

Calcul de la viscosité des gaz polaires à pression modérée par une approche neuronale.

Abdelkader BOUZIDI^{1*}, Salah HANINI², Fatiha SOUACHI³, Brahim MOHAMMEDI¹, Maamar TOUIZA¹, Djillali IMESSAOUDENE¹

¹Centre de Recherche Nucléaire de Birine
BP 180, Aïn Oussera W. Djelfa, CP 17200, Algérie

²LBMPT Université de Médéa, CP 26000, Algérie

³ENP, El Harrach, Alger, Algérie

* (Abdelkader BOUZIDI : bouzidiaek@yahoo.fr)

Résumé- L'évaluation de la viscosité des gaz polaires purs, à pression modérée et sur une large gamme de températures, a été réalisée par une approche basée sur les réseaux de neurones artificiels. Cinq propriétés physico-chimiques combinées avec la température absolue ont été employées pour faire l'apprentissage du réseau pour 39 gaz étudiés. L'erreur maximale obtenue est d'environ 5.70%.

Nomenclature

b	Biais de neurone	W	Poids synaptique
C_i	Contribution de chaque groupement fonctionnel	T	Température, K
ER	Erreur relative	T_c	Température critique, K
ERM	Erreur relative moyenne	T_r	Température réduite, T/T_c
k	Constante de Boltzmann, ($1.380662 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$)		Symboles grecs
M	Masse molaire, g/mol		Paramètre d'énergie dans le potentiel d'interaction, Joule
n_i	Nombre de groupement fonctionnel dans une molécule organique		Viscosité, Pa.s
P_c	Pression critique, bar	μ	Moment dipolaire, D
RN	Réseau de neurones		Diamètre moléculaire,
RNA	Réseau de neurones artificiels	ν	Intégral de collision

1. Introduction

La viscosité, qui constitue un paramètre important dans l'étude de la mécanique des fluides, est désignée comme étant une des propriétés de transport parce qu'elle est liée au mouvement d'agitation des molécules. En effet, le transport moléculaire de quantité de mouvement est le corollaire des forces de cohésion du fluide [1]. La théorie cinétique des gaz a permis d'établir des formules pour le calcul de cette propriété dont l'application est certes valable, mais très astreignante parce qu'elle comporte plusieurs paramètres qui sont souvent très difficiles à rassembler, comme l'intégrale de collision (ν) et les paramètres de Lennard-Jones (σ/k et ϵ/k) [1, 2]. Dans ce contexte, nous avons proposé cette étude dont l'objectif est la mise en œuvre d'une méthode simple et pratique de calcul, basée sur les réseaux de neurones artificiels de type multicouche MLP (Multi Layer Perceptron), afin d'estimer la viscosité des gaz

polaires avec une précision acceptable et surtout en utilisant des données usuelles. Le tableau 1 regroupe quelques modèles parmi les plus importants utilisés pour l'estimation de la viscosité des gaz [2, 3].

Tableau 1 : différents modèles pour le calcul de la viscosité des gaz [2,3]

Modèles	
Chapman-Enskog	$\eta = 26.69 \times 10^{-6} \frac{\sqrt{MT}}{\sigma^2 \Omega_v} \quad (1)$
Golubev	$\eta = \begin{cases} \eta_c^* T_r^{0.965} & \text{pour } T_r < 1 \\ \eta_c^* T_r^{0.71+0.29/T_r} & \text{pour } T_r > 1 \end{cases} \quad \text{avec } \eta_c^* = \frac{3.5M^{1/2}P_c^{2/3}}{T_c^{1/6}} \quad (2, 3)$
Thodos	$\eta \xi = 4.610T_r^{0.618} - 2.04 \exp(-0.449T_r) + 1.94 \exp(-4.058T_r) + 0.1 \quad (4)$
	$\text{Avec } \xi = T_r^{1/6} M^{-1/2} P_c^{-2/3} \quad (5)$
Reichenberg	$\eta = \frac{a^* T_r}{[1 + 0.36T_r(T_r - 1)]^{1/6}} \quad \text{avec } a^* = \frac{M^{1/2}T_c}{\sum_i n_i C_i} \quad (6, 7)$

