

I.1. Introduction à la modélisation des phénomènes physiques

I.1.1 Introduction

La modélisation et la simulation des procédés sont **des outils** rapides, efficaces et **économiques** dans la plus part des applications industriels, elles sont très utiles **pour concevoir, prévoir, et optimiser** une machine ou une unité industriel. Elles prennent une large utilisation, surtout avec le développement de l'informatique, où plusieurs simulateurs commerciaux sont disponibles **pour résoudre plusieurs problèmes rencontrés** dans l'industrie pétrochimique, pharmaceutique, mécanique etc.

I.1.2 .Définitions

I.1.2 .1 Processus

Un processus est caractérisé par :

- une ou plusieurs **grandeurs de sortie, mesurables**, qui constituent le résultat du processus,
- une ou plusieurs grandeurs **d'entrée (ou facteurs)**, qui peuvent être de deux types :
 - des entrées sur lesquelles il est **possible d'agir** (entrées de commande),
 - des entrées sur lesquelles il n'est **pas possible d'agir (perturbations)** ; ces dernières peuvent être aléatoires ou déterministes, mesurables ou non mesurables.

Les processus peuvent être de toutes natures : physique, chimique, biologique, écologique, financier, sociologique, etc.

I.1.2 .2 La simulation (Définitions)

- La simulation est un outil utilisé pour étudier les résultats d'une action sur un élément sans réaliser l'expérience sur l'élément réel.
Lorsque l'outil de simulation utilise un ordinateur on parle de simulation numérique.
Le moyen le plus simple serait de tenter l'expérience, c'est-à-dire d'exercer l'action souhaitée sur l'élément en cause pour pouvoir observer ou mesurer le résultat. Dans de nombreux cas l'expérience est irréalisable, trop chère ou contraire à l'éthique. On a alors recours à la simulation : rechercher un élément qui réagit d'une manière semblable à celui que l'on veut étudier et qui permettra de déduire les résultats.
- La **simulation** est une reproduction (représentation) artificielle du fonctionnement (comportement) d'un appareil, d'une machine, d'un système, d'un phénomène ou d'autre, à l'aide d'un modèle matériel (maquette) ou d'un programme informatique, à des fins d'étude, de démonstration ou d'explication, dont les paramètres et les variables sont les images de ceux du processus étudié.
- Cette technique a pour but de visualiser et prévoir la conduite d'un système, afin d'évaluer leurs performances, étudier et optimiser son fonctionnement dans diverses situations, ainsi pour améliorer la compréhension des phénomènes, diminuer les coûts, raccourcir le temps de mise sur le marché des nouveaux produits et réduire les risques (incendie, explosion, dégradation indésirable etc.) dues au mauvais fonctionnement du système.

I.1.2 .3 La modélisation:

En termes simples, la modélisation est une procédure qui permet, à partir de faits expérimentaux et (ou des lois fondamentales), de construire un modèle. La conception d'un modèle d'un système est une représentation du système réel ou imaginaire dans le but d'analyser, de prédire son comportement dans différentes situations et déterminer des lois de commande qui permettent de définir l'état de passage d'un système, d'un point de fonctionnement à un autre.

En général, les réponses peuvent être orientées dans quatre directions, qui sont les objectifs généraux d'un modèle : concevoir, comprendre, prévoir et commander.

Si, pour la construction du modèle d'un système, il y a un autre système physique, sur lequel il est possible d'effectuer des expériences de façon économique, alors un tel moyen d'étude des systèmes réels (originaux) est appelé modélisation physique. Par modèle mathématique, il faut entendre une formule, une équation, un système d'équations, une matrice complexe ou tout autre appareil mathématique encore plus complexe qui permet, avec une approximation suffisante, de décrire un phénomène ou de condenser l'information fournie par un ensemble de données.

I.1.2 .4 Les modèles mathématiques :

On appelle modèle mathématique l'ensemble des relations qui décrivent le comportement d'un système (Fig. I.1), reliant ses sorties à ses entrées. Ses entrées sont les paramètres qui agissent sur son comportement qui peuvent être contrôlées ou non. Ses sorties sont les paramètres résultant des valeurs données aux entrées. Le modèle ne tient pas compte de tous les paramètres, il se limite à ceux indispensables à la résolution du problème.

