

## Planification d'expériences adaptée aux problèmes de cinétique Application à la dépollution des fumées en sortie de moteurs

Matthieu CANAUD, IFP-Lyon, BP 3, 69390 Vernaison, France  
e-mail : [matthieu.canaud@ifp.fr](mailto:matthieu.canaud@ifp.fr)

**Mots clés** : plans d'expériences, krigeage non-linéaire

Les modèles développés pour représenter les phénomènes physico-chimiques dans les systèmes de dépollution catalytique sont des modèles cinétiques et dépendent de paramètres (facteurs pré exponentiels, énergies d'activation, constantes d'adsorption, et des chaleurs d'adsorption) que, la plupart du temps, on ne peut déduire de considérations théoriques. On procède à des expériences afin de calibrer le modèle, et l'objet de ce travail est de construire le plan d'expériences correspondant.

L'application qui nous préoccupe est un système de dépollution catalytique, plus précisément de post-traitement des fumées en sortie des moteurs Diesel : le piège à NOx. L'objectif de l'expérimentateur ici est d'obtenir une représentation du comportement de ce système dans son domaine d'application. Un schéma réactionnel a été élaboré et un modèle pour le mettre en oeuvre a été construit. Cependant la confrontation aux premiers résultats expérimentaux montre son inadéquation.

Ce premier modèle est fortement non linéaire, et peut s'exprimer par  $y = f(x, \beta)$ , où  $y$  est la réponse étudiée (par exemple la teneur en hydrocarbures imbrûlés),  $x$  les conditions expérimentales et  $\beta$  les paramètres cinétiques du modèle symbolisé par la fonction  $f$ .

Nous proposons de considérer que les différences observées entre ce premier modèle et la réalité expérimentale peuvent se représenter par un processus gaussien. Dès lors,  $y = f(x, \beta) + z_{\sigma^2, \theta}(x)$ , où nous remplaçons la tendance linéaire d'un modèle de krigeage classique par le modèle initial, et où  $z_{\sigma^2, \theta}(x)$  est un processus gaussien centré de variance  $\sigma^2$  et de paramètre de portée  $\theta$ .

Néanmoins, deux difficultés se posent; la première est d'estimer les paramètres  $\beta$ ,  $\sigma^2$  et  $\theta$ , la deuxième est de déterminer les nouveaux points d'expériences. Afin de résoudre le premier point, nous avons du remplacer la formule analytique pour l'estimation des paramètres  $\beta$  dans le cas linéaire, par une procédure de minimisation. Le reste de l'algorithme reste inchangé.

Pour la seconde difficulté, nous proposons de placer les nouveaux points là où la variance de prédiction est la plus forte. Cependant, dans ce cas non linéaire, cette variance dépend de la valeur inconnue du paramètre  $\beta$ . En pratique, nous avons remplacé cette valeur par son estimation. Les simulations numériques montrent que cette procédure donne de bons résultats opérationnels, si l'estimation est proche de la valeur vraie, ce qui se justifie par une formule de Taylor.

Par la suite, le placement des nouveaux points pourra se faire à l'aide de critères plus élaborés. Les résultats confrontés nous permettront alors de choisir celui qui s'adapte le mieux au cas de cinétique.

## Références

- K.T. Fang, R. Li et A. Sudjinato. *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.