2. Procedure

2.1. Base de données

Cette étude concerne 39 gaz polaires dont le moment dipolaire est supérieur à 0.5 Debye. Après un examen exhaustif des modèles proposés dans la littérature, en particulier celui de Chapman-Enskog [1, 2, 3], nous avons pu dégager un ensemble de paramètres qui ont été utilisés comme entrées du modèle neuronal. Ces entrées, en nombre de six, sont : le poids moléculaire (M), le point d'ébullition (T_b), la température critique (T_c), la pression critique (P_c) et le moment dipolaire (μ). Ces paramètres sont combinés avec la température absolue (T) et rangés entre le point d'ébullition de chaque gaz et 1100K avec un pas d'environ 20K. La base de données ainsi collectée, à travers la bibliographie consultée [1, 2, 4], compte 2124 vecteurs dont 1593 vecteurs ont été utilisés pour faire l'apprentissage du réseau et le reste, environ le tiers, pour effectuer le test de généralisation.

2.2. Structure du réseau de neurones

Après une synthèse bibliographique sur les réseaux de neurones non bouclés (statique) à apprentissage supervisé [3, 5, 6], nous avons sélectionné pour cette étude un RNA type MLP. Il est composé d'une couche cachée de 35 neurones à fonction sigmoïde logarithmique et d'une couche de sortie comportant un neurone linéaire (voir figure 1). L'algorithme d'apprentissage utilisé est celui de Levenberg-Marquardt. Le fonctionnement du réseau de neurones est simple; à l'entrée de chaque neurone de la couche cachée, une somme pondérée des tous les inputs est effectuée et un biais est ajouté. Ensuite, la fonction de transfert calcule cette somme pour donner la sortie du neurone. Les inputs du neurone de sortie, ou les sorties de la couche cachée, subiront le même traitement pour donner la sortie globale du réseau, en l'occurrence, la viscosité, comme le montre le schéma fonctionnel de la figure 1.

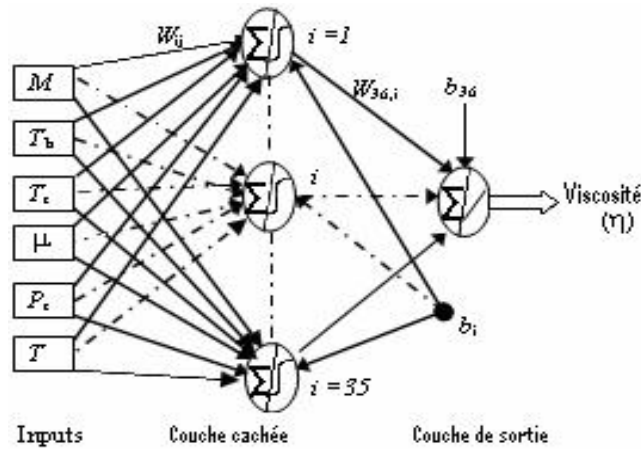


Figure 1: Schéma fonctionnel du réseau de neurones

2.3. Normalisation

Du fait que les valeurs des entrées du modèle ne sont pas du même ordre de grandeur, il est nécessaire de les normaliser avant de les utiliser dans le modèle. Ces données sont représentées sous forme de matrice de six lignes qui correspondent au nombre d'entrées (i) et d'un nombre de colonnes correspondant au nombre d'exemples disponibles (j). La normalisation se fait par colonne selon l'équation suivante :

$$x_{ij}^N (\text{normalisé}) = \frac{x_{ij}}{\sqrt{\sum_{i=1}^6 x_{ij}^2}} \quad (8)$$

où x_{ij} représente les composants, en nombre de six, d'une colonne de la matrice des entrées. Le vecteur de sortie qui comprend les viscosités désirées n'est pas normalisé du fait que la fonction de transfert attribuée au neurone de la couche de sortie est une fonction identité.

3. Résultats et analyse

3.1. Apprentissage et validation

Les figures 2 et 3 présentent les résultats obtenus lors de la phase de conception du modèle neuronal, c'est-à-dire la phase d'apprentissage et de validation. Nous remarquons que la valeur moyenne de l'erreur relative par rapport aux données utilisées ne dépasse pas les 0.4%. Le coefficient de corrélation R de la courbe de linéarisation (viscosité calculée en fonction de la viscosité désirée) est pratiquement égal à 1 (0.9999). Il est important de rappeler que la taille des matrices utilisées, pour effectuer l'apprentissage et la validation, dépasse les 2100 colonnes.

