnée d'entrainement c'est-à-dire un couple de vecteurs d'entrées et de sortie désirées.

L'objectif sera toujours l'adaptation des poids de la couche courante en minimisant la somme des erreurs sur les neurones de la couche de sortie. Les indices i et j désignent respectivement (comme précédemment) un neurone sur la couche précédente et un neurone sur la couche courante. L'indice k servira maintenant à désigner un neurone sur la couche suivante.

Reprenons l'expression de la dérivée partielle de l'erreur totale $E(n)$ par rapport à $w_{ji}(n)$ mais en ne dérivant plus par rapport à l'erreur $e_j(n)$ car celle-ci est maintenant inconnue :

$$\frac{\partial E(n)}{w_{ji}(n)} = \frac{\partial E(n)}{\partial y_j(n)} . \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} . \frac{\partial v_j(n)}{w_{ji}(n)} \qquad \textbf{(III.11)}$$

Par rapport aux résultats obtenus pour la couche de sortie, les deux derniers termes de cette équation restent inchangés, seul le premier terme requiert d'être évalué :

$$\frac{\partial E(n)}{\partial y_j(n)} = \frac{\partial\left[\frac{1}{2}\sum_{k\in c} e_k^2(n)\right]}{y_j(n)} \qquad \textbf{(III.12)}$$

Notre problème ici, contrairement au cas des neurones de la couche de sortie, est que tous les $e_j(n)$ dans la somme ci-dessus dépendent de $y_j(n)$ .On ne peut donc pas se débarrasser de cette somme ! Néanmoins, nous pouvons écrire :

$$\frac{\partial E(n)}{\partial y_j(n)} = \sum_{k\in c}\left[e_k(n).\frac{\partial e_k(n)}{\partial y_j(n)}\right]$$

$$= \sum_{k\in c}\left[e_k(n).\frac{\partial e_k(n)}{\partial v_k(n)} . \frac{\partial v_k(n)}{\partial y_j(n)}\right]$$

$$= \sum_{k\in c}\left[e_k(n).\frac{\partial\left[d_k(n)-\varphi\left(v_k(n)\right)\right]}{\partial v_k(n)} . \frac{\partial\left[\sum_1 w_{k1}(n) y_1(n)\right]}{\partial y_j(n)}\right]$$

$$= \sum_{k\in c}\left[e_k(n).\left(y_k(n)\left[1-y_k(n)\right]\right).w_{kj}\right]$$

Et en substituant l'équation **III.10** dans cette dernière on obtient :

$$\frac{\partial E(n)}{\partial y_j(n)} = -\sum_{k\in c} \delta_k(n) w_{kj}(n) \qquad \textbf{(III.13)}$$

Ensuite en substituant l'équation **III.13** dans l'équation **III.11**, on obtient :

$$\frac{\partial E(n)}{\partial w_{ji}(n)} = -y_j(n)\left[1-y_j(n)\right]\left[\sum_{k\in c} \delta_k(n) w_{kj}(n)\right] y_i(n) \qquad \textbf{(III.14)}$$

Finalement,

$$\Delta w_{ji}(n) = -\eta \frac{\partial E(n)}{\partial w_{ji}(n)} = \eta \delta_j(n) y_i(n) \qquad \textbf{(III.15)}$$

Avec $$\delta_j = y_i(n)\left[1-y_j(n)\right]\left[\sum_{k\in c} \delta_k(n) w_{kj}(n)\right] \qquad \textbf{(III.16)}$$

On peut démontrer que les équations (III.15) et (III.16) sont valides pour toutes les couches cachées.

Noter bien, cependant, que dans le cas de la première couche cachée du réseau, puisqu'il n'y a pas de couche précédente de neurones, il faut substituer la variable $y_j(n)$ par l'entrée $x_j(n)$.L'algorithme de rétro propagation standard se résume donc à la série d'étapes suivantes :

1. Initialiser tous les poids à de petites valeurs aléatoires dans l'intervalle [0,1].
2. Normaliser les données d'entrainement.
3. Pour chaque donnée d'entrainement $r$ :
   a. Calculer les sorties observées en propageant les entrées vers l'avant.
   b. Ajuster les poids en rétro propageant l'erreur observée comme suit :

$$w_{ji}(n) = w_{ji}(n-1) + \Delta w_{ji}(n) = w_{ji}(n-1) + \eta \delta_j(n) y_i(n) \qquad \textbf{(III.17)}$$

Où le « gradient local » est défini par :

$$\delta_j(n) = \begin{cases} e_j(n) y_j(n)\left[1-y_j(n)\right] & \text{Si } j \in \text{ couche de sortie} \\ y_j(n)\left[1-y_j(n)\right]\sum_k \delta_k w_{kj}(n) & \text{Si } j \in \text{couche cachée} \end{cases} \qquad \textbf{(III.18)}$$

Avec $0 \leq \eta \leq 1$ représentant le taux d'apprentissage et $y_j(n)$ représentant soit la sortie du neurone $i$ sur la couche précédente, si celui-ci existe, soit l'entrée $i$ autrement.

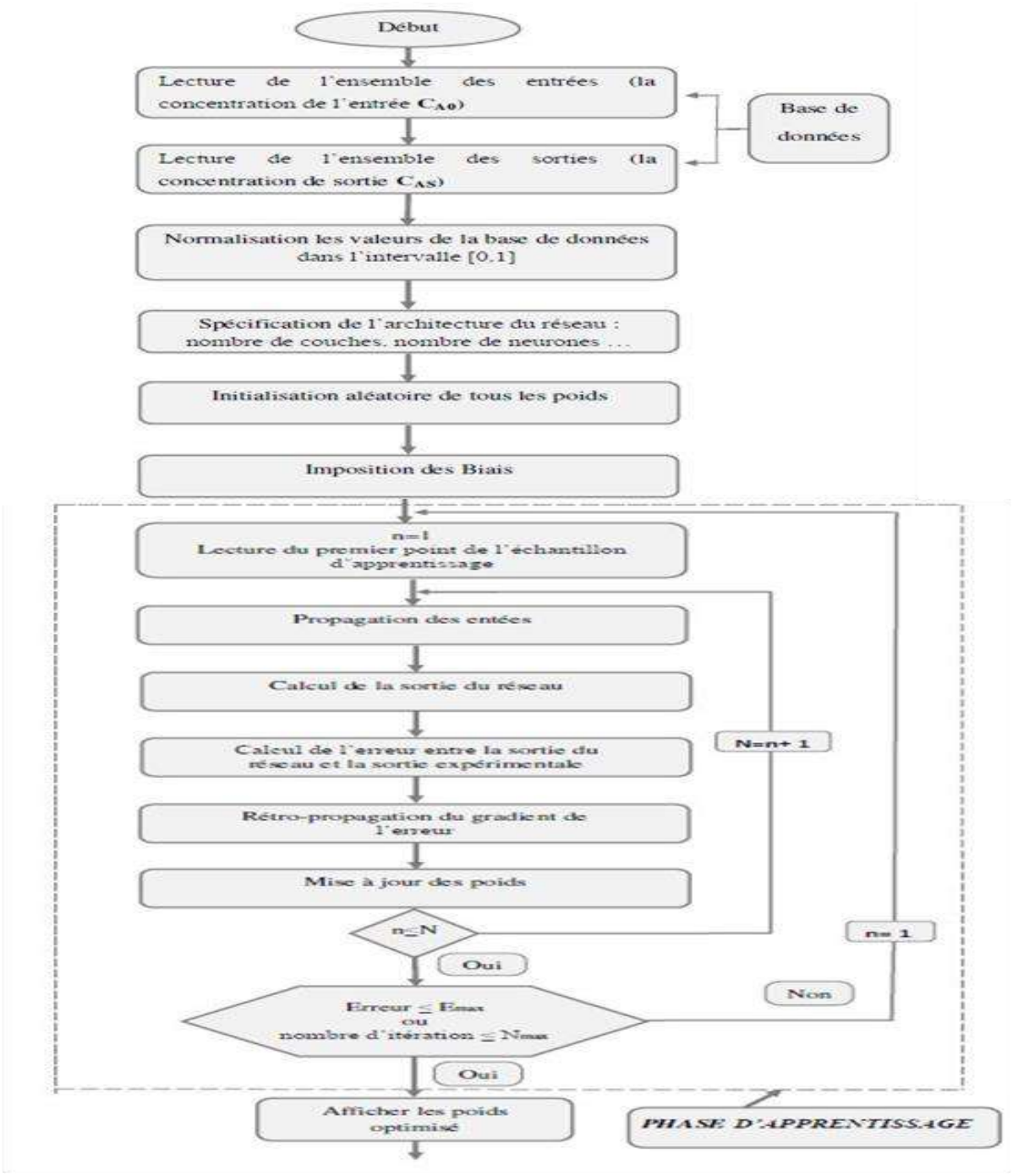
4. Répéter les étapes 3 et 4 jusqu'à un nombre maximum d'itérations ou jusqu'à ce que la racine de l'erreur quadratique moyenne (EQM) soit inférieure à un certain seuil.

L'équation (III.17) décrit ce qu'on appelle la règle du « delta » pour l'algorithme de rétro propagation des erreurs. L'équation suivante, nommé règle du « delta généralisé », décrit une autre variante de l'algorithme :

$$w_{ji}(n) = w_{ji}(n-1) + \eta\delta_j(n)y_i(n) + b.\Delta w_{ji}(n-1) \qquad \textbf{(III.19)}$$

Ou $0 \leq b \leq 1$ un paramètre nomme « momentum » qui représente une espèce d'inertie dans le changement des poids.

**La figure II-1** présent l'organigramme de notre modèle qui explique les étapes de calcul.



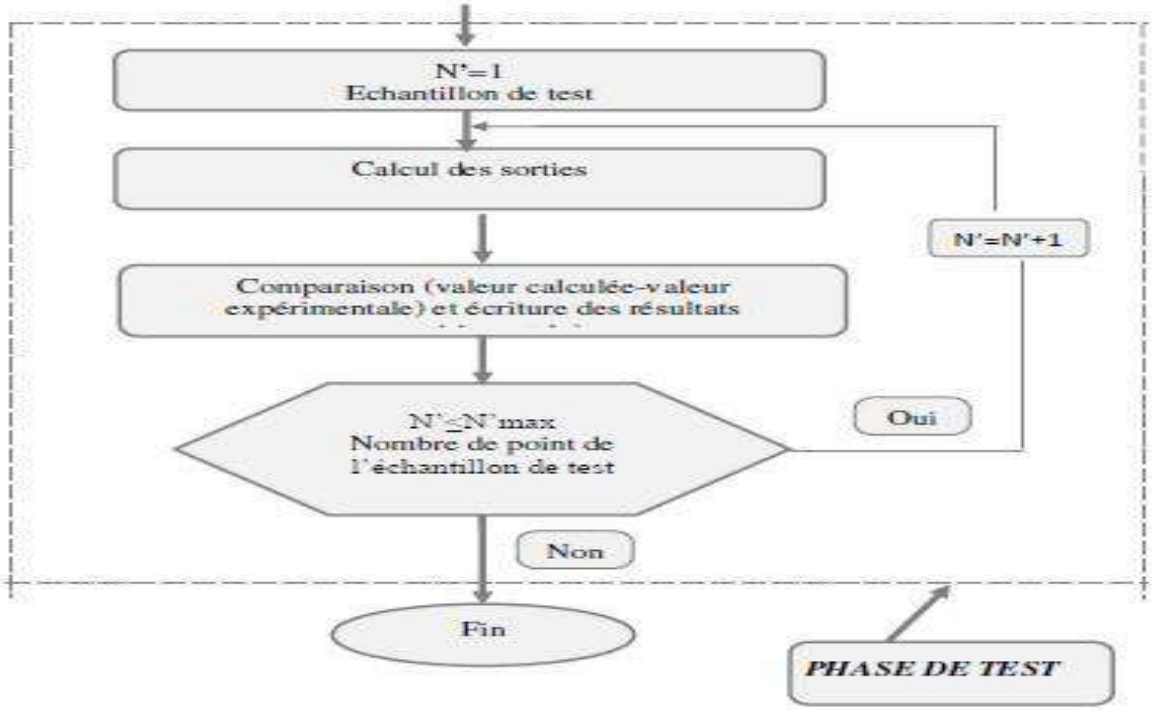



**Figure II.1 Organigramme représentant l'algorithme de réseau de neurone du modèle.**

## IV. Présentation du système modélisé :

### IV.1. Production de propylène glycol dans un RCPA avec refroidissement externe :

Les réactions exothermiques conduites dans des réacteurs continus parfaitement agités (RCPA) peuvent conduire à des conditions d'opérations non stables. Dans cette étude, nous avons choisi d'étudier la réaction exothermique du premier ordre concernant l'hydrolyse (en milieu acide) de l'oxyde de propylène **(**$CH_2(O)CHCH_3$ : **A)** qui donne du propylène glycol **(**$CH_2(OH)CH_2(OH)CH_3$ : **C)**.

