

CAS D'ÉTUDE

Post-traitement des fumées en sortie des moteurs diesel :

Piège à NOx

Le moteur Diesel émet un taux d'oxyde d'azote NOx plus élevé que le moteur essence en raison de son principe de combustion en excès d'air. Le système étudié est le piège à NOx, dont le but est de réduire les émissions de polluants en sortie des moteurs Diesel. Les trois polluants traités ici sont le monoxyde de carbone, CO, les hydrocarbures imbrûlés, HC, et les NOx. Le piège à NOx fonctionne en deux phases : Stockage des NOx jusqu'à saturation des sites actifs puis déstockage par une montée en température. Le CO et les HC sont traités en continu par oxydation.

Pour des raisons de complexité, seul le fonctionnement de la phase de stockage est considéré dans un premier temps.



CONTEXTE et OBJECTIF

Les modèles développés pour représenter les phénomènes physico-chimiques dans les systèmes de dépollution catalytique sont des modèles cinétiques et dépendent de paramètres que, la plupart du temps, on ne peut déduire de considérations théoriques

On procède à des expériences afin de calibrer le modèle, d'où la nécessité de définir le plan d'expériences adapté. Usuellement, on a recours aux plans "optimaux", plus précisément à la D-optimalité

Problèmes :
 - La D-optimalité n'est pas adaptée pour des cas de cinétiques car elle peut conduire à des conditions expérimentales extrêmes et/ou non-pertinentes
 - Le modèle construit n'arrive pas à s'ajuster aux résultats expérimentaux

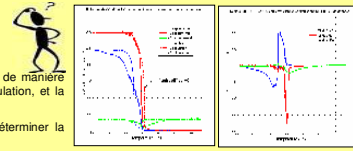
Un système cinétique a été retenu et un modèle le mettant en oeuvre a été construit,

$$y(x) = f(x, \beta)$$

où β est le vecteur des paramètres cinétiques et x correspond aux conditions d'entrées

Malgré des tentatives de calage des paramètres cinétiques, le simulateur ne représente pas la réalité expérimentale de manière adéquate. La première figure ci-contre expose les émissions des polluants obtenues expérimentalement et par simulation, et la seconde met en évidence les résidus.

L'objectif de l'expérimentateur est d'obtenir une représentation du comportement du système, et notamment de déterminer la température de "Light-off", température à laquelle 50% du polluant considéré est converti.



Objectif : Rechercher un critère de plan d'expériences adapté aux problèmes de cinétiques

L'inadéquation du modèle à représenter la réalité expérimentale, nous a conduit à utiliser le krigeage, pour corriger les écarts entre expériences et simulations. Cependant, dans ce cas, la tendance est non-linéaire. Les travaux effectués pour le moment portent essentiellement sur la mise en place et la vérification de la méthode de krigeage non-linéaire

MÉTHODE ET RÉSULTATS

Nous proposons de représenter les différences observées entre simulateur et résultats expérimentaux par un processus Gaussien. Dès lors, nous remplaçons la tendance linéaire d'un modèle de krigeage classique par le modèle initial (simulateur).

$$y(x) = f(x, \beta) + z_{\sigma^2, d}(x)$$

où $z(x)$ est un processus Gaussien, tel que $E(z_{\sigma^2, d}(x)) = 0$ et $cov(z_{\sigma^2, d}(x), z_{\sigma^2, d}(x+h)) = k(h)$

Deux difficultés :

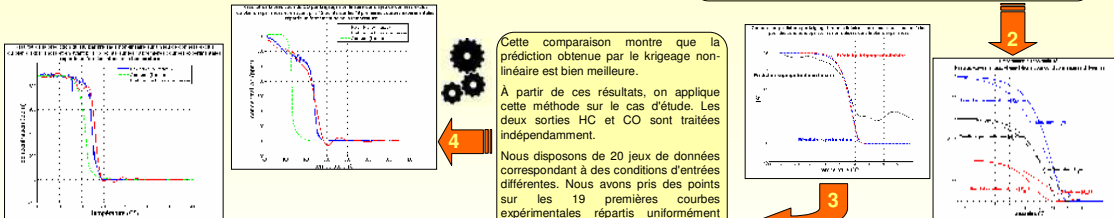
- 1 - Estimer β, σ^2, θ
- 2 - Déterminer les nouveaux points d'expériences

Afin de résoudre le premier point, nous avons remplacé la formule analytique pour l'estimation des paramètres dans le cas linéaire, par une procédure de minimisation. Le reste de l'algorithme reste inchangé. Pour traiter la seconde difficulté, nous proposons de placer les nouveaux points où la variance de prédiction est la plus forte.