Nous remarquons également dans cette phase que le modèle neuronal reproduit parfaitement les données qui ont servi à l'apprentissage et à la validation. L'erreur commise sur l'ensemble de validation montre bien que le réseau de neurones arrive à suivre l'évolution de la viscosité entre les points d'apprentissage ce qui le met hors des domaines de sous ou de sur apprentissage. Autrement dit, le modèle interpole parfaitement.

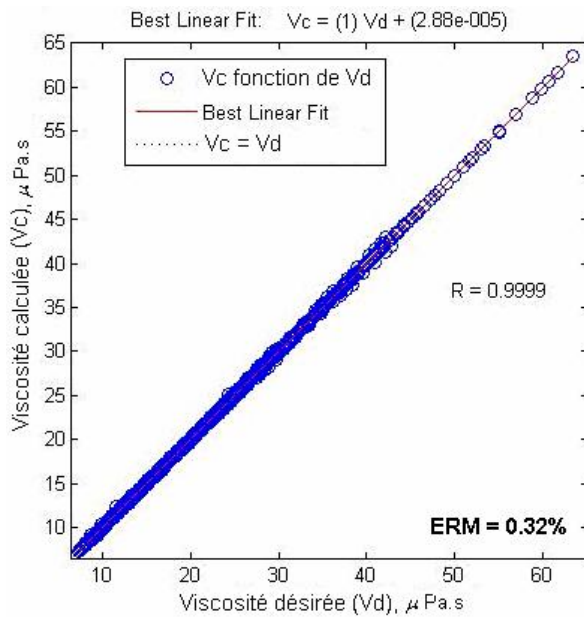


Figure 2 : Résultats de la phase d'apprentissage

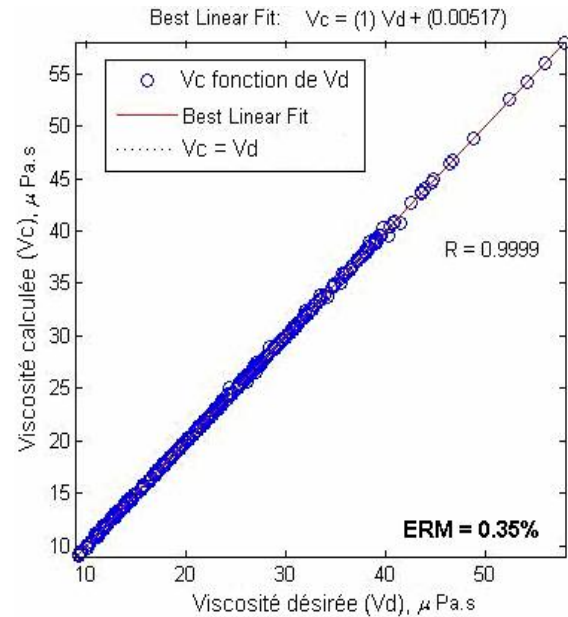


Figure 3 : Résultats de la phase de validation

3.2. Essai d'extrapolation

Nous avons effectué une série de tests consistant à évaluer la viscosité en fonction de la température par rapport au modèle de Chapman-Enskog pour des gaz pris individuellement. Nous avons choisi, parmi tous les gaz testés, de présenter deux cas : l'ammoniaque (NH_3) et le chloroforme (CHCl_3). Les figures 4 et 5 illustrent graphiquement les résultats obtenus. Nous pouvons remarquer, d'une part, que les valeurs calculées par la méthode neuronale se confondent avec celles obtenues par le modèle de Chapman-Enskog (semi empirique), et d'autre part, qu'au-delà de la zone d'apprentissage, c'est-à-dire pour des températures supérieures à 827°C (1100 K), le modèle neuronal garde toujours ses performances, et donc, extrapole correctement.