Il s'agit d'une étude du comportement thermique du réacteur en mode dynamique à travers une modélisation numérique. La réaction est conduite avec un excès de second réactif qui est l'eau **(**$H_2O$ **: B)** et du méthanol **(**$CH_3OH$ : **M)** employé comme deuxième solvant mais qui n'entre pas dans la réaction. Le méthanol dans cette réaction joue le rôle d'un inerte. Son effet est perceptible sur le coefficient de dilatation chimique, il participe dans le mélange réactionnel avec sa capacité calorifique [15]. La réaction s'écrit :

$$CH_2(O)CHCH_3 + H_2O \rightarrow CH_2(OH)CH_2(OH)CH_3$$

$$A + B \rightarrow C$$

### IV.2. Caractéristiques du réacteur et conditions opératoires :

Il est d'une importance capitale que de préciser les conditions d'opération et les différents paramètres du réacteur agité en continu (RAC ou RCPA) ainsi que les paramètres de la cinétique chimique. **Le tableau II.1** Donne les valeurs utilisées dans la simulation. Ces grandeurs sont tirées de la référence [15].

**Tableau II.1 paramètres du réacteur et de la cinétique réactionnelle.**

| Paramètre | Valeur | Unité |
|---|---|---|
| **V (Volume du CSTR)** | 40.1 (1.14) | ft3 (m3) |
| **Q (Débit volumique à l'entrée)** | 326.4 (9.24) | ft3/h (m3/h) |
| **FA0 (Débit molaire de A entrant)** | 43.03 (19.52) | lbmol/h (kmole/h) |
| **FB0 (Débit molaire de B entrant)** | 802.8 (364.14) | lbmol/h (kmole/h) |
| **FM0 (Débit molaire de M entrant)** | 71.78 (32.29) | lbmol/h (kmole/h) |
| **FC0 (Débit molaire de C entrant)** | 0.00 | lbmol/h (kmole/h) |
| **T0 (Température à l'entrée)** | 75 (297.04) | °F (K) |
| **A (Surface d'échange)** | 40 (3.72) | ft3 (m2) |
| **TP (Température à la paroi)** | 85 (302.59) | °F (K) |
| **U (Coefficient d'échange)** | 100 (567.83) | Btu/ft2-°F(W/m2K) |
| **Ea (Énergie d'activation)** | 32400 (75362.4) | Btu/lbmol (kJ/kmole) |
| **k (Facteur de fréquence)** | (19.96E+12) | h-1 |

Les propriétés thermodynamiques (capacités calorifiques et enthalpies de formation des constituants) sont rassemblées dans **le tableau II.2**. On supposera, pour les calculs et la simulation, que les capacités calorifiques ne dépendent pas de la température [15].

**Tableau II.2 Propriétés thermodynamiques des espèces**

| Constituant | *Cp*(Btu /lbmol°F) | $Hf^{518}$ (Btu/lbmol) |
|---|---|---|
| **Oxyde de propylène** | 35 | - 66600 |
| **Eau** | 18 | -123000 |
| **Propylène glycol** | 46 | -226000 |
| **Méthanol** | 19,5 | - |

Quant au réacteur, il est représenté schématiquement sur **la figure II.2**. Il s'agit d'un réacteur continu parfaitement agité muni d'une double enveloppe dans laquelle de l'eau liquide portée à une température contrôlée circule. Elle sert à refroidir la paroi du réacteur et ainsi évacuer la chaleur dégagée par la réaction.

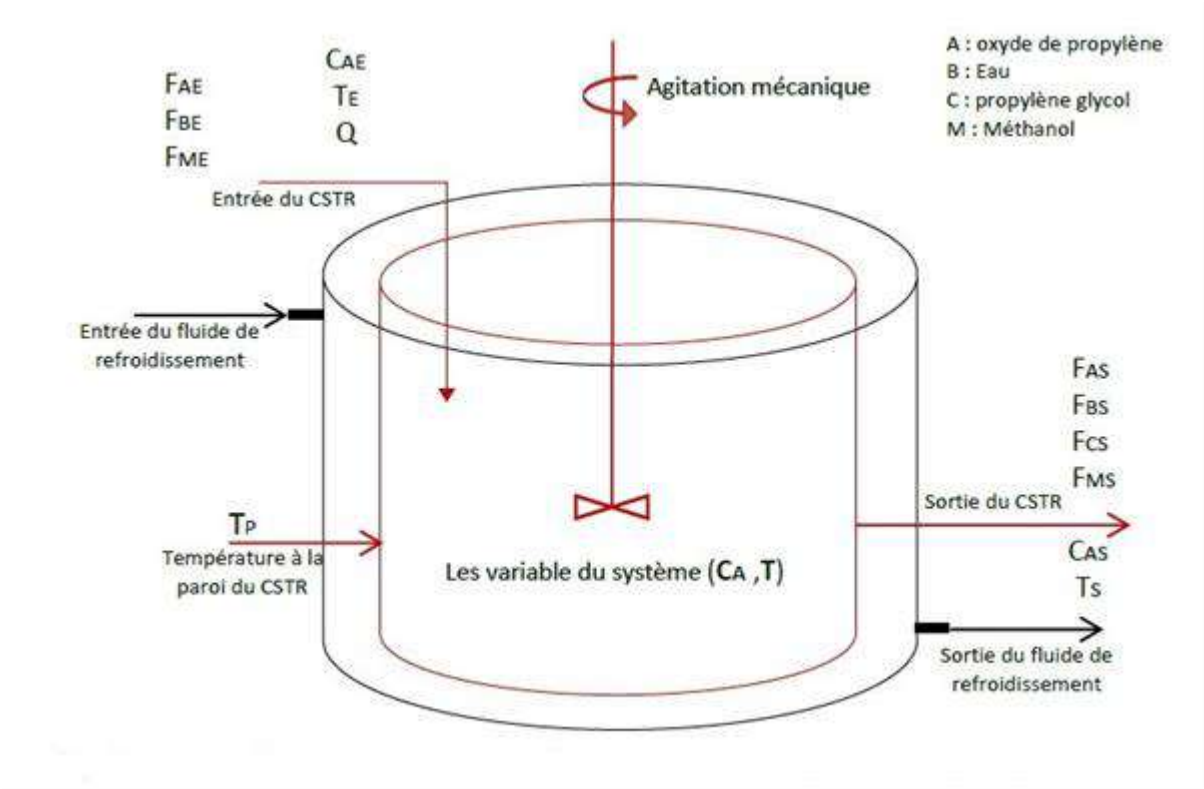



**Figure II.2 Schéma d'un RCPA avec double enveloppe de refroidissement.**

### IV.3. C Comparaison résolution par transformée de Laplace et transformée en Z. :

On cherche à comparer le comportement dynamique de la concentration du réactif principal en sortie lorsque la concentration de sa concentration à l'entrée est soumise à une perturbation en utilisant la transformée de Laplace et la transformée en Z. Cela passe par l'établissement des équations de bilans de matière notamment sur le réactif A ensuite leur résolution par les deux méthodes.

### *IV.3.1. La première méthode : La transformée de Laplace*

Bilan de matière sur le réactif A :

$$QC_{A0} - QC_{AS} - VkC_{AS} = V\frac{dC_{AS}}{dt}$$ **(IV.1)** En régime transitoire

$$QC_{A0} - QC_{AS} - VkC_{AS} = 0$$ **(IV.2)** En régime permanant

**(IV.1)** et **(IV.2)** $$\rightarrow Q\underbrace{(C_{A0} - C_{A0})}_{C'_{A0}} - Q\underbrace{(C_{AS} - C_{AS})}_{C'_{AS}} - Vk\underbrace{(C_{AS} - C_{AS})}_{C'_{AS}} = V\frac{dC_{AS}}{dt}.$$

$$QC'_{A0}(t) - (Q + Vk)C'_{AS}(t) = V\frac{dC_{AS}}{dt}$$

On peut $\tau = \frac{V}{Q}$

$$C'_{A0}(t) - (1 + k\tau)C'_{AS}(t) = \tau\frac{dC_{AS}}{dt}$$ **(IV.3)**

Les nouvelles variables $C'_{A0}$ et $C'_{AS}$ sont des variables d'écart.

Considérons le cas où la concentration de l'entrée $C'_{A0}$ change en fonction du temps selon la forme d'une fonction ECHELON :

$$F\left(C'_{A0}\right) = M * U(t)$$ **(IV.4)**

Ou **M** c'est l'intensité de l'échelon.

La transformée de LAPLACE de **(IV. 4)** s'écrit :

$$\left[F(C'_{A0})\right] = \overline{C'_{A0}} = \frac{M}{s}$$ **(IV.5)**

D'autre part, la transformée de LAPLACE de **(IV. 3)** s'écrit :

$$\mathcal{L}\left[(C'_{A0}(t)) - (1 + k\tau).C'_{AS}(t) = \tau.\frac{dC'_{AS}}{dt}\right]$$

$$\overline{C'_{A0}}(s) - (1 + k\tau).\overline{C'_{AS}}(s) = \tau s.\overline{C'_{AS}}(s)$$

$$\overline{C'_{AS}}(s).\left[1 + k\tau + \tau s\right] = \overline{C'_{A0}}(s)$$

Donc
$$\overline{C'_{AS}}(s) = \frac{1}{[1+k\tau+\tau s]}.\overline{C'_{A0}}(s)$$

On simplifier
$$\overline{C'_{AS}}(s) = \frac{\frac{1}{1+k\tau}}{1+\frac{\tau}{1+k\tau}s}.\overline{C'_{A0}}(s)$$

On met: $\frac{\tau}{(1+k\tau)} = a$

Alors $\overline{C'_{AS}}(s)$ devient
$$\overline{C'_{AS}}(s) = \frac{1}{1+k\tau}.\frac{1}{1+as}.\overline{C'_{A0}}(s) \qquad \textbf{( IV.6)}$$

La fonction de transfert est
$$G(s) = \frac{\overline{C'_{AS}}}{\overline{C'_{A0}}} = \left[\frac{1}{1+k\tau}.\frac{1}{1+as}\right] \qquad \textbf{( IV.7)}$$

On remplace **IV.5** dans **IV.6** **:**
$$\overline{C'_{AS}}(s) = \frac{1}{1+k\tau}.\frac{1}{1+as}.\left[\frac{M}{s}\right]$$

Et finalement :
$$\overline{C'_{AS}}(s) = \frac{M}{1+k\tau}.\frac{1}{s(1+as)}$$

Notre système dynamique de 1er degré est ainsi décrit par l'équation continue suivante après la transformation l'inverse de Laplace :
$$C_{AS}(t) = \frac{M}{1+k\tau}.\left[1-e^{\frac{-t}{a}}\right] \qquad \textbf{(IV.8)}$$

### *VI.3.2 Deuxième méthode : Transformée en Z :*

Dans cette méthode on introduit la notion de l'opérateur dit « zero order hold » qui est défini comme un modèle mathématique de la reconstruction pratique du signal effectuée par un convertisseur numérique-analogique conventionnel, il décrit l'effet de convertir un signal de temps discret en un signal en temps continu en maintenant chaque valeur d'échantillon pour un intervalle d'échantillonnage.

Il s'exprime dans le domaine de Laplace comme suit :
$$H(s) = \frac{1-\exp((\Delta t).s)}{s}$$

$\Delta t$ : est le pas de temps considéré lors de la discrétisation.

