Application de la modélisation par substitution à la dynamique des procédés

Alessandro DI PRETORO[1], Bastian BRUNS[2], Stéphane NEGNY[1], Julia RIESE[2]

Affiliation 1 : Laboratoire de Génie Chimique, Université de Toulouse, CNRS/INP/UPS, Toulouse, France

Affiliation 2 : Ruhr University Bochum, Faculty of Mechanical Engineering, Laboratory of Fluid Separations, Universitätsstraße 150, Bochum 44801, Germany

Introduction

Avec la digitalisation des entreprises et le volume croissant de données, l'approche phénoménologique pour la modélisation des procédés est parfois remplacée (ou intégrée) par la modélisation par substitution. Un modèle de substitution est un modèle basé uniquement sur des données, par conséquent qui ne cherche pas à traduire sous forme d'équations les phénomènes physiques régissant le comportement du système étudié. Différentes méthodes permettent d'obtenir ce type de modèle ; la plus simple de ces approches est l'approche par régression avec des fonctions analytiques toutefois on dispose également d'approches avec des fonctions de probabilité plus complexes. Pour la résolution de ce type de modèle il n'y a plus besoin de résoudre toutes les équations algébriques et/ou différentielles qui caractérisent le système mais on peut exploiter une seule fonction qui permet de corréler les variables d'intérêt. Cet aspect permet donc de réduire considérablement l'effort et le temps de calcul (mise en œuvre de solutions plus efficaces en termes de calcul) pour les problèmes d'optimisation ou, tout simplement, pour la simulation d'un procédé et notamment lorsqu'il s'agit de traiter des systèmes temps réel ou dynamiques. Cependant, le traitement des données joue un rôle critique, et plus particulièrement sur la qualité de la prédiction d'un modèle qui affecte fortement la fiabilité de la solution. Le jeu de données est donc primordial et la procédure de mise à jour continue des données est considérablement impactée par toutes les analyses préliminaires visant à écarter les données aberrantes. Il est rapporté que les données de mauvaise qualité ont un coût de plusieurs milliards de dollars par an (« The cost of poor data quality », 2020), tant en termes de dépenses pour les récupérer qu'en termes de temps calcul gaspillé. Ces difficultés et défis pour la modélisation par substitution sont encore plus importants lorsqu'il s'agit d'étudier des systèmes dynamiques à cause de l'évolution temporelle des variables d'intérêt. Dans ce cas, le modèle a pour objectif le remplacement d'un modèle phénoménologique de type différentiel. Dans cette étude, on démontre l'efficacité de la modélisation par substitution en termes de temps calcul et précision de la solution au travers de deux exemples sur des systèmes dynamiques et avec des approches différentes.

Méthodologie et résultats

Le premier exemple aborde un problème de planification optimale avec un modèle basé sur une équation différentielle du deuxième ordre (Di Pretoro et al., 2022). Il s'agit d'un système de production d'oxyde d'éthylène et le modèle est construit pour corréler le débit en oxygène en entrée avec la production en éthylène en sortie. Le modèle phénoménologique, un modèle linéaire et un modèle différentiel sont comparés (Figure 1a). Le modèle du 2ème ordre permet d'avoir une évolution temporelle similaire à celle du modèle phénoménologique avec une erreur de 0.05 % et une erreur de 0.03 % par rapport à la solution optimale.

Le deuxième exemple concerne un réacteur CSTR dont la température est contrôlée. Dans ce cas, on utilise une fonction explicite par rapport au temps dont les coefficients sont obtenus après une

régression (Shokry et al., 2020). Sur la figure 1b la température de la double enveloppe en fonction du temps est comparée entre les deux modèles en boucle fermée.

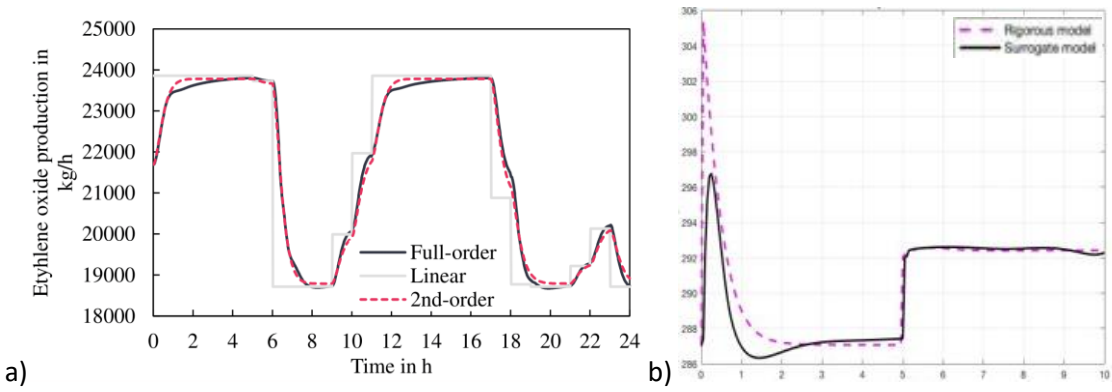

Figure 1 : a) Comparaison entre modèle phénoménologique, linéaire et du 2ème ordre pour un problème de planification optimale
b) Température de la double enveloppe [K] vs. temps [s]

Dans le deuxième exemple, l'utilisation de la fonction explicite pour obtenir le modèle apporte des résultats avec une précision inferieure. Le comportement en régime permanent est bien décrit par contre le régime transitoire manque de précision. C'est pourquoi, cette dernière méthode nécessite de nouveaux développements et une étude plus approfondie (perspective de ce travail).

Conclusion

A partir des résultats obtenus on peut tirer plusieurs conclusions :

- La modélisation par substitution est efficace et permet de décrire le comportement de manière détaillée des systèmes complexes ;
- Le modèle obtenu peut être utilisé pour remplacer le modèle phénoménologique dans un problème d'optimisation et permet d'obtenir la même solution optimale ;
- Le temps calcul nécessaire pour atteindre la solution (avec presque la même précision) est inferieur par rapport au modèle physique ;
- Pour le deuxième cas d'étude, le modèle de substitution montre une bonne description du système en boucle fermée, mais pour les régimes transitoires il est moins performant que le modèle phrénologique et nécessite donc une amélioration au niveau méthodologique.

Pour toutes ces raisons, la modélisation par substitution est une approche efficace qui doit continuer ses futurs développements méthodologiques de par son fort potentiel dans de nombreuses applications nécessaires pour la transition digitale.

Références bibliographiques

A. Di Pretoro, B. Bruns, S. Negny, M. Grünewald, J. Riese, Demand Response Scheduling Using Derivative-Based Dynamic Surrogate Models, *Computers & Chemical Engineering*, 2022, 107711.

Shokry, A., Baraldi, P., Zio, E., Espuña, A., Dynamic surrogate modeling for multistep-ahead prediction of multivariate nonlinear chemical processes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2020, 59 (35), 15634–15655. doi: 10.1021/acs. iecr.0c00729 .

«The cost of poor data quality» retrieved at https://towardsdatascience.com/the-cost-of-poor-data-quality-cd308722951f