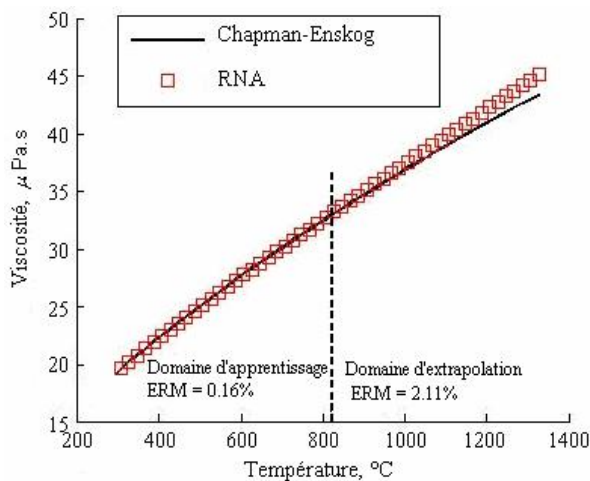


Figure 4 : Comparaison entre le RNA et le modèle de Chapman-Enskog, cas du chloroforme

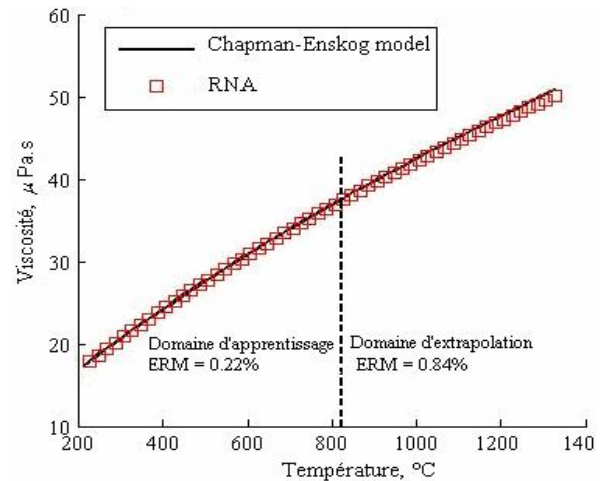


Figure 5 : Comparaison entre le RNA et le modèle de Chapman-Enskog, cas de l'ammoniaque

3.3. Comparaison

Dans le but de s'assurer des performances du réseau neuronal, nous l'avons confronté à d'autres modèles théoriques. Les résultats de cette comparaison, présentés en terme d'erreurs relatives par rapport aux valeurs expérimentales, sont regroupés dans le tableau 2 [2]. En se référant à la valeur moyenne des erreurs relatives commises par les différents modèles, nous pouvons dire que, pour cet échantillon de gaz, le RNA conçu devance nettement les modèles théoriques.

Tableau 2. Comparaison entre le RNA et des modèles théoriques par rapport aux viscosités expérimentales.