On multiplie cet opérateur par la fonction de transfert analogique G(s) et on passe à la transformée en Z :

$$H(s).G(s) = \frac{1-\exp((\Delta t).s)}{s}.G(s)$$

$$Z\left[H(s).G(s)\right] = Z\left[\frac{1-\exp((\Delta t).s)}{s}..G(s)\right]$$

Par ailleurs $Z(e^{-(\Delta t).s}) = Z^{-1}$

Avec Z : opérateur de retard d'un temps $\Delta t$

Il s'ensuit alors :

$$Z\left[H(s).G(s)\right] = (1-Z^{-1}) * Z\left[\frac{G(s)}{s}\right]$$

$$H(Z) = (1-Z^{-1}) * Z\left(\frac{\left[\frac{1}{(1+k\tau)}.\frac{1}{1+as}\right]}{s}\right)$$

$$H(Z) = (1-Z^{-1}) * \frac{1}{(1+k\tau)}.Z\left(\frac{\frac{1}{a}}{\frac{1}{a}.s+s^2}\right) \qquad \textbf{(IV.8)}$$

La transformée en Z de **(IV.8) :**

$$H(Z) = (1-Z^{-1}) * \frac{1}{(1+k\tau)}.\frac{\left(1-e^{-\Delta\tau/a}\right)Z^{-1}}{\left(1-e^{-\Delta\tau/a}Z^{-1}\right).(1-Z^{-1})} \qquad \textbf{(IV.9)}$$

La fonction de transfert discrète Qui est le rapport, dans le domaine Z de la sortie du procédé et de son entrée.

$$H(Z) = \frac{\overline{\overline{C_{AS}}}}{\overline{\overline{C_{A0}}}} \qquad \textbf{(IV.10)}$$

Après l'égalité entre les **(IV.9)** et **(IV.10)**, nous obtenons :

$$\frac{\overline{\overline{C_{AS}}}}{\overline{\overline{C_{A0}}}} = \frac{1}{(1+k\tau)}.\frac{\left(1-e^{-\Delta\tau/a}\right)Z^{-1}}{\left(1-e^{-\Delta\tau/a}Z^{-1}\right)}$$

Donc $$\overline{\overline{C_{AS}}}.(1+k\tau).\left(1-e^{-\Delta\tau/a}Z^{-1}\right) = \overline{\overline{C_{A0}}}.\left(1-e^{-\Delta\tau/a}\right)Z^{-1}$$

Et aussi $$(1+k\tau).\left[\overline{\overline{C_{AS}}}(Z).-Z^{-1}.\overline{\overline{C_{AS}}}(Z).e^{-\Delta\tau/a}\right]=Z^{-1}\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)-Z^{-1}\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).e^{-\Delta\tau/a}$$

Alors

$$(1+k\tau).\left[C_{AS}(k)-C_{AS}(k-1).e^{-\Delta\tau/\alpha}\right]=C_{A0}(k-1)-C_{A0}(k-1).e^{-\Delta\tau/\alpha}$$

Notre système dynamique est ainsi décrit par l'équation discrète suivante après introduction des indices k correspondant aux étapes dans le temps :

$$C_{AS}(k)=\left(\frac{1}{(1+k\tau)}\right).\left[C_{A0}(k-1)(1-e^{-\Delta\tau/a})\right]+C_{AS}(k-1).e^{-\Delta\tau/a} \qquad \textbf{(IV.12)}$$

**La figure II.3** montre les courbes qui représentent les équations continu et discrète de la concentration de sortie $C_{AS}$ (équations **IV.8** et **IV.12**)

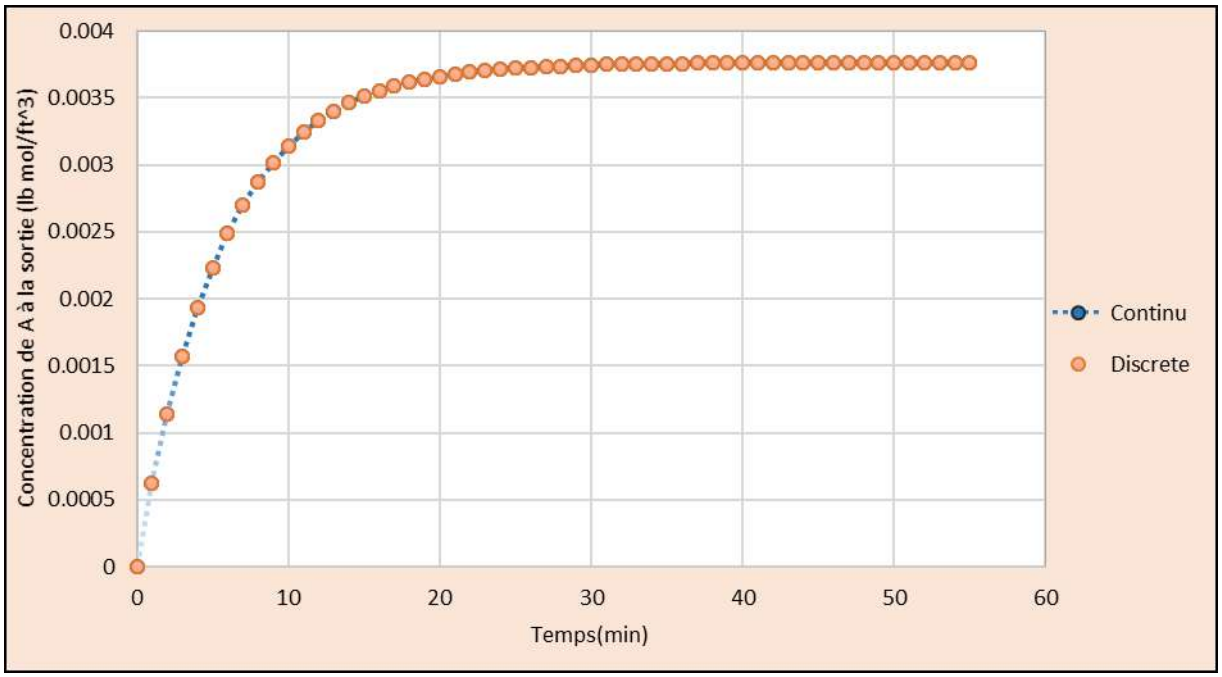



**Figure II.3 : Les courbes des équations continu et discrète du CAS**

On voit que les deux courbes entièrement compatibles, Donc on peut dire que la réponse dynamique fournie par l'équation discrète est exactement celle fournie par la solution exacte de l'équation continue. Ainsi, pour la suite, nous allons employer l'équation discrète pour générer notre base de données.

## V. L' utilisation de logiciel Fortran :

Dans notre partie pratique, pour effectuons les calculs décrits dans l' organigramme précédent, nous avons développé un programme écrit en Fortran 95. C' est un langage de programmation utilisé principalement pour le calcul scientifique. C'est le plus ancien langage de programmation. Pour la génération de la base de données, c' est le logiciel Microsoft Excel qui a été utilisé.

## VI. Synthèse du modèle neuro-mimétique du réacteur continu parfaitement agité :

On a créé une base de données constituée de 700 exemples. Ces exemples ont été obtenus en donnant des valeurs aléatoires à la variable d'entrée et en calculant les variables de sorties correspondantes. Notre réseau de neurones compte huit entrées : $C_{A0}$(k-3), $C_{A0}$(k-2), $C_{A0}$ (k-1), $C_{A0}$ (k), $C_{AS}$(k-3), $C_{AS}$(k-2), $C_{AS}$ (k-1), $C_{AS}$ (k). Le réseau compte une seule sortie qui est $C_{AS}$(k+1). Le nombre de neurones dans la couche cachée a été modifié et plusieurs simulations ont été effectuées. Deux bases de données ont été utilisées pour le développement du modèle : une base d'apprentissage (700 points) et une base de test (90 points) pour la validation du modèle.

### VI.1. Perturbation sur la concentration de « A » à l'entrée.

#### *VI.1.1. Génération de la base de données.*

On examine d'abord l'effet d'une perturbation de la concentration de « A » à l'entrée (qui peut être de différentes formes) du réacteur sur les concentrations de toutes les espèces en sortie. Pour l'espèce A, il s'agit de l'équation **IV.12** qui a servi à générer la base de données. Pour les espèces B et C, on adopte une procédure analogue qui se présente comme suit :

***<u>VI.1.1.A. Pour l'espèce B :</u>***

Bilan de matière sur le réactif B :

$$QC_{B0} - QC_{BS} - VkC_{AS} = V\frac{dC_{BS}}{dt}$$ **(VII.13)** En régime transitoire

$$QC_{B0} - QC_{BS} - VkC_{AS} = 0$$ **(VII.14)** En régime permanant

**(VII.13)** et **(VII.14)** $\rightarrow Q\underbrace{\cancel{(C_{A0}-C_{A0})}}_{0}-Q\underbrace{(C_{BS}-\overline{C_{BS}})}_{C'_{BS}}-Vk\underbrace{(C_{AS}-\overline{C_{AS}})}_{C'_{AS}}=V\frac{dC_{BS}}{dt}.$

$$-QC'_{BS}(t)-VkC'_{AS}(t)=V\frac{dC_{BS}}{dt}$$

On peut $\tau=\frac{V}{Q}$

$$-C'_{BS}(t)-k\tau.C'_{AS}(t)=\tau\frac{dC_{BS}}{dt} \qquad \textbf{(VII.15)}$$

La transformée de LAPLACE de **(VII.13)** s'écrit :

$$\mathcal{L}\left[-C'_{BS}(t)-k\tau.C'_{AS}(t)=\tau\frac{dC_{BS}}{dt}\right]$$

$$-\overline{C'_{BS}}(s)-k\tau.\overline{C'_{AS}}(s)=\tau s.\overline{C'_{BS}}(s) \qquad \textbf{(VII.16)}$$

On a $$\overline{C'_{AS}}(s)=\frac{1}{\left[(1+k\tau)+\tau s\right]}.\overline{C'_{A0}}(s) \qquad \textbf{(VII.17)}$$

On remplace **(VII.17)** dans **(VII.16) :**

$$-\overline{C'_{BS}}(s)-k\tau.\frac{1}{\left[1+k\tau+\tau s\right]}.\overline{C'_{A0}}(s)=\tau s.\overline{C'_{BS}}(s)$$

$$-k\tau.\frac{1}{\left[(1+k\tau)+\tau s\right]}.\overline{C'_{A0}}(s)=\left(1+\tau s\right).\overline{C'_{BS}}(s)$$

$$\frac{\overline{C'_{BS}}}{\overline{C'_{A0}}}=-k\tau.\frac{1}{(1+k\tau+\tau s)}.\frac{1}{(1+\tau s)}$$

$$\frac{\overline{C'_{BS}}}{\overline{C'_{A0}}}=\frac{-k}{\tau}.\frac{1}{\left(\frac{1+k\tau}{\tau}+s\right).\left(\frac{1}{\tau}+s\right)}$$

On met $\frac{1+k\tau}{\tau}=a$ , $\frac{1}{\tau}=b$

$$\frac{\overline{C'_{BS}}}{\overline{C'_{A0}}}=\frac{\frac{-k}{\tau}}{(s+a).(s+b)}$$

On multiplie l'opérateur zéro order hold par la fonction de transfert analogique G(s) et on passe à la transformée en Z :

$$H(s).G(s) = \frac{1-\exp((\Delta t).s)}{s}.G(s)$$

$$Z\left[H(s).G(s)\right] = Z\left[\frac{1-\exp((\Delta t).s)}{s}..G(s)\right]$$

Il s'ensuit alors :

$$Z\left[H(s).G(s)\right] = (1-Z^{-1})*Z\left[\frac{G(s)}{s}\right]$$

$$H(Z) = (1-Z^{-1})*Z\left(\frac{\frac{\frac{-k}{\tau}}{(s+a).(s+b)}}{s}\right)$$

$$H(Z) = (1-Z^{-1})*\frac{(-k)}{\tau}.Z\left(\frac{1}{s.(s+a).(s+b)}\right) \qquad \textbf{(VII.18)}$$

On simplifier : $G'(s) = \dfrac{1}{s.(s+a).(s+b)}$

$$G'(s) = \frac{1}{s.(s+a).(s+b)} = \frac{A}{s} + \frac{B}{s+a} + \frac{C}{s+b} \qquad \textbf{(VII.19)}$$

**On déterminer A, B, C :**

- A

$$G'(s) = \frac{1}{(s+a).(s+b)} = A + \frac{B.s}{s+a} + \frac{C.s}{s+b}$$

$$\lim_{s\to 0} G'(s) = \frac{1}{(s+a).(s+b)} = A + \cancel{\frac{B.s}{s+a}} + \cancel{\frac{C.s}{s+b}}$$

$$A = \frac{1}{a.b}$$

- B

$$G'(s) = \frac{1}{s.(s+b)} = \frac{A.(s+a)}{s} + B + \frac{C.(s+a)}{s+b}$$

$$\lim_{s\to(-a)} G'(s) = \frac{1}{s.(s+b)} = \cancel{\frac{A.(s+a)}{s}} + B + \cancel{\frac{C.(s+a)}{s+b}}$$

$$B = \frac{-1}{a.(b-a)}$$

- C

$$G'(s)=\frac{1}{s.(s+a)}=\frac{A.(s+b)}{s}+\frac{B.(s+b)}{s+a}+C$$

$$\lim_{s\to(-b)} G'(s)=\frac{1}{s.(s+a)}=\cancel{\frac{A.(s+b)}{s}}+\cancel{\frac{B.(s+b)}{s+a}}+C$$

$$C=\frac{-1}{b.(a-b)}$$

Donc $$G'(s)=\left(\frac{1}{a.b}.\frac{1}{s}\right)-\left(\frac{1}{a.(b-a)}.\frac{1}{s+a}\right)-\left(\frac{1}{b.(a-b)}.\frac{1}{s+b}\right) \qquad \textbf{(VII.20)}$$