Le modèle mathématique permet de séparer les diverses variables, en faisant apparaître les rôles respectifs des divers phénomènes: réaction chimique, transfert de masse, transfert de chaleur, comportement des fluides en écoulement, etc.

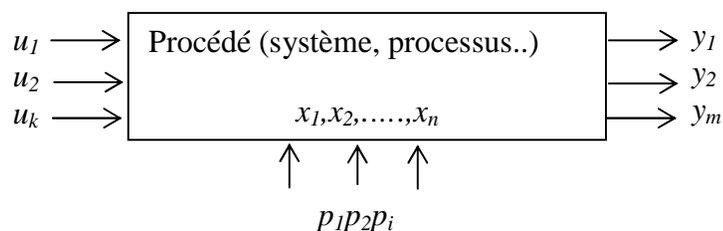


Fig. I.1- Nomenclature décrivant la structure d'un procédé

On distingue dans un procédé (figure I.1), le vecteur des entrées (u_1, u_2, \dots, u_k) , le vecteur des sorties (y_1, y_2, \dots, y_m) et le vecteur des perturbations (p_1, p_2, \dots, p_i) .

Les valeurs des perturbations correspondent aux paramètres influant sur le comportement statique ou dynamique du procédé sans que l'on puisse les maîtriser ou que l'on veuille les prendre en compte dans le modèle.

La description précédente restreint le problème aux bornes du système, c'est-à-dire aux entrées et sorties. Le plus souvent, une succession de phénomènes internes intervient dans la relation entre les entrées et les sorties. Ces variables internes sont souvent appelées variables d'état du procédé (x_1, x_2, \dots, x_n) .

Elles peuvent dépendre du temps (lorsqu'elles décrivent un procédé non stationnaire) ou non (lorsqu'elles représentent un procédé en régime permanent). Le choix d'un modèle donc, n'est pas une chose facile et l'étendue de sa complexité se doit d'être justifiée sur la base de l'intégration des phénomènes physico-chimiques significatifs intervenants et sa validité dépend de la capacité de prédire le fonctionnement du procédé.

I.1.2.5 Les différentes formes de modèles mathématiques :

Le modèle mathématique peut prendre différentes formes selon son niveau de description.

A. Modèle fondamental et modèle formel :

Certains des modèles résultent d'une étude théorique et d'autres sont purement empiriques (telles que des expressions d'analyse dimensionnelle ou des corrélations d'origine expérimentale). Si la totalité des équations qui constituent le modèle sont de **nature empirique**, on dira qu'il est de type **formel** (ou aveugle qui ne fournit aucune explication d'ordre phénoménologique), par contre le modèle sera qualifié de fondamental si la plupart des équations sont issues **des lois physiques** ou physico-chimiques. **Le modèle fondamental**, appelé parfois **modèle de représentation**, modèle de **connaissance** ou **modèle phénoménologique**.

B. Modèle à paramètres distribués et modèle à paramètres concentrés :

Le modèle à paramètres distribués : ses variables **varient dans le temps** et **dans l'espace** (t,x,y, z) et le modèle à **paramètres concentrés (localisés)**: ses variables varient **avec le temps**.

C. Modèle statique et modèle dynamique :

Selon que **le temps** intervient ou **non** dans un modèle, on dit que l'on a affaire à un modèle dynamique ou à un modèle statique.

Le modèle statique se réfère à un régime établi : les valeurs des variables ayant été fixées, le système a répondu en se déplaçant vers un état d'équilibre et on examine cet état sans se préoccuper de la manière dont cet état a été atteint. Au contraire on rencontrera un modèle dynamique : soit dans des opérations en discontinue (batch) où les valeurs de variables se modifient constamment au cours du temps ; soit dans des opérations continues en phase transitoire de démarrage, de changement de régime ou d'arrêt ; soit dans des opérations continues où certaines variables sont soumises à des perturbations telles que le système n'atteint jamais sa position stable.

En résumé, le modèle statique permet de décrire, pour un jeu de variables donné, la situation qui devrait s'établir plus ou moins rapidement, alors que le modèle dynamique permet la description des périodes transitoires d'approche de cet état d'équilibre.

