Approches génératives pour la synthèse de procédés : apport des méthodes d'optimisation et d'intelligence artificielle

Tahar NABIL[1], Jean-Marc COMMENGE[3], and Thibaut NEVEUX[2,3*]

Affiliation 1 : EDF R&D, 7 Boulevard Gaspard Monge, F-91120 Palaiseau, France

Affiliation 2 : EDF R&D, 6 quai Watier, F-78401 Chatou, France

Affiliation 3 : Laboratoire Réactions et Génie des Procédés (LRGP), UMR 7274 CNRS, Université de Lorraine, Nancy F-54001, France

La synthèse d'un procédé consiste à proposer une structure de procédé, c'est-à-dire un ensemble d'opérations unitaires (pour la transformation de la masse et de l'énergie) interconnectées dans un réseau (schéma de procédé, *flowsheet*), associé à des degrés de liberté tels que le dimensionnement et les conditions opératoires des équipements constitutifs du procédé. Les approches pour aborder cette synthèse se sont progressivement diversifiées, partant d'heuristiques et expertises, en passant par des itérations avec des simulateurs de procédés et des travaux expérimentaux, puis vers l'usage de techniques d'optimisation mathématique comme aide à la conception.

Une approche commune consiste à optimiser la structure du procédé parmi un ensemble postulé de chemins alternatifs pour les fluides, appelé superstructure, et d'utiliser des méthodes d'optimisation combinatoires (MINLP, GDP etc.) pour sélectionner les structures les plus adaptées dans un contexte donné, i.e. un ou plusieurs objectifs et contraintes. Ces approches s'avèrent très complexes à mettre en œuvre dans des cas industriels réels et introduisent intrinsèquement un biais inductif dû à la restriction à un espace de recherche limité par la superstructure définie : si la structure optimale n'est pas dans l'espace défini, l'optimiseur ne peut pas la trouver.

Récemment, des approches génératives ont utilisé des algorithmes avancés pour proposer des structures de procédés directement à partir d'un ensemble d'opérations unitaires disponibles. Ces approches diffèrent des techniques d'optimisation conventionnelles par leur capacité à produire de nouvelles structures, au lieu de choisir parmi un ensemble prédéterminé de structures.

Les approches génératives peuvent utiliser divers algorithmes (voir Figure 1), tels que la programmation évolutionnaire pour construire une structure de procédé en appliquant des opérateurs de mutation simples (ajout d'unités, suppression d'unités, permutation de flux) à une structure de procédé [Neveux, 2018], l'apprentissage automatique basé sur des techniques de traitement du langage naturel [Nabil et al., 2019], ou encore l'apprentissage par renforcement basé sur un problème à deux joueurs [Göttl et al., 2022]. D'autres méthodes pourraient également être transposées à partir de domaines de recherche similaires tels que la synthèse de produits, où les réseaux génératifs adverses (GAN) ont été utilisés pour générer des molécules à l'aide d'une représentation sous forme de graphe [Elton et al., 2019].

Cette communication vise à présenter ce domaine naissant via des expérimentations récentes, et à discuter de certains aspects clés et défis, comme : le mode de représentation abstrait d'une structure de procédé (e.g. graphe orienté, langage dédié), la base de données initiale pour certaines méthodes, la qualité de la prédiction du modèle de procédé utilisé (e.g. phénoménologique, statistique) ou encore l'appropriation par les ingénieurs (e.g. formulation du problème de conception, déduction de nouvelles heuristiques à partir des résultats) pour recentrer le concepteur sur sa valeur ajoutée.