On remplace **(VII.20)** dans **(VII.18)**

$$H(Z)=(1-Z^{-1})*\frac{-k}{\tau}.Z\left[\left(\frac{1}{a.b}.\frac{1}{s}\right)-\left(\frac{1}{a.(b-a)}.\frac{1}{s+a}\right)-\left(\frac{1}{b.(a-b)}.\frac{1}{s+b}\right)\right]$$

Par ailleurs $ax_1(s)+bx_2(s)\Rightarrow aX_1(Z)+bX_2(Z)$

$$H(Z)=(1-Z^{-1})*\left[\frac{\frac{-k}{\tau}}{a.b}.Z\left(\frac{1}{s}\right)+\frac{\frac{k}{\tau}}{a(b-a)}.Z\left(\frac{1}{s+a}\right)+\frac{\frac{k}{\tau}}{b(a-b)}.Z\left(\frac{1}{s+b}\right)\right]$$

$$H(Z)=(1-Z^{-1})*\left[\frac{\frac{-k}{\tau}}{a.b}.\frac{1}{1-Z^{-1}}+\frac{\frac{k}{\tau}}{a(b-a)}.\frac{1}{1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1}}+\frac{\frac{k}{\tau}}{b(a-b)}.\frac{1}{1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}}\right]$$

$$H(Z)=\left[\frac{(-k)}{\tau.a.b}-\frac{k}{\tau.a(b-a)}.\frac{(1-Z^{-1})}{1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1}}-\frac{k}{\tau.b(a-b)}.\frac{(1-Z^{-1})}{1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}}\right]$$

$$H(Z)=\frac{(-k)}{\tau.a.b}.\left[1-\frac{(-b)}{(b-a)}.\frac{(1-Z^{-1})}{1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1}}-\frac{(-a)}{(a-b)}.\frac{(1-Z^{-1})}{1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}}\right] \qquad \textbf{(VII.21)}$$

$$H(Z)=\frac{(-k)}{\tau.a.b}.\left[1-\frac{b(a-b)(1-Z^{-1}).(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})-(-a)(a-b)(1-Z^{-1}).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})}{\left[(a-b).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\right].\left[-(a-b).(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})\right]}\right]$$

$$H(Z)=\frac{(-k)}{\tau.a.b}.\left[1-\frac{(1-Z^{-1})\left[b.(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})+a.(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\right]}{(b-a)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})}\right]$$

$$H(Z)=\frac{(-k)}{\tau.a.b}.\left[\frac{(b-a)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})+(1-Z^{-1})\left[b.(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})+a.(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\right]}{(b-a)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})}\right] \qquad \textbf{(VII.22)}$$

La fonction de transfert discrète $$H(Z)=\frac{\overline{\overline{C_{BS}}}}{\overline{\overline{C_{A0}}}} \qquad \textbf{(VII.23)}$$

Qui est le rapport, dans le domaine Z de la sortie du procédé et de son entrée.

Après l'égalité entre les **(VII.22)** et **(VII.23)**, nous obtenons :

$$\frac{\overline{\overline{C_{BS}}}}{\overline{\overline{C_{A0}}}} = \frac{(-k)}{\tau.a.b}.\left[\frac{(b-a)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})+(1-Z^{-1})\left[b.(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})+a.(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\right]}{(b-a)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})}\right]$$

Donc

$$\overline{\overline{C_{BS}}}.\tau.a.b\begin{bmatrix}(b-a)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}).\\(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\end{bmatrix} = \overline{\overline{C_{A0}}}.(-k)\begin{bmatrix}(b-a)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})-\\(1-Z^{-1})\begin{bmatrix}b.(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})\\+a.(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\end{bmatrix}\end{bmatrix}$$

$$\tau.a.b.(b-a)\begin{bmatrix}\overline{\overline{C_{BS}}}(Z)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})\\.(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\end{bmatrix} = (-k)\begin{bmatrix}(b-a)\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})-\\\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).(1-Z^{-1})\begin{bmatrix}b.(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})+\\a.(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\end{bmatrix}\end{bmatrix}$$

$$\tau.a.b.(b-a)\left[\overline{\overline{C_{BS}}}(Z)\begin{bmatrix}1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1}\\+e^{(-b-a).\Delta t}.Z^{-2}\end{bmatrix}\right] = (-k)\begin{bmatrix}(b-a)\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).\left[1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1}+e^{(-b-a).\Delta t}.Z^{-2}\right]-\\\left[\begin{array}{l}\left(b.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).-b.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}-b.Z^{-1}\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)+b.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).e^{-b.\Delta t}.Z^{-2}\right)+\\\left(a.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)-a.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)e^{-a.\Delta t}.Z^{-1}-a.Z^{-1}\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)+a.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).e^{-a.\Delta t}.Z^{-2}\right)\end{array}\right]\end{bmatrix}$$

$$\tau.a.b.(b-a)\begin{bmatrix}\overline{\overline{C_{BS}}}(Z)-\overline{\overline{C_{BS}}}(Z)e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}-\overline{\overline{C_{BS}}}(Z)e^{-a.\Delta t}.Z^{-1}\\+\overline{\overline{C_{BS}}}(Z)e^{(-b-a).\Delta t}.Z^{-2}\end{bmatrix} = (-k)\begin{bmatrix}(b-a)\left[\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)-\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}-\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)e^{-a.\Delta t}.Z^{-1}+\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)e^{(-b-a).\Delta t}.Z^{-2}\right]-\\\left[\begin{array}{l}\left(b.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).-b.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}-b.Z^{-1}\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)+b.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).e^{-b.\Delta t}.Z^{-2}\right)+\\\left(a.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)-a.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)e^{-a.\Delta t}.Z^{-1}-a.Z^{-1}\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)+a.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).e^{-a.\Delta t}.Z^{-2}\right)\end{array}\right]\end{bmatrix}$$

Alors

$$\tau.a.b.(a-b)\begin{bmatrix}C_{BS}(k)-C_{BS}(k-1)e^{-b.\Delta t}\\-C_{BS}(k-1)e^{-a.\Delta t}+C_{BS}(k-2)e^{(-b-a).\Delta t}\end{bmatrix} = (-k)\begin{bmatrix}(b-a)\left[C_{A0}(k)-C_{A0}(k-1)\left(e^{-b.\Delta t}+e^{-a.\Delta t}\right)+C_{A0}(k-2)e^{(-b-a).\Delta t}\right]+\\\left[\begin{array}{l}(b+a).C_{A0}(k)-(a+b).C_{A0}(k-1)-C_{A0}(k-1).\left(b.e^{-b.\Delta t}+a.e^{-a.\Delta t}\right)\\+C_{A0}(k-2).\left(b.e^{-b.\Delta t}+a.e^{-a.\Delta t}\right)\end{array}\right]\end{bmatrix}$$

Notre système dynamique est ainsi décrit par l'équation discrète suivante après introduction des indices k correspondant aux étapes dans le temps :

$$C_{BS}(k)=\frac{(-k)}{\tau.a.b.(b-a)}.\left[\begin{array}{l}(b-a)\left[C_{A0}(k)-C_{A0}(k-1)\left(e^{-b.\Delta t}+e^{-a.\Delta t}\right)+C_{A0}(k-2)e^{(-b-a).\Delta t}\right]-\\ \left[\begin{array}{l}(b+a).C_{A0}(k)-(a+b).C_{A0}(k-1)-C_{A0}(k-1).\left(b.e^{-b.\Delta t}+a.e^{-a.\Delta t}\right)\\ +C_{A0}(k-2).\left(b.e^{-b.\Delta t}+a.e^{-a.\Delta t}\right)\end{array}\right]\end{array}\right]-\left[\begin{array}{l}-C_{AS}(k-1)e^{-b.\Delta t}-C_{AS}(k-1)e^{-a.\Delta t}\\ +C_{AS}(k-2)e^{(-b-a).\Delta t}\end{array}\right]$$

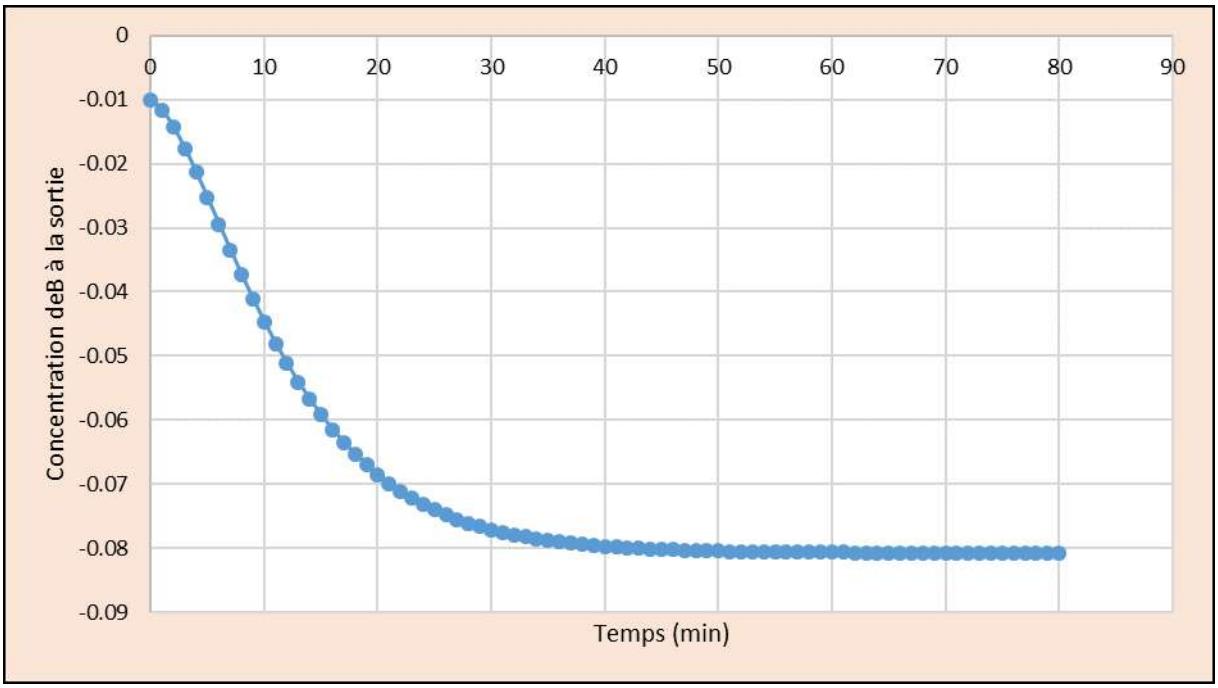



**Figure II.4 Concentration de réactif B en fonction de temps**

**La figure II.4** représente la concentration de réactif B en fonction de temps. On constate une diminution de la concentration de B jusqu'à stabilisation à -0.08(lb mol/ft$^3$) qui est le nouveau point correspondant au régime permanent. Cette diminution est due à l'augmentation de la concentration initiale de A par un signal échelon d'intensité égal 0.005 et donc une augmentation de la vitesse de réaction, alors une augmentation de la consommation de réactif.