D. Modèle déterministe et modèle probabiliste :

On admet implicitement que tous les modèles dont question ici respectent le principe du déterminisme, c'est-à-dire sous-tendent le fait qu'une **même cause aura toujours sensiblement les mêmes effets**. Il est donc impropre de parler de modèle statistique ou probabiliste puisqu'on n'imagine pas qu'il puisse exister des effets sans causes sauf à renoncer à toute stratégie de modélisation.

L'approche stochastique (se dit de phénomènes pour lesquels on ne peut formuler que des **prévisions globales, d'ordre statistique**) d'un problème peut tout fois s'avérer fort instructive. Chaque fois qu'il apparaît possible de décrire un phénomène, un comportement, une situation, en mettant en jeu des probabilités d'existence, de dépassement de seuil, de rencontre, de passage préférentiel, il est avantageux de faire, même si, en définitive, le modèle se révélera globalement déterministe, **l'approche stochastique fournissant des valeurs moyennes**.

E. Modèle analytique de connaissance et expérimentale (boîte noire et boîte grise) :

La modélisation analytique repose sur **une connaissance parfaite du modèle et une représentation mathématique adéquate**, elle permet d'établir des modèles de procédés à partir des lois fondamentales, leur structure est formée sur la base de l'analyse des processus, se déroulant dans le système.

Un modèle de type boîte noire se réduit à une description du procédé dénuée de toute processus étudiés. Ces modèles ne comportent généralement **pas de paramètres ajustables**, ou des paramètres ajustables en très petit nombre.

Dans la pratique, il est toujours souhaitable d'établir un modèle de connaissance des processus que l'on étudie. **Néanmoins, il arrive fréquemment que le processus soit trop complexe**, ou que **les phénomènes qui le régissent soient trop mal connus**, pour qu'il soit possible d'établir un modèle de connaissance suffisamment précis pour l'application considérée. On est alors amené à concevoir **des modèles purement empiriques**, fondés exclusivement sur les résultats de mesures effectuées sur le processus.

- **Les modèles “boîtes noires”** : les modèles “boîtes noires” sont construits essentiellement sur la base de mesures effectuées sur les entrées et les sorties du processus à modéliser. La modélisation consiste alors à utiliser, pour représenter les **relations** entre les **entrées et les sorties**, **des équations (algébriques, différentielles, ou récurrentes)** paramétrées, et à estimer les paramètres, à partir des mesures disponibles, de manière à obtenir la meilleure précision possible avec le plus petit nombre possible de paramètres ajustables. Nous désignerons fréquemment **l'estimation** des paramètres sous le terme *d'apprentissage*.

Le domaine de validité d'un tel modèle ne peut pas s'étendre au-delà du domaine des entrées qui est représenté dans les mesures utilisées pour l'apprentissage.

- **Les modèles “boîtes grises”** : Lorsque des **connaissances**, exprimables sous forme d'équations, sont disponibles, mais **insuffisantes** pour concevoir un modèle de connaissance satisfaisant, on peut avoir recours à une modélisation "boîte grise" (ou modélisation semi-physique) qui prend en considération à la fois les connaissances et les mesures. Une telle démarche peut concilier les avantages de l'intelligibilité d'un modèle de connaissance avec la souplesse d'un modèle comportant des paramètres ajustables.

I.1.2.6. Les étapes de la conception d'un modèle

Lors de la conception d'un modèle de connaissance, la relation entre les entrées et la (ou les) sortie(s) du modèle découlent directement de la mise en équation des phénomènes physiques (chimiques, ou autres) qui régissent le fonctionnement du processus. Une fois le modèle obtenu sous forme analytique, des approximations peuvent être faites pour simplifier son expression (par exemple "linéariser" le modèle pour passer d'un modèle non linéaire à un modèle linéaire) si une telle approximation est justifiée.

Dans le cas d'une modélisation de type “boîte noire”, la construction du modèle nécessite les trois éléments suivants :

- Une hypothèse sur l'existence d'une relation déterministe liant les entrées à la (ou aux) sortie(s). Cette relation est caractérisée par une fonction appelée *fonction de régression* (ou plus simplement *régression*). L'expression formelle supposée adéquate pour représenter cette relation est appelée *modèle -hypothèse*.
- Une séquence de mesures des entrées et de la sortie du processus.
- Un algorithme d'apprentissage.