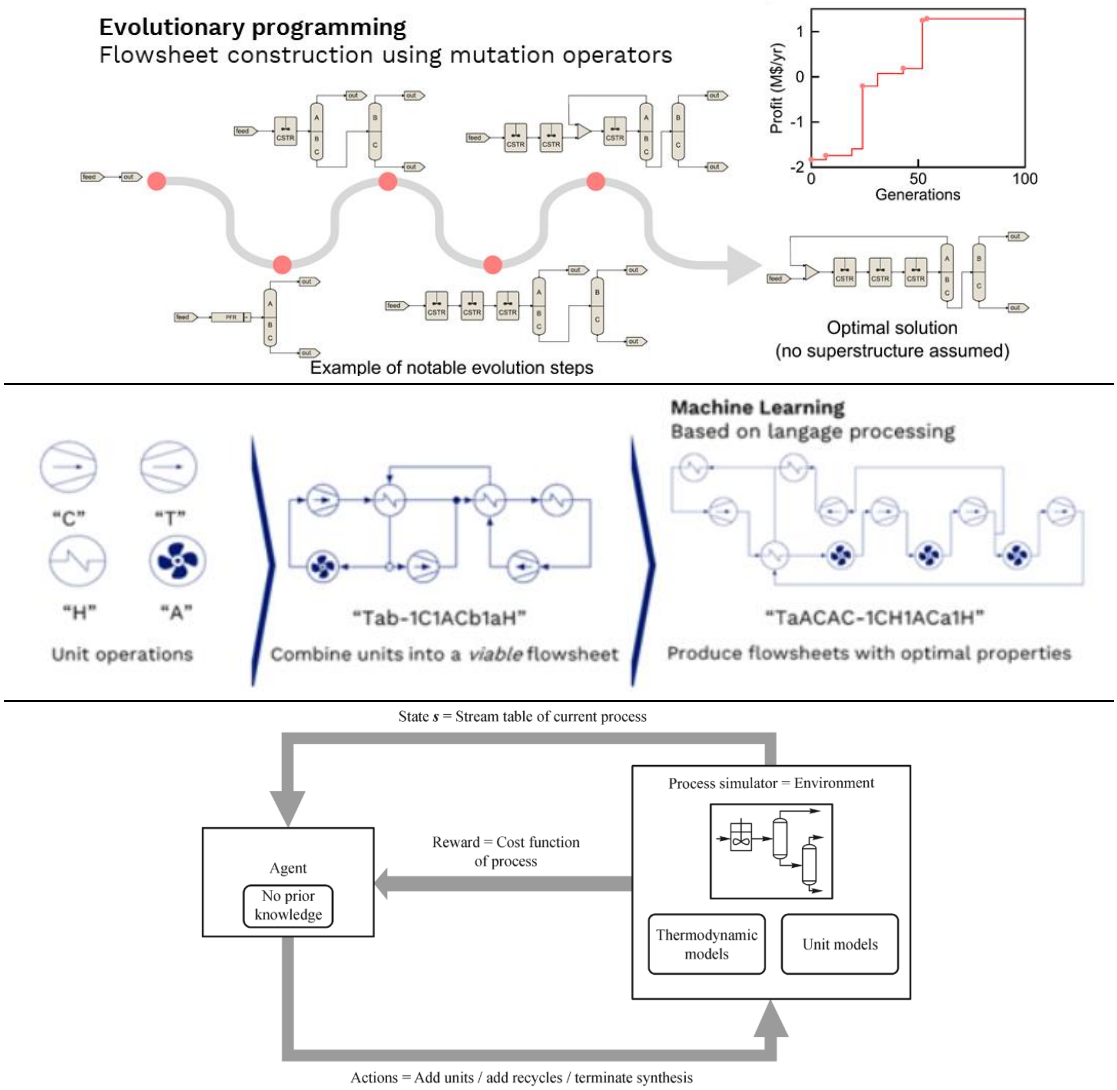

Figure 1. Exemples d'approches génératives pour construire des *flowsheets* : programmation évolutionnaire utilisant des opérateurs de mutations (haut), apprentissage automatique utilisant le traitement du langage (milieu), et apprentissage par renforcement utilisant un problème à 2 joueurs (bas) ; respectivement adaptés de Neveux (2018), Nabil *et al.* (2019), and Göttl *et al.* (2022).

Références bibliographiques

Elton, D. C. ; Boukouvalas, Z. ; Fuge, M. D. ; Chung, P. W., Deep learning for molecular design—a review of the state of the art. *Molecular Systems Design & Engineering,* 2019, 4, 828–849.

Göttl, Q. ; Grimm, D.G. ; Burger, J., Automated synthesis of steady-state continuous processes using reinforcement learning. *Frontiers of Chemical Science and Engineering volume*, 2022, 16, 288–302.

Nabil, T. ; Le Moullec, Y. ; Le Coz, A., Machine learning based design of a supercritical CO_2 concentrating solar power plant. In: 3rd European Conference on Supercritical CO_2 (sCO_2) Power Systems 2019: 19th-20th September 2019. S. 148–157.

Neveux, T., Ab-initio process synthesis using evolutionary programming, *Chemical Engineering Science*, 2018, 185, 209–22.