***VI.1.1.B. Pour l'espèce C :***

Bilan de matière sur le produit C :

$$QC_{C0}-QC_{CS}+VkC_{AS}=V\frac{dC_{CS}}{dt}$$ **(VII.24)** En régime transitoire

$$QC_{C0}-QC_{CS}+VkC_{AS}=0$$ **(VII.25)** En régime permanant

**(VII.24)** et **(VII.25)** $\rightarrow Q\underbrace{\cancel{(C_{C0}-C_{C0})}}_{0}-Q\underbrace{(C_{CS}-\overline{C_{CS}})}_{C'_{CS}}+Vk\underbrace{(C_{AS}-\overline{C_{AS}})}_{C'_{AS}}=V\dfrac{dC_{CS}}{dt}$.

$$-QC'_{CS}(t)+VkC'_{AS}(t)=V\frac{dC_{CS}}{dt}$$

On peut $\tau=\dfrac{V}{Q}$

$$-C'_{CS}(t)+k\tau.C'_{AS}(t)=\tau\frac{dC_{CS}}{dt} \qquad \textbf{(VII.26)}$$

La transformée de LAPLACE de **(VII. 26)** s'écrit :

$$\mathcal{L}\left[-C'_{CS}(t)+k\tau.C'_{AS}(t)=\tau\frac{dC_{CS}}{dt}\right]$$

$$-\overline{C'_{CS}}(s)+k\tau.\overline{C'_{AS}}(s)=\tau s.\overline{C'_{CS}}(s) \qquad \textbf{(VII.27)}$$

On a $$\overline{C'_{AS}}(s)=\frac{1}{\left[(1+k\tau)+\tau s\right]}.\overline{C'_{A0}}(s) \qquad \textbf{(VII.28)}$$

On remplace **(VII.28)** dans **(VII.27) :**

$$-\overline{C'_{CS}}(s)+k\tau.\frac{1}{\left[1+k\tau+\tau s\right]}.\overline{C'_{A0}}(s)=\tau s.\overline{C'_{CS}}(s)$$

$$k\tau.\frac{1}{\left[(1+k\tau)+\tau s\right]}.\overline{C'_{A0}}(s)=\left(1+\tau s\right).\overline{C'_{CS}}(s)$$

$$\frac{\overline{C'_{CS}}}{\overline{C'_{A0}}}=k\tau.\frac{1}{(1+k\tau+\tau s)}.\frac{1}{(1+\tau s)}$$

$$\frac{\overline{C'_{CS}}}{\overline{C'_{A0}}}=\frac{k}{\tau}.\frac{1}{\left(\dfrac{1+k\tau}{\tau}+s\right).\left(\dfrac{1}{\tau}+s\right)}$$

On met $\dfrac{1+k\tau}{\tau}=a$ , $\dfrac{1}{\tau}=b$

$$\frac{\overline{C'_{CS}}}{\overline{C'_{A0}}}=\frac{\dfrac{k}{\tau}}{\left(s+a\right).\left(s+b\right)}$$

On multiplie l'opérateur zéro order hold par la fonction de transfert analogique G(s) et on passe à la transformée en Z :

$$H(s).G(s) = \frac{1-\exp((\Delta t).s)}{s}.G(s)$$

$$Z\left[H(s).G(s)\right] = Z\left[\frac{1-\exp((\Delta t).s)}{s}..G(s)\right]$$

Il s'ensuit alors :

$$Z\left[H(s).G(s)\right] = (1-Z^{-1})*Z\left[\frac{G(s)}{s}\right]$$

$$H(Z) = (1-Z^{-1})*Z\left(\frac{\frac{\frac{k}{\tau}}{(s+a).(s+b)}}{s}\right)$$

$$H(Z) = (1-Z^{-1})*\frac{k}{\tau}.Z\left(\frac{1}{s.(s+a).(s+b)}\right) \qquad \textbf{(VII.29)}$$

On simplifier : $G'(s) = \dfrac{1}{s.(s+a).(s+b)}$

$$G'(s) = \frac{1}{s.(s+a).(s+b)} = \frac{A}{s} + \frac{B}{s+a} + \frac{C}{s+b} \qquad \textbf{(VII.30)}$$

**On déterminer A, B, C :**

- A

$$G'(s) = \frac{1}{(s+a).(s+b)} = A + \frac{B.s}{s+a} + \frac{C.s}{s+b}$$

$$\lim_{S\to 0} G'(s) = \frac{1}{(s+a).(s+b)} = A + \cancel{\frac{B.s}{s+a}} + \cancel{\frac{C.s}{s+b}}$$

$$A = \frac{1}{a.b}$$

- B

$$G'(s) = \frac{1}{s.(s+b)} = \frac{A.(s+a)}{s} + B + \frac{C.(s+a)}{s+b}$$

$$\lim_{S\to(-a)} G'(s)\Big| = \frac{1}{s.(s+b)} = \cancel{\frac{A.(s+a)}{s}} + B + \cancel{\frac{C.(s+a)}{s+b}}$$

$$B = \frac{-1}{a.(b-a)}$$

- C

$$G'(s)=\frac{1}{s.(s+a)}=\frac{A.(s+b)}{s}+\frac{B.(s+b)}{s+a}+C$$

$$\lim_{S\to(-b)} G'(s)=\frac{1}{s.(s+a)}=\cancel{\frac{A.(s+b)}{s}}+\cancel{\frac{B.(s+b)}{s+a}}+C$$

$$C=\frac{-1}{b.(a-b)}$$

Donc $$G'(s)=\left(\frac{1}{a.b}.\frac{1}{s}\right)-\left(\frac{1}{a.(b-a)}.\frac{1}{s+a}\right)-\left(\frac{1}{b.(a-b)}.\frac{1}{s+b}\right) \qquad \textbf{(VII.31)}$$

On remplace **(II.31)** dans **(VII.30)**

$$H(Z)=(1-Z^{-1})*\frac{k}{\tau}.Z\left[\left(\frac{1}{a.b}.\frac{1}{s}\right)-\left(\frac{1}{a.(b-a)}.\frac{1}{s+a}\right)-\left(\frac{1}{b.(a-b)}.\frac{1}{s+b}\right)\right]$$

$$H(Z)=(1-Z^{-1})*\left[\frac{\frac{k}{\tau}}{a.b}.Z\left(\frac{1}{s}\right)-\frac{\frac{k}{\tau}}{a(b-a)}.Z\left(\frac{1}{s+a}\right)-\frac{\frac{k}{\tau}}{b(a-b)}.Z\left(\frac{1}{s+b}\right)\right]$$

$$H(Z)=(1-Z^{-1})*\left[\frac{\frac{k}{\tau}}{a.b}.\frac{1}{1-Z^{-1}}-\frac{\frac{k}{\tau}}{a(b-a)}.\frac{1}{1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1}}-\frac{\frac{k}{\tau}}{b(a-b)}.\frac{1}{1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}}\right]$$

$$H(Z)=\left[\frac{\frac{k}{\tau}}{a.b}-\frac{\frac{k}{\tau}}{a(b-a)}.\frac{(1-Z^{-1})}{1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1}}-\frac{\frac{k}{\tau}}{b(a-b)}.\frac{(1-Z^{-1})}{1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}}\right]$$

$$H(Z)=\frac{k}{\tau.a.b}.\left[1-\frac{b}{(b-a)}.\frac{(1-Z^{-1})}{1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1}}-\frac{a}{(a-b)}.\frac{(1-Z^{-1})}{1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}}\right] \qquad \textbf{(VII.32)}$$

$$H(Z)=\frac{k}{\tau.a.b}.\left[1-\frac{b(a-b)(1-Z^{-1}).(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})+a(a-b)(1-Z^{-1}).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})}{\left[(a-b).(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})\right].\left[-(a-b).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\right]}\right]$$

$$H(Z)=\frac{k}{\tau.a.b}.\left[1-\frac{(1-Z^{-1})\left[b.(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})+a.(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\right]}{(b-a)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})}\right]$$

$$H(Z)=\frac{k}{\tau.a.b}.\left[\frac{(b-a)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})-(1-Z^{-1})\left[b.(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})+a.(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\right]}{(b-a)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})}\right] \qquad \textbf{(VII.33)}$$

La fonction de transfert discrète $$H(Z)=\frac{\overline{\overline{C_{CS}}}}{\overline{\overline{C_{A0}}}} \qquad \textbf{(VII.34)}$$

Qui est le rapport, dans le domaine Z de la sortie du procédé et de son entrée. Après l'égalité entre les **(VII.33)** et **(VII.34)**, nous obtenons :

Après l'égalité entre les **(VII.33)** et **(VII.34)**, nous obtenons :

$$\frac{\overline{\overline{C_{CS}}}}{\overline{\overline{C_{A0}}}} = \frac{k}{\tau.a.b}.\left[\frac{(b-a)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})-(1-Z^{-1})\left[b.(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})+a.(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\right]}{(b-a)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})}\right] \quad \textbf{VII.35)}$$

Donc

$$\overline{\overline{C_{CS}}}.\tau.a.b\begin{bmatrix}(b-a)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}).\\(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\end{bmatrix} = \overline{\overline{C_{A0}}}.k\begin{bmatrix}(b-a)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}).(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})-\\(1-Z^{-1})\begin{bmatrix}b.(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})+\\a.(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\end{bmatrix}\end{bmatrix}$$

$$\tau.a.b.(b-a)\begin{bmatrix}\overline{\overline{C_{CS}}}(Z)(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})\\.(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\end{bmatrix} = k\begin{bmatrix}(b-a)\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})-\\\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).(1-Z^{-1})\begin{bmatrix}b.(1-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1})+\\a.(1-e^{-a.\Delta t}.Z^{-1})\end{bmatrix}\end{bmatrix}$$

$$\tau.a.b.(b-a)\begin{bmatrix}\overline{\overline{C_{CS}}}(Z)-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}\overline{\overline{C_{CS}}}(Z)-\\e^{-a.\Delta t}.Z^{-1}\overline{\overline{C_{CS}}}(Z)+e^{(-b-a).\Delta t}.Z^{-2}\overline{\overline{C_{CS}}}(Z)\end{bmatrix} = k\begin{bmatrix}(b-a)\begin{pmatrix}\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)-e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)-\\e^{-a.\Delta t}.Z^{-1}\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)+e^{(-b-a).\Delta t}.Z^{-2}\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)\end{pmatrix}-\\\begin{bmatrix}\left(b.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).-b.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).e^{-b.\Delta t}.Z^{-1}-b.Z^{-1}\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)+b.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).e^{-b.\Delta t}.Z^{-2}\right)+\\\left(a.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)-a.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)e^{-a.\Delta t}.Z^{-1}-a.Z^{-1}\overline{\overline{C_{A0}}}(Z)+a.\overline{\overline{C_{A0}}}(Z).e^{-a.\Delta t}.Z^{-2}\right)\end{bmatrix}\end{bmatrix}$$

Alors

$$\tau.a.b.(b-a)\begin{bmatrix}C_{CS}(k)-C_{CS}(k-1)e^{-b.\Delta t}-\\C_{CS}(k-1)e^{-a.\Delta t}+C_{CS}(k-2)e^{(-b-a).\Delta t}\end{bmatrix} = k\begin{bmatrix}(b-a)\left(C_{A0}(k)-C_{A0}(k-1).(e^{-b.\Delta t}+e^{-a.\Delta t})+C_{A0}(k-2)e^{(-b-a).\Delta t}\right)-\\\begin{bmatrix}(b+a).C_{A0}(k)-(b+a).C_{A0}(k-1)-C_{A0}(k-1).\left(b.e^{-b.\Delta t}+a.e^{-a.\Delta t}\right)\\+C_{A0}(k-2)\left(b.e^{-b.\Delta t}+a.e^{-a.\Delta t}\right)\end{bmatrix}\end{bmatrix}$$

Notre système dynamique est ainsi décrit par l'équation discrète suivante après introduction des indices k correspondant aux étapes

$$C_{CS}(k) = \frac{k}{\tau.a.b.(b-a)}.\begin{bmatrix}(b-a)\left[C_{A0}(k)-C_{A0}(k-1)\left(e^{-b.\Delta t}+e^{-a.\Delta t}\right)+C_{A0}(k-2)e^{(-b-a).\Delta t}\right]-\\\begin{bmatrix}(b+a).C_{A0}(k)-(a+b).C_{A0}(k-1)-C_{A0}(k-1).\left(b.e^{-b.\Delta t}+a.e^{-a.\Delta t}\right)\\+C_{A0}(k-2).\left(b.e^{-b.\Delta t}+a.e^{-a.\Delta t}\right)\end{bmatrix}\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}-C_{CS}(k-1)e^{-b.\Delta t}-C_{CS}(k-1)e^{-a.\Delta t}\\+C_{CS}(k-2)e^{(-b-a).\Delta t}\end{bmatrix}$$

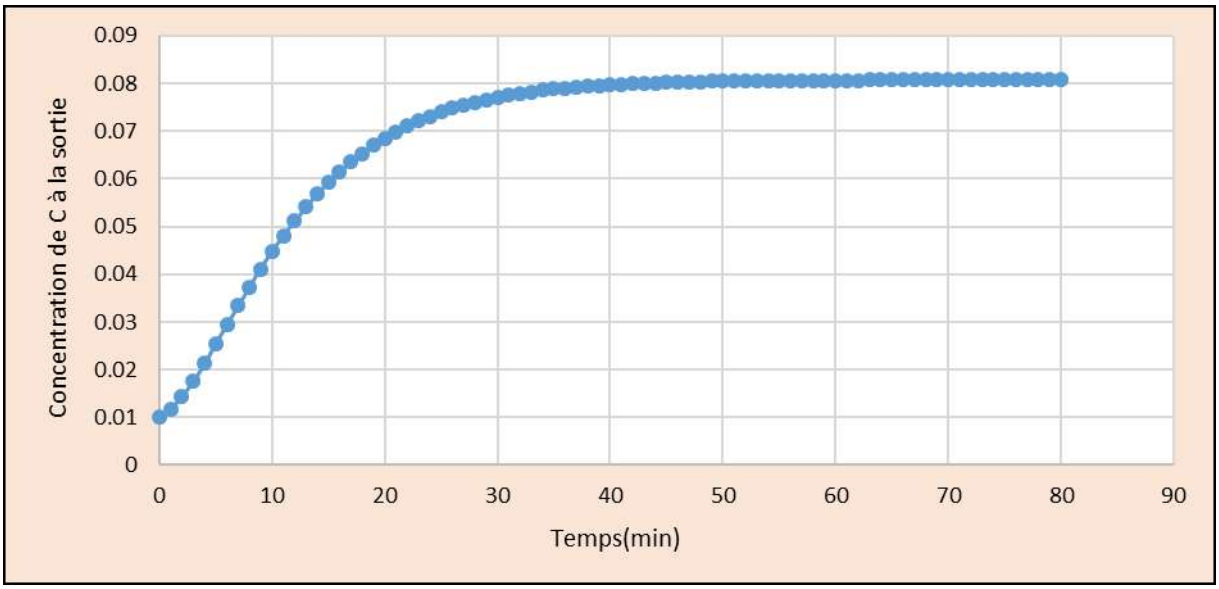



**Figure II.5 Concentration de produit C en fonction de temps**

Comme le montre **figure II.5** on voir une augmentation de la concentration de C en fonction de temps jusqu'à stabilisation à 0.08 (lb mol/ft$^3$), nouveau régime permanent. Cette augmentation est due à une augmentation de la concentration de A qui conduit à l'augmentation de la vitesse de la réaction et donc une augmentation de la concentration du produit C.