I.1.2.7. Optimisation des procédés

L'optimisation des procédés a pour objectif d'assurer des produits de qualité, et une productivité optimale avec un coût de production bas.

I.1.2.8. Stratégie de simulation d'un processus

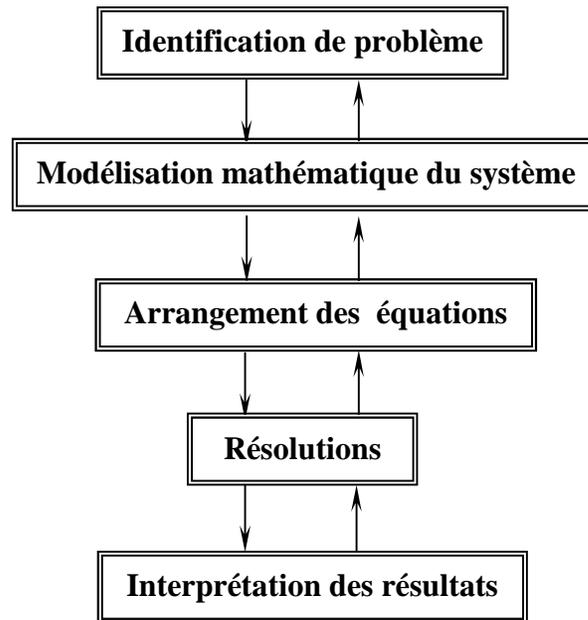


Figure 1.1 : Stratégie de simulation.

Pour établir une simulation il y a quelques étapes à suivre, premièrement on commence par un diagnostic détaillé du système, il faut l'identifier tout d'abord, connaître sa nature, son degré de complexité, ainsi tous les équations mise en jeu.

Une autre étape très importante c'est la modélisation mathématique du système, qui repose sur la formulation des équations de différents bilans et les liaisons entre eux, sans oublier les paramètres qui influent sur le système d'une manière ou autre ; pour que le modèle soit simple ou moins complexe et leur résolution doit être facile, il faut le simplifier de tel sorte que le système reste inaltérable.

L'organisation des équations du modèle en séquence logique est nécessaire pour obtenir un modèle stable, cela se fait dans un diagramme de courant qui a pour objectif la simplification et l'établissement des liaisons entre les variables de ces équations.

La résolution de l'ensemble des équations mathématiques est effectuée de façon numérique. En effet, les équations des modèles sont impossibles à résoudre analytiquement : elles sont non linéaires, différentielles, aux dérivées partielles et les variables à calculer sont couplées de manière implicite avec les variables connues. Pratiquement, on constate que les plus fortes difficultés sont liées aux modèles thermodynamiques et cinétiques.

La dernière étape c'est l'interprétation des résultats de simulation pour les valider ou les refuser, s'il les résultats sont acceptable on peut étudier le système dans divers situations.

I.1.2.9. Les avantages et les inconvénients de la simulation

A. Les avantages

La technique de simulation présente plusieurs avantages dans l'industrie, notamment dans le domaine batch et semi batch, où la production de faibles quantités nécessite un coût élevé, par exemple la production d'un médicament exige une matière première très chère. Parmi les intérêts de la simulation on cite [1] :

- **Gagner du temps** dans les phases de scale-up : passage du Laboratoire au pilote et au réacteur de production
- **Réduire les coûts** de production : optimisation des performances du réacteur en intégrant les contraintes d'exploitation (énergie, temps, récupération de solvants,...)
- **Étudier la possibilité d'utiliser un équipement** existant pour y réaliser une nouvelle synthèse
- **Réaliser des études de sûreté**: conséquences de pannes (agitation, refroidissement,...) sur le réacteur et sur l'environnement, maîtrise de l'emballage des réactions
- **Améliorer la compréhension des phénomènes** : enrichir le savoir-faire
- Pérenniser les connaissances : réutilisables
- Former les opérateurs sans risques

B. Les inconvénients

Il est évident que la simulation a **beaucoup d'avantages**, mais il y a également quelques inconvénients qu'il faut les prendre en considération, Ces inconvénients ne sont pas vraiment directement associés à la modélisation et à l'analyse des systèmes mais aux projets de simulation.

