

THESE

Présentée pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE TOULOUSE

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

Spécialité : Génie des Procédés et de l'Environnement

Par

Sofiane HOCINE

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

IDENTIFICATION DE MODELES DE PROCEDES PAR

PROGRAMMATION MIXTE DETERMINISTE

Soutenue le 08 Décembre 2006 devant le Jury composé de :

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

A la mémoire de ma grand mère

A ma mère

A mon jumeau

A Jéééééééééééééééé

A ceux qui me sont chers...

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

Samuel Beckett

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

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

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

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

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

Je voudrais également saluer l'ensemble des doctorants, en particulier ceux de l'équipe que j'ai eu la chance de connaître dans une ambiance multiculturelle : mon grand fils Alberto, Antonin le retardataire, Firooz l'intelligent, Oscar le sage, Jose Luis le sympa, Ludovic le bûcheur, Adrien le thermodynamicien du second principe et Nadir le fromager. Je remercie l'ensemble des stagiaires de l'équipe, et en particulier ceux que j'ai encadrés : Julien DEBRUYNE et Laurent THUILLEAUX à qui je souhaite une grande réussite. Merci à tous mes collègues et amis de longue date du laboratoire : Alicia, Denis, Fahima, Flavie, Frédéric, Hakima, Ilyes, Iréa, Krime, Micheline, Mohammed (x2), Wassila, ... J'ai grandement apprécié les discussions variées que l'on a pu avoir ensemble tout au long de ces trois années. Je leur exprime ma profonde sympathie et leur souhaite beaucoup de bien.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

TITRE : Identification de modèles de procédés par programmation mixte déterministe

RESUME :

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

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

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

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

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

MOTS-CLES :

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

TITLE : Process model identification via deterministic mixed-integer programming

ABSTRACT:

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

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

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

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

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

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

SOMMAIRE

Sommaire	13
-----------------------	-----------

Introduction générale	21
------------------------------------	-----------

Chapitre 1. PROBLEMATIQUE	27
--	-----------

1. OPTIMISATION ET GENIE DES PROCÉDES	29
2. DOMAINES CONCERNES PAR L'OPTIMISATION EN GENIE DES PROCÉDES .	31
3. PROBLEMATIQUE	34
3.1. IDENTIFICATION STATIQUE	35
3.2. IDENTIFICATION DYNAMIQUE	35
4. PROCEDURES DE RESOLUTION	36

Chapitre 2. METHODES D'OPTIMISATION EN VARIABLES MIXTES	39
--	-----------

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

3. PROBLEMATIQUE GENERALE ET CHOIX DE LA METHODE.....	68
4. DEMARCHE ADOPTEE.....	70

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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