### *VI.1.2. Synthèse du modèle neuronal :*

Notre réseau de neurones compte huit entrées : CA0(k-3), CA0(k-2), CA0 (k-1), CA0 (k), CAS(k-3), CAS(k-2), CAS (k-1), CAS (k). Le réseau compte une seule sortie qui est CAS(k+1). Le nombre de neurones dans la couche cachée est cinq (après plusieurs simulations effectuées). La **figure II.6** représente un schéma du réseau développé.

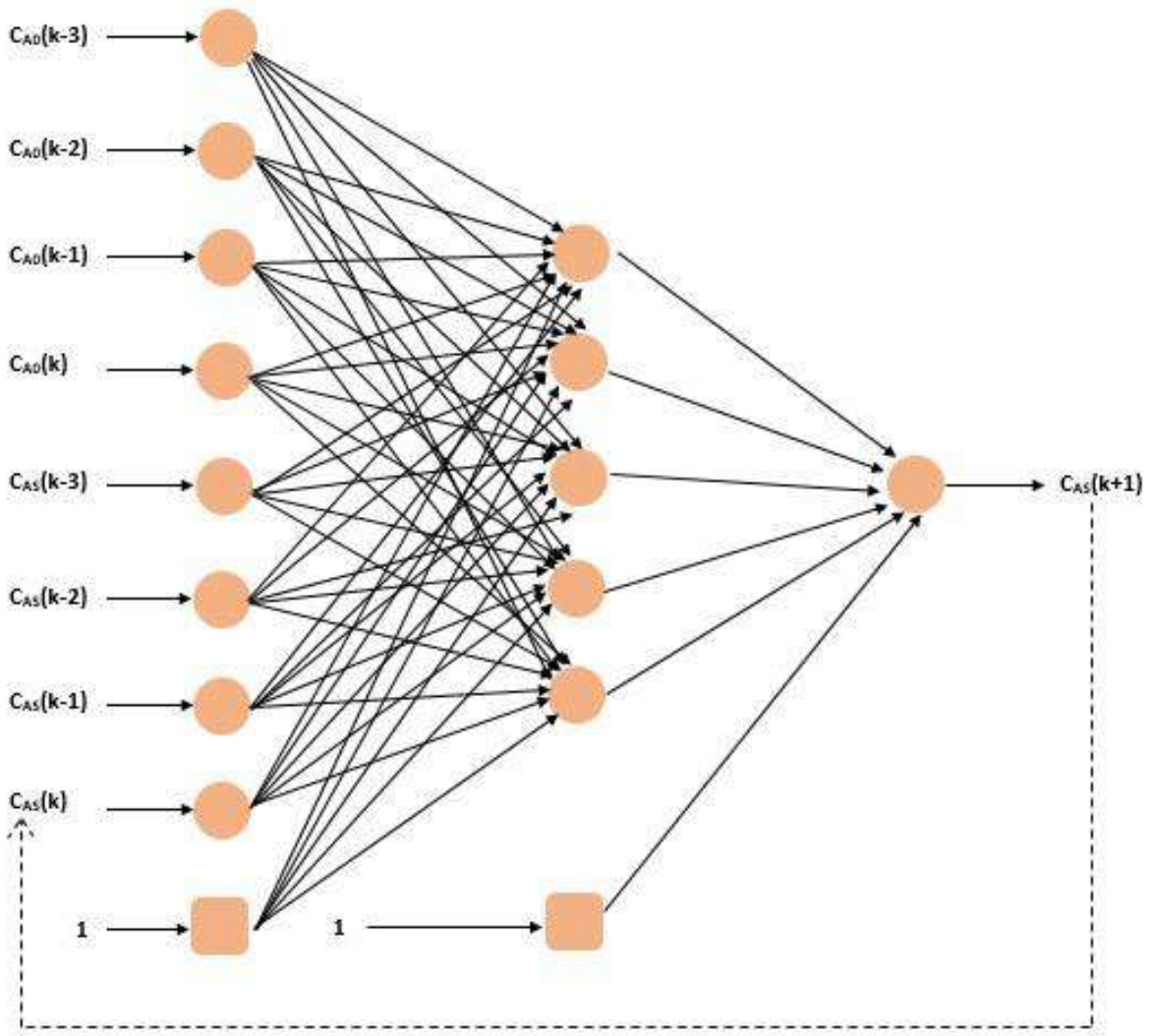



**Figure II.6 Architecture de réseau du modèle**

Nous avons généré une base de données constituée de 700 exemples qui sera utilisée comme base d'apprentissage. Dans un premier temps, nous considérons que la concentration de l'entrée du réacteur change en fonction du temps selon forme aléatoire, ensuite, nous utilisons l'équation discrète **(IV.12)** pour calculer la concentration exacte de sortie.

D'autre part, La base de test est générée de la même manière, sauf que le signal de l'entrée possède une forme spécifique. On utilise une succession d'échelons d'intensités différentes pendant des périodes variables. L'entrée est introduite dans le programme et la sortie est calculée. Cette sortie calculée par le modèle est ensuite comparée à la sortie exacte calculée à partir de l'équation IV.12. Cela est montré sur **la figure II.7**. Sur la même figure, nous avons tracé aussi le signal imposé à l'entrée du réacteur.

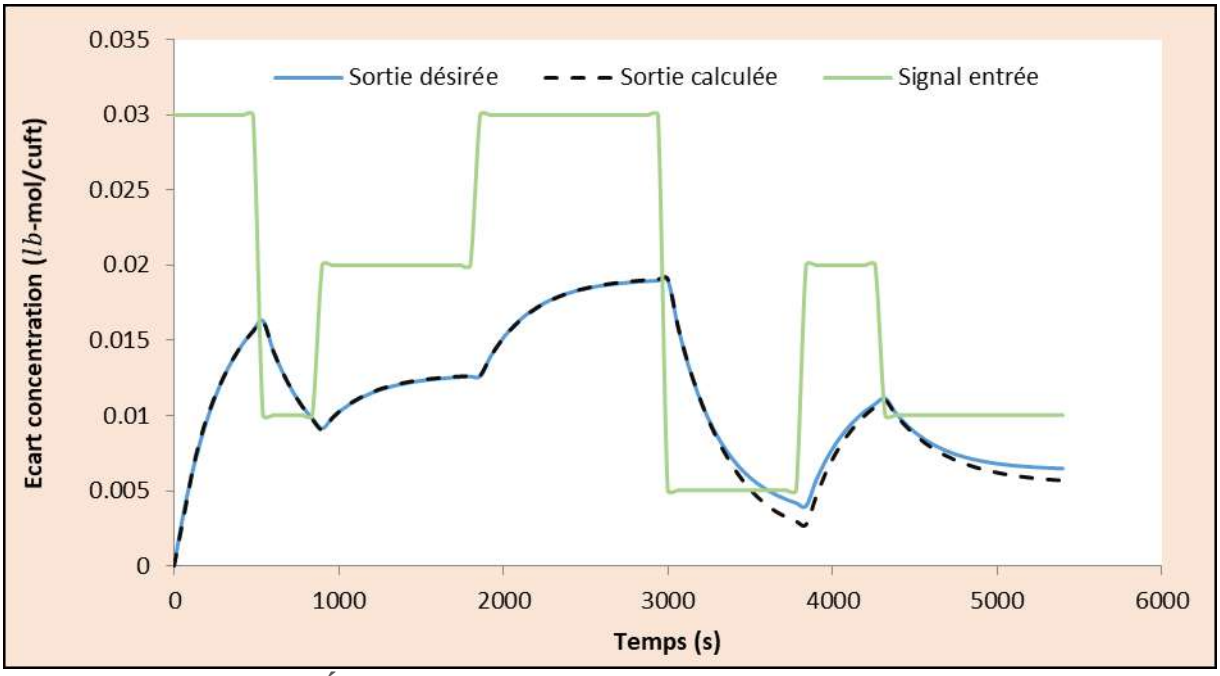



**Figure II.7 Évolution de la sortie du procédé et celle du réseau**

On voit que les deux courbes représentant la sortie exacte et celle prédite par le modèle se rapprochent bien l'une de l'autre, ce qui signifie que le réseau simule bien le procédé. L'erreur entre les deux grandeurs est de l'ordre de 2.E-03.

## VI.2. Perturbation sur le débit volumique du liquide.

### *VI.2.1. Génération de la base de données :*

Dans cette partie, on considère que le réacteur subit une perturbation du débit volumique du liquide à l'entrée. On se contentera de développer uniquement la réponse du système à cette perturbation relative à la concentration de l'espèce réactive principale

Bilan de matière de débit volumique Q sur réactif A :

$$Q.C_{A0} - Q.C_{AS} - Vk.C_{AS} = V\frac{dC_{AS}}{dt}$$ **(VII.36)** En régime transitoire

$$Q.C_{A0} - Q.C_{AS} - Vk.C_{AS} = 0$$ **(VII.37)** En régime permanant

On utilise le théorème de Taylor pour linéariser la fonction $Q.C_{AS}$

Soit $f\left(Q, C_{AS}\right)$ alors le développement en série de Taylor de la fonction $f$ autour de Q= $\hat{Q}$ et

$C_{AS}$= $C_{AS}$ est :

$$f(Q,C_{AS}) = f\left(\hat{Q},C_{AS}\right) + (Q-\hat{Q}).\frac{\partial f}{\partial Q}_{Q=\hat{Q}} + (C_{AS}-C_{AS}).\frac{\partial f}{\partial C_{AS}}_{C_{AS}=C_{AS}} + \frac{1}{2!}\left\{\left(Q-\hat{Q}\right)^2.\frac{\partial^2 f}{\partial Q^2}_{Q=\hat{Q}} + \left(C_{AS}-C_{AS}\right)^2.\frac{\partial^2 f}{\partial C_{AS}{}^2}_{C_{AS}=C_{AS}} + \left(Q-\hat{Q}\right)\left(C_{AS}-C_{AS}\right)\frac{\partial f}{\partial Q}\frac{\partial f}{\partial C_{AS}}\right\}$$

$\frac{\partial f}{\partial Q}, \frac{\partial f}{\partial C_{AS}}, \frac{\partial^2 f}{\partial Q^2}, \frac{\partial^2 f}{\partial C_{AS}{}^2}$ Sont des dérivées partielles de la fonction φ évaluée en Q=$\hat{Q}$ et

$C_{AS}=C_{AS}$ .