Afin de tester l'extension de la théorie de krigeage à une tendance non-linéaire, nous nous sommes appuyés sur un cas de cinétique simple que nous maîtrisons.

Ce cas maîtrisé possède les mêmes caractéristiques que notre cas d'étude : un simulateur qui représente la réalité expérimentale et un système cinétique censé modéliser le premier modèle mais qui est volontairement mal choisi.

Après avoir mis au point le krigeage non-linéaire, nous l'avons comparé au krigeage tendance linéaire. La figure ci-dessous illustre la prédiction obtenue sur notre cas maîtrisé par ces deux méthodes sur des conditions opératoires non utilisées dans notre plan d'expériences



Cette comparaison montre que la prédiction obtenue par le krigeage non-linéaire est bien meilleure.

À partir de ces résultats, on applique cette méthode sur le cas d'étude. Les deux sorties HC et CO sont traitées indépendamment.

Nous disposons de 20 jeux de données correspondant à des conditions d'entrées différentes. Nous avons pris des points sur les 19 premières courbes expérimentales répartis uniformément selon la température, et réalisé la prédiction pour le dernier jeu de données.

La méthode de krigeage non-linéaire mise en place semble adaptée à ce cas de cinétique. En effet, la prédiction obtenue pour les deux sorties (courbes rouges) est proche des résultats expérimentaux (courbes bleues), malgré le fait que le simulateur soit éloigné de la réalité expérimentale (courbes vertes). De plus, la température de "Light-off" est bien déterminée.

Néanmoins, on voit apparaître des oscillations sur les deux paliers. Afin de limiter ce phénomène, il est possible de rajouter des points d'expériences sur le domaine. Pour illustrer cela, nous avons pris plus de points pour prédire HC, et on voit que ces oscillations sont moins fortes.

Une solution envisagée pour éviter ces oscillations est de conditionner le krigeage non-linéaire par la dérivée.

Notre démarche nous conduit à une formule de variance de prédiction dépendante du vecteur des paramètres cinétiques inconnus. En pratique, nous remplaçons ce vecteur par son estimation. L'intervalle de confiance correspondant est délimité par les courbes noires, et l'erreur de prédiction est représentée par la courbe rouge.

La variance de prédiction obtenue ne permet pas de décider où placer les nouveaux points.

L'approche bayésienne est la solution envisagée pour déterminer une variance de prédiction pertinente.

CONCLUSIONS et PERSPECTIVES

Améliorations : Les résultats de prédiction montrent des difficultés sur les deux paliers, on propose de **conditionner le krigeage par la dérivée**, puisque sur ces paliers on a une dérivée nulle. Enfin, il nous faut traiter le problème en **multiréponses**.

Critère de plan d'expériences : La prédiction obtenue par krigeage non-linéaire donne de bons résultats. Pour définir le critère de plan d'expériences, on envisage de :

- Calculer la variance de prédiction par une **approche bayésienne**,
- **Probabiliser l'espace des entrées**,
- Définir un autre critère.

Enfin, le plan d'expériences que l'on construira, devra être comparé à la D-optimalité et au space-filling.

RÉFÉRENCES

• J.P. Gauchi, *Plans d'Expériences Applications à l'entreprise*, Jean-Jacques Droesbeke, Jeanne Fine, Gilbert Saporta, éditeurs, Paris, Editions Technip
 • K.T. Fang, R. Li et A. Sudjianto, *Design and Modeling for computer experiments*, Chapman and Hall/CRC, 2005. Computer Science And Data Analysis Series.
 • S.N. Lophaven, H.S. Nielsen et J. Sondergaard, *Aspect of the matlab toolbox DACE*, Rapport IMM-REP-2002-13, Informatics and mathematical modelling, DTU, 2002, 44 pages.
 • T.J. Santner, B.J. Williams et W.I. Notz, *The design and analysis of computer experiments*, Springer-Verlag, 2003, New York
 • G.A.F. Seber et C.J. Wild, *Nonlinear regression*, Applied probability and statistics John Wiley & Sons, 1989, New York.