- La simulation ne peut pas donner des résultats précis quand les données d'entrée sont imprécises.
- La simulation ne peut pas apporter des réponses faciles aux problèmes complexes

I.1.2.10. Les simulateurs

A. Définition

Un simulateur est l'outil de mise en œuvre de la simulation du système avec tous les avantages et inconvénients que cela implique. En particulier un simulateur sera utilisé quand le système réel est inobservable ou difficilement observable pour toutes sortes de raisons (dimension, sécurité, coût, inexistence etc.).

B. Principe de fonctionnement

Tous les logiciels de simulation permettent la manipulation avec des **interfaces graphique** programmées contient le codage du problème, exploitent une **bibliothèque de sous-programmes** et **de base de données**.

La bibliothèque de sous-programmes se décompose en deux parties. La première contient les **méthodes de calcul des propriétés physico-chimiques des mélanges** ; elles font appel à la base de données qui rassemble les propriétés physiques des corps purs et les paramètres d'interaction caractérisant la non-idéalité des mélanges ; son contenu est essentiel pour que le logiciel soit adapté aux besoins de l'utilisateur. **La deuxième rassemble les modèles des opérations unitaires (distillation, équilibre entre phases, échangeurs de chaleur, pompe, compresseur, réacteurs** etc.).

La richesse de cette bibliothèque de modèles ou « modules » est un autre critère de comparaison entre les différents produits commerciaux.

Au moment de la résolution du problème, deux approches sont possibles ; elles définissent deux classes de logiciels. Les plus nombreux résolvent le problème séquentiellement ; les opérations unitaires, appelées « unités », sont calculées les unes après les autres selon un ordre choisi automatiquement ou imposé par l'utilisateur.

On cite quelques logiciels commerciaux destinés vers la chimie :

- **ASPEN** : commercialisé par Aspen Tech, est extrêmement complet; il possède une base de données très importante et orientée vers la chimie.
- **PRO II** : distribué par SimSci (Simulation Science Inc.), a les mêmes potentiels; il est plus orienté vers l'industrie pétrolière.
- **HYSIM, HYSYS** : distribué par Hyprotech, a la particularité d'avoir été développé spécifiquement pour micro-ordinateur, il bénéficie donc d'une interface très conviviale, il est assez orienté vers l'industrie pétrolière.
- **SPEED UP** : développé initialement par l'Imperial collège de Londres et distribué par Aspen Tech, il est adressé pour la simulation dynamique.
- **PROSIM** : développé à l'ENSIGC de Toulouse et commercialisé par Prosim S.A. : ce simulateur, moins connu que les deux premières cités, est un excellent produit.
- **BELSIM** : développé par l'Université de Liège, est distribué par Belsim S.A. et présente les mêmes caractéristiques que le précédent. Ces derniers produits font moins référence que les précédents, pourtant leurs performances sont tout à fait satisfaisantes et couvrent l'essentiel des besoins habituels.

C. Limites des logiciels généraux de simulation

Les logiciels de simulation ont la caractéristique fondamentale d'être dédiés **aux calculs de bilan de matière et enthalpique** ainsi qu'aux calculs **d'équilibre entre les phases**. Tous les aspects de **transfert de matière** ou de chaleur ne sont pas vraiment pris en compte. En dehors de quelques cas particuliers tels que les échangeurs de chaleur, les performances des appareils sont estimées à partir de valeurs fournies par l'utilisateur.

Ces logiciels ont tous la même **faiblesse**, si on prend par exemple la modélisation des réacteurs, on trouve que tous proposent des modules de réacteur **parfaitement agité** ou de réacteur piston. Ceux-ci ne sont en fait que des entités d'accueil pour y introduire tant le schéma réactionnel que le modèle cinétique. Cette limitation impose donc à l'utilisateur de se procurer son propre modèle en l'achetant spécifiquement à des fournisseurs ou en le développant lui-même.