Donc

$$Q.C_{AS} = \hat{Q}.C_{AS} + C_{AS}\underbrace{(Q-Q)}_{Q'} + \hat{Q}\underbrace{(C_{AS}-C_{AS})}_{C'_{AS}}$$

$$Q.C_{AS} = \hat{Q}.C_{AS} + C_{AS}\left(Q'\right) + \hat{Q}\left(C'_{AS}\right) \qquad \textbf{(VII.38)}$$

Alors on remplace **(VII.38)** dans **(VII.36)** et **(VII.37)** :

$$Q.C_{A0} - \left(\hat{Q}.C_{AS} + C_{AS}\left(Q'\right) + \hat{Q}\left(C'_{AS}\right)\right) - Vk.C_{AS} = V\frac{dC_{AS}}{dt}$$ **(VII.39)** En régime transitoire

$$Q.C_{A0} - \hat{Q}.C_{AS} - Vk.C_{AS} = 0$$ **(VII.40)** En régime permanant

**(VII.39)** et **(VII.40)** $\rightarrow C_{A0}\underbrace{(Q-Q)}_{Q'} - \left[\hat{Q}.C_{AS} + C_{AS}\left(Q'\right) + \hat{Q}\left(C'_{AS}\right)\right] + \hat{Q}.C_{AS} - Vk\underbrace{(C_{AS}-C_{AS})}_{C'_{AS}} = V\frac{dC_{AS}}{dt}$.

$$Q'(t)(C_{A0}-C_{AS}) - C'_{AS}(t)(\hat{Q}+Vk) = V\frac{dC_{AS}}{dt} \qquad \textbf{(VII.41)}$$

D′autre part, la transformée de LAPLACE de **(II. 6)** s′écrit :

$$\mathcal{L}\left[Q'(t)(C_{A0}-C_{AS}) - C'_{AS}(t)(\hat{Q}+Vk) = V\frac{dC_{AS}}{dt}\right]$$

$$\overline{Q'}\left(C_{A0}-C_{AS}\right) - \overline{C'_{AS}}\left(\hat{Q}+Vk\right) = Vs.\overline{C'_{AS}}$$

$$\overline{Q'}\left(C_{A0}-C_{AS}\right) = \overline{C'_{AS}}\left(Vs+Vk+\hat{Q}\right)$$

$$\frac{\overline{C'_{AS}}}{\overline{Q'}} = \frac{\left(C_{A0}-C_{AS}\right)}{\left(Vs+Vk+\hat{Q}\right)}$$

$$\frac{\overline{C'_{AS}}}{\overline{Q'}} = \frac{\left(C_{A0}-C_{AS}\right)}{Vk+\hat{Q}}.\frac{1}{\frac{V}{Vk+\hat{Q}}.s+1}$$

On met : $\frac{V}{Vk+\widehat{Q}}=a$

La fonction de transfert est

$$G(s)=\frac{\overline{C'_{AS}}}{\overline{\overline{Q'}}}=\left[\frac{\left(C_{A0}-C_{AS}\right)}{Vk+\widehat{Q}}.\frac{1}{1+as}\right] \qquad \textbf{(VII.42)}$$

On multiplie l'opérateur zéro order hold par la fonction de transfert analogique G(s) et on passe à la transformée en Z :

$$H(s).G(s)=\frac{1-\exp((\Delta t).s)}{s}.G(s)$$

$$Z\left[H(s).G(s)\right]=Z\left[\frac{1-\exp((\Delta t).s)}{s}..G(s)\right]$$

Il s'ensuit alors :

$$Z\left[H(s).G(s)\right]=(1-Z^{-1})*Z\left[\frac{G(s)}{s}\right]$$

$$H(Z)=(1-Z^{-1})*Z\left(\frac{\left[\frac{\left(C_{A0}-C_{AS}\right)}{Vk+\widehat{Q}}.\frac{1}{1+as}\right]}{s}\right)$$

$$H(Z)=(1-Z^{-1})*\frac{\left(C_{A0}-C_{AS}\right)}{Vk+\widehat{Q}}.Z\left(\frac{\frac{1}{a}}{\frac{1}{a}.s+s^2}\right) \qquad \textbf{(VII.43)}$$

La transformée en Z de **(VII.43) :**

$$H(Z)=(1-Z^{-1})*\frac{\left(C_{A0}-C_{AS}\right)}{Vk+\widehat{Q}}.\frac{\left(1-e^{-\Delta\tau/a}\right)Z^{-1}}{\left(1-e^{-\Delta\tau/a}Z^{-1}\right).(1-Z^{-1})} \qquad \textbf{(VII.44)}$$

La fonction de transfert discrète

$$H(Z)=\frac{\overline{\overline{C'_{AS}}}}{\overline{\overline{Q'}}} \qquad \textbf{(VII.45)}$$

Qui est le rapport, dans le domaine Z de la sortie du procédé et de son entrée. Après l'égalité entre les **(VII.44)** et **(VII.45)**, nous obtenons :

$$\frac{\overline{\overline{C'_{AS}}}}{\overline{\overline{Q'}}} = \frac{\left(C_{A0} - C_{AS}\right)}{Vk + \hat{Q}} \cdot \frac{\left(1 - e^{-\Delta\tau/a}\right) Z^{-1}}{\left(1 - e^{-\Delta\tau/a} Z^{-1}\right)}$$

Donc $$\left(Vk + \hat{Q}\right).\overline{\overline{C_{AS}}}\left(1 - e^{-\Delta\tau/a} Z^{-1}\right) = \overline{\overline{Q'}}.\left(C_{A0} - C_{AS}\right)\left(1 - e^{-\Delta\tau/a}\right) Z^{-1}$$

Et aussi $$\left(Vk + \hat{Q}\right).\left[\overline{\overline{C_{AS}}}(Z). - Z^{-1}.\overline{\overline{C_{AS}}}(Z).e^{-\Delta\tau/a}\right] = \left(C_{A0} - C_{AS}\right)\left[Z^{-1}\overline{\overline{Q'}}(Z) - Z^{-1}\overline{\overline{Q'}}(Z).e^{-\Delta\tau/a}\right]$$

Alors

$$\left(Vk + \hat{Q}\right).\left[C_{AS}(k) - C_{AS}(k-1).e^{-\Delta\tau/a}\right] = \left(C_{A0} - C_{AS}\right)\left[Q(k-1) - Q(k-1).e^{-\Delta\tau/a}\right]$$

Notre système dynamique est ainsi décrit par l'équation discrète suivante après introduction des indices k correspondant aux étapes dans le temps :

$$C_{AS}(k) = \frac{\left(C_{A0} - C_{AS}\right)}{Vk + \hat{Q}} \cdot \left[Q(k-1)(1 - e^{-\Delta\tau/a})\right] + C_{AS}(k-1).e^{-\Delta\tau/a} \qquad \textbf{(VII.45)}$$

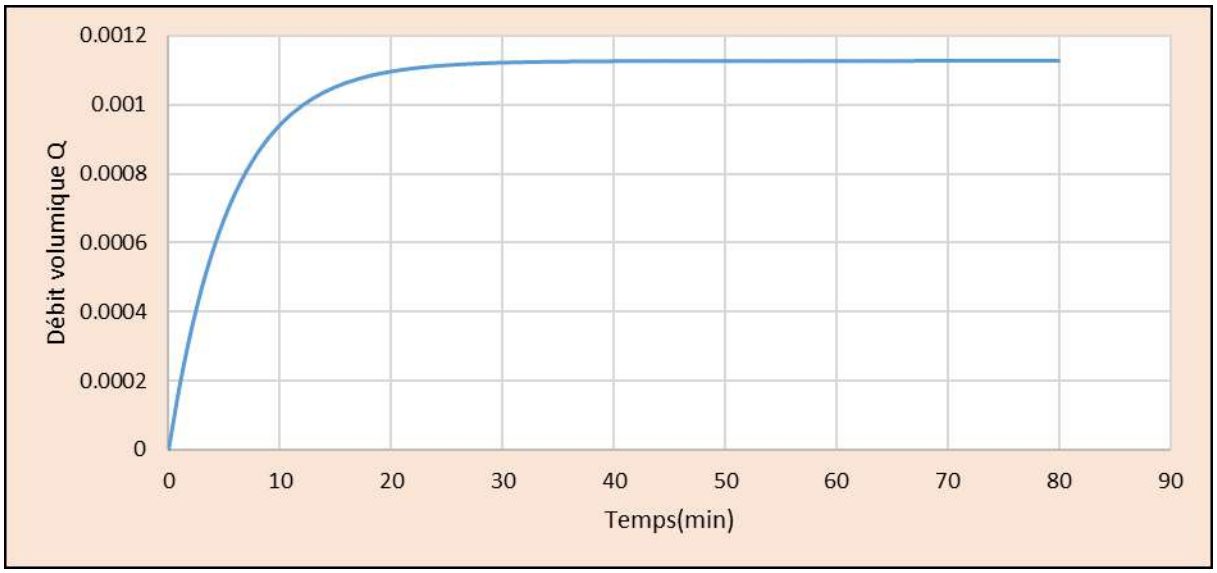



**Figure II.8 Variations de la concentration de A en fonction de temps (échelon sur le débit volumique)**

**La figure II.8** représente la variation de de la concentration de réactif A en fonction de temps réponse à un échelon sur le débit volumique du liquide d'intensité 15. On observe une augmentation de $C_{As}$ au cours du temps jusqu'à atteindre 0.0017 lbmol/ft$^3$ qui est le nouveau régime permanant. Ainsi, l'équation VII.45 servira pour générer la base d'apprentissage et de test.

VI.2.2. Synthèse du modèle neuronal :

Pour ce faire, nous avons fixé l'architecture suivante :

- Nombre de neurone dans la couche d'entrée avec le biais : 09
- Nombre de neurone dans la couche cachée avec le biais : 06
- Nombre de neurone dans la couche de sortie : 01

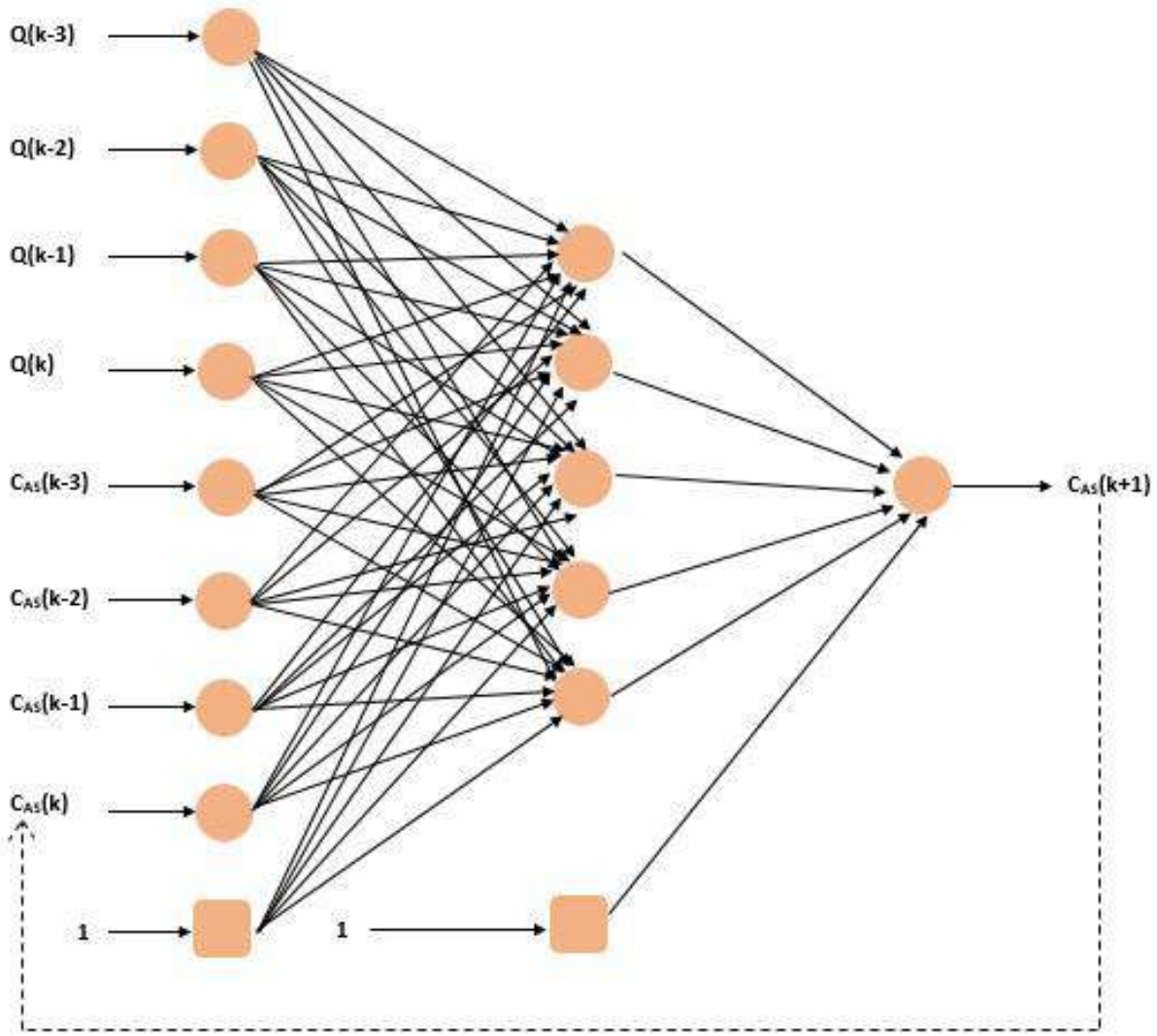



**Figure II.9 Architecture de réseau du modèle de Q**

On a fait le même travail pour Q pour générer une base de données constituée de 700 exemples de type entrée – sortie. Dans un premier temps, nous considérons que le débit volumique à l'entrée change aléatoirement en fonction du temps, ensuite, nous utilisons l' équation **(VII.45)** pour calculer la concentration de A en sortie. En second lieu on génère

une base de test en donnant une forme particulière à la variation de débit volumique à l'entrée et on calcul par l'équation **(VII.45)** la sortie exacte. Cette sortie sera comparée à la sortie délivrée par le modèle neuronal. Ainsi on fournit au réseau le signal de l'entrée représenté sur **la figure II.10** constitué d'échelons et d'impulsion. Sur **la figure II.11** on représente les évolutions de la sortie exacte et la sortie prédite par le modèle neuronal. On note que les deux courbes sont presque identiques indiquant que notre réseau fonctionne bien, Sachant que la valeur de l'erreur entre les deux grandeurs est de l'ordre de 1.E-03.

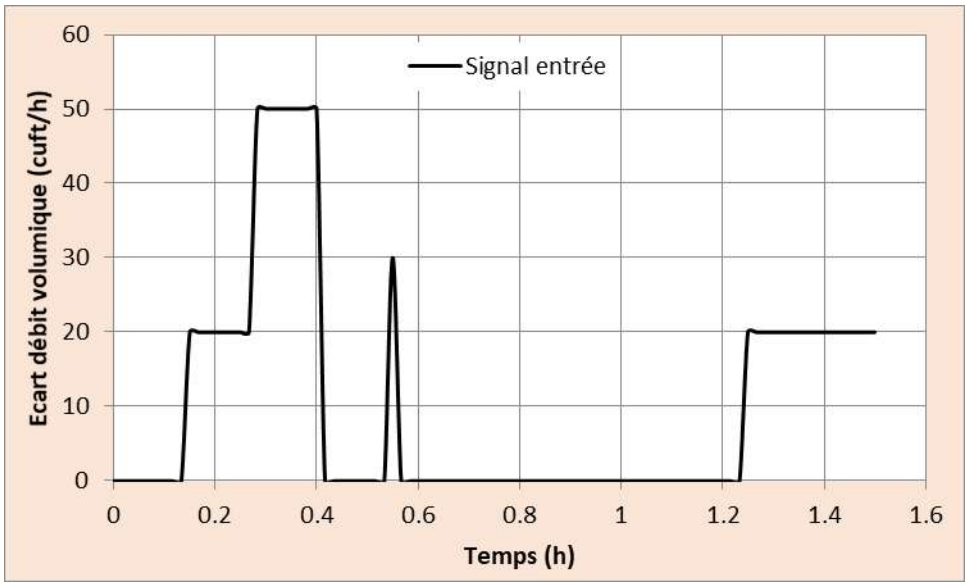



**Figure II.10 Signal de l'entrée (variation du débit volumique).**

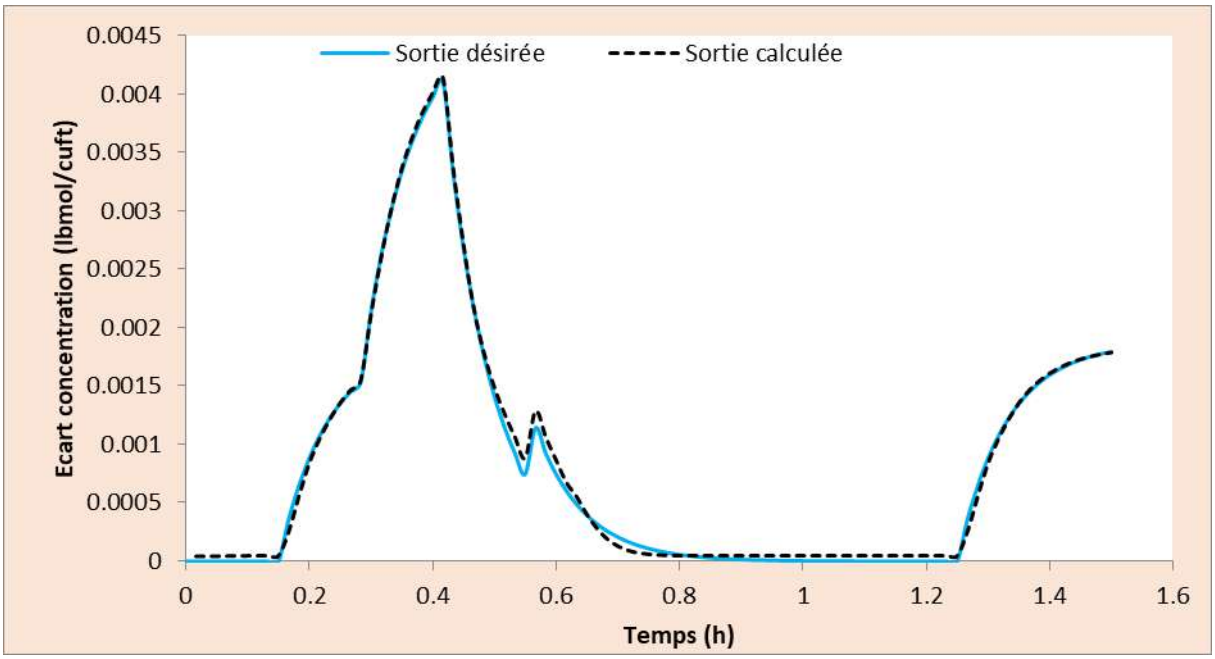



**Figure II.11 : comparaison entre la sortie prédite par le réseau neuronal et la solution exacte.**

## VII. Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons présenté la modélisation d'un système dynamique décrit par un ensemble d'équations différentielles non linéaires. Il s'agit en l'occurrence d'un réacteur continu parfaitement agité dans lequel la réaction de premier ordre de synthèse du propylène glycol à partir de l'hydrolyse de l'oxyde de propylène est mise en œuvre. Les résultats obtenus montrent que le modèle simule bien le processus chimique

# CONCLUSION GENERALE.

L'étude présentée dans ce mémoire porte sur la modélisation d'un système dynamique décrit par un ensemble d'équations différentielles non linéaires. Il s'agit en l'occurrence d'un réacteur continu parfaitement agité dans lequel la réaction de premier ordre de synthèse du propylène glycol à partir de l'hydrolyse de l'oxyde de propylène est mise en œuvre. Ce modèle permettra de tester la stabilité du réacteur lorsque certaines de ses entrées sont perturbées par rapport à leurs valeurs en régime permanent.

Afin d'atteindre cet objectif, nous sommes passés par deux étapes :

La première partie, qui est une synthèse bibliographique, a été consacrée à la présentation des réseaux des neurones : leur fonctionnement, leur architecture, leur différent type…etc. On a présenté ensuite quelques applications typiques et on a montré, de manière concrète, que les réseaux de neurones constituent un outil performent de modélisation de procédés chimiques. En deuxième lieu, nous avons rappelé quelques notions concernant les réacteurs chimiques, leurs types, leur classification et leur mode de fonctionnement.

La deuxième partie de ce travail était consacrée à l'application du modèle basé sur le réseau de neurones à modélisation de la dynamique du réacteur. Les bases d'apprentissage et de test ont été générées à partir de la résolution des équations des bilans de matière en régime transitoire. Différentes formes des perturbations sur les entrées ont été testées. Les variables d'entrée retenues dans cette étude sont la concentration du réactif principal à l'entrée et le débit volumique du liquide à l'entrée. Les résultats des simulations effectuées ont montré qu'après l'apprentissage du réseau, la sortie calculée est très proche de la sortie réelle et les résultats obtenus sont satisfaisants. Ceci indique que ce type de modèle simule bien la dynamique du processus chimique.

Donc nous concluons que le réseau de neurones est un moyen approprié pour résoudre les problèmes très complexes qui n'ont pas trouvé de solutions en utilisant les méthodes traditionnelles. Ils ont amélioré et développé la modélisation et le traitement du signal ainsi que le contrôle des procédés chimique qui sont décrit par des systèmes d'équations différentielles non linéaire.

# BIBLIOGRAPHIE

[1] M. PARIZEAU, « Réseaux de neurones », GIF-21140 et GIF-64326, 2006.

[2] C. Touzet, Les réseaux de neurones artificiels : Introduction au connexionnisme -Seconde édition, 2006.

[3] G. Harrison et J. Tanner, Human biology: An Introduction to human evolution, Oxford science publication, 1998.

[4] C. BISHOP, Neural Networks for Pattern Recognition, Oxford University Press, 1995.

[5] M. Y. AMMAR, Neural networks for kinetic reaction modelling applicable to batch to continuous reactor transposition, Toulouse : PhD Thèses I.N.P, 17 July 2007.

[6] A. Mohamed Yessin, Mise en œuvre de réseaux de neurones pour la modélisation de cinétiques réactionnelles en vue de la transposition batch/continu., Ecole Nationale d'Ingénieurs de Sfax, Tunisie: Thèse de doctorat , 2007.

[7] DOUNIT. Salah, Commande prédictive (robuste) d'un procédé chimique, Institut national polytechnique de Toulouse: Mémoire DEA, 1996.

[8] A. DRAIDI, « Répartition économique de l'énergie électrique utilisant les techniques d'intelligence artificielle »., Constantine: Thèse de Magistère, université Mentouri, 2010.

[9] E. KOLLER, Aide-mémoire de génie chimique, 2001.

[10] Trambouz. Pierre et Euzen. Jean-Paul, Les réacteurs chimiques : de la conception à la mise en œuvre, Publications de l'institut français du pétrole..

[11] J. Villermaux, Génie de la Réaction Chimique, Tec Doc Lavoisier, 1993.

[12] Laboratoire MAG QUEBEC, *canada propylène glycol 40% avec inhibiteur de corrosion, fiche signalétique.*

[13] M. PARIZEAU, «Le perceptron multicouche et son algorithme de rétropropagation des erreurs», 2016.

[14] Djamai. Amira , « modélisation du procédé de la granulation en lit fluidisé par les réseaux neuro-mimétique», mémoire de fin d'étude université de Kasdi Marbah-Ouargla, 2016.

[15] A.KABOUCHE, Modélisation et simulation d'un réacteur thermique -Etude de stabilité, 2012.

## ملخص

الشبكات العصبية الاصطناعية هي واحدة من أقوى أدوات الذكاء الاصطناعي. هذه الشبكات لها خصائص مثيرة للاهتمام مثل نمذجة الوظائف غير الخطية ، والمعالجة المتوازية ، والتعلم ،.... هذه الخصائص تجعلهم مرشحين مثاليين لتحديد الأنظمة غير الخطية. الهدف من دراستنا هو نمذجة نظام ديناميكي موصوف بمعادلة تفاضلية بواسطة الشبكات العصبية. لقد اخترنا نمذجة السلوك الديناميكي لمفاعل مستمر أثناء تنفيذ التفاعل لتخليق البروبيلين غليكول عن طريق التحلل المائي لأكسيد البروبيلين, واختبار ثبات المفاعل عندما تكون بعض مدخلاته مختل. و أظهرت نتائج المحاكاة أن النمودج المطور يحاكي عملية مرضية جدا للمفاعل .



**الكلمات المفتاحية:** النمدجة , الخلايا العصبية الإصطناعية , الشبكات , اضطرابات.



## Résumé

Les réseaux de neurones artificiels constituent l'un des outils les plus performants de l'Intelligence Artificielle. Ces réseaux possèdent des caractéristiques intéressantes telles que la modélisation de fonctions non linéaires, le traitement parallèle, l'apprentissage,…. Ces caractéristiques font qu'ils sont des candidats idéaux pour l'identification des systèmes non linéaires. L'objectif de notre étude est de de modéliser un système dynamique décrit par une un système d'équations différentielles en utilisant les réseaux de neurones. Nous avons choisi de modéliser le comportement dynamique d'un réacteur continu parfaitement agité lors de la mise en œuvre de la réaction de synthèse du propylène glycol par hydrolyse de l'oxyde de propylène, et de tester la stabilité du réacteur lorsque certaines de ses entrées (concentration de réactif principal et débit volumique de fluide) sont perturbées. Les résultats des simulations ont montré que le modèle développé simule de façon très satisfaisante le fonctionnement du réacteur.



**Les mots clé :** modélisation, neurones artificiels, réseaux, perturbations.



## Abstract

Artificial neural networks are one of the most powerful tools in Artificial Intelligence. These networks have interesting characteristics such as the modeling of nonlinear functions, parallel processing, learning, these characteristics make them ideal candidates for the identification of nonlinear systems. The objective of our study is to model a dynamic system described by a set of differential equations using neural networks. We have chosen to model the dynamic behavior of a perfectly continuous stirred tank reactor during the implementation of the reaction for the synthesis of propylene glycol by hydrolysis of propylene oxide, and to test the stability of the reactor when some of its inputs are disturbed. The simulation results showed that the model simulates the operation of the reactor very satisfactorily.



**key words:** modeling, artificial neurons, networks, disturbances.