Gaz	T, K	Valeurs expérimentales ¹ , $\mu\text{Pa}\cdot\text{s}$	Erreur relative [(calc. ó exp.)/exp.]*100, %											
			Chapman-Enskog avec et /k				Thodos et al. ¹	Golubev ¹	Reichenberg ¹	RNA proposé				
			Expérimentales ¹		Estimés ¹									
			ER	ER	ER	ER	ER	ER	ER	ER				
N-propanol	398	10.4	10.42	0.2	11.10	6.7	10.58	1.7	10.94	5.2	10.48	0.8	10.39	0.14
	473	12.4	12.42	0.2	13.28	7.1	12.72	2.6	13.21	6.5	12.47	0.6	12.40	0.01
	548	14.4	14.43	0.2	15.45	7.3	14.92	3.6	15.42	7.1	14.63	1.6	14.39	0.05
Acétone	373	9.33	9.92	6.3	9.78	4.8	9.99	7.1	9.61	3.0	9.56	2.5	9.35	0.24
	423	10.8	11.35	5.1	11.17	3.4	11.38	5.4	11.33	4.9	10.85	0.5	10.66	1.32
	498	12.8	13.41	4.8	13.12	2.5	13.30	3.9	13.59	6.2	12.93	1.0	12.66	1.10
Ammoniaque	598	15.3	16.08	5.1	15.53	1.5	15.71	2.7	16.13	5.4	15.64	2.2	15.32	0.11
	273	9	9.34	3.8	9.59	6.6	9.33	3.7	9.61	6.8	-	-	9.37	4.07
	373	13.1	13.23	1.0	13.35	1.9	13.17	0.5	14.80	13	-	-	13.17	0.54
Chloroforme	673	25.1	27.23	8.5	25.80	2.8	25.55	1.8	27.86	11	-	-	24.29	3.22
	293	10	10.05	0.5	10.05	0.5	10.15	1.5	10.70	7.0	10.10	1.0	9.81	1.85
	323	11	11.15	1.4	11.06	0.5	11.00	0.0	11.80	7.3	11.04	0.4	10.98	0.16
Ethanol	373	12.5	12.86	2.9	12.75	2.0	12.73	1.8	13.50	8.0	12.58	0.6	12.86	2.85
	473	15.9	16.30	2.5	16.25	2.2	16.17	1.7	17.03	7.1	15.92	0.1	16.31	2.59
	623	20.8	20.90	0.5	21.03	1.1	20.90	0.5	22.42	7.8	21.09	1.4	20.88	0.39
Acétate d'éthyle	383	11.1	11.11	0.1	12.05	8.6	11.29	1.7	12.32	11	11.18	0.7	11.15	0.47
	423	12.3	12.31	0.1	13.35	8.5	12.41	0.9	13.65	11	12.32	0.2	12.33	0.28
	473	13.7	13.78	0.6	14.81	8.1	13.75	0.4	15.21	11	13.71	0.1	13.80	0.74
Ether éthylique	573	16.5	16.73	1.4	17.67	7.1	17.00	3.0	18.15	10	16.50	0.0	16.68	1.10
	398	10.1	10.14	0.4	10.14	0.4	10.50	4.0	10.17	0.7	10.22	1.2	10.13	0.30
	448	11.4	11.43	0.3	11.43	0.3	11.79	3.4	11.56	1.4	11.63	2.0	11.38	0.21
Isopropanol	523	13.3	13.35	0.4	13.30	0.0	13.63	2.5	13.63	2.5	13.70	3.0	13.32	0.14
	598	15.3	15.32	0.1	15.42	0.8	15.50	1.3	15.50	1.3	15.93	4.1	15.28	0.13
	398	9.91	10.02	1.1	9.92	0.1	10.33	4.2	10.10	1.9	9.98	0.7	10.02	1.12
Méthanol	448	11.2	11.28	0.7	11.26	0.5	11.58	3.4	11.33	1.2	11.21	0.1	11.24	0.39
	498	12.4	12.47	0.6	12.46	0.5	12.80	3.2	12.60	1.6	12.45	0.4	12.44	0.32
	573	14.1	14.23	0.9	14.11	0.1	14.58	3.4	14.69	4.2	14.14	0.3	14.17	0.48
Méthanol	393	10.3	10.31	0.1	10.87	5.5	10.80	4.9	10.84	5.2	10.73	4.2	10.26	0.38
	433	11.4	11.47	0.6	12.10	6.1	11.98	5.1	12.12	6.3	11.74	3.0	11.37	0.24
	493	13	13.03	0.2	13.77	5.9	13.82	6.3	13.87	6.7	13.33	2.5	13.02	0.13
Méthanol	573	15	15.15	1.0	15.78	5.2	16.29	8.6	15.81	5.4	15.36	2.4	15.15	1.00
	308	10.1	10.17	0.7	11.41	13	10.63	5.2	12.32	22	10.38	2.8	10.07	0.29
	338	11.1	11.14	0.4	12.54	13	11.57	4.2	13.54	22	11.38	2.5	11.16	0.50
Méthanol	393	12.9	12.98	0.6	14.45	12	13.17	2.1	15.74	22	13.24	2.6	13.09	1.48
	433	14.3	14.36	0.4	16.02	12	14.54	1.7	17.45	22	14.56	1.8	14.47	1.18

¹ Valeurs trouvées dans la référence [2]

	513	16.9	17.00	0.6	18.93	12	16.93	0.2	20.79	23	17.07	1.0	17.16	1.57
	593	19.5	19.64	0.7	21.65	11	19.77	1.4	23.79	22	19.60	0.5	19.78	1.43
Chlorométhane	293	10.6	10.65	0.5	10.97	3.5	10.61	0.1	10.62	0.2	11.03	4.1	10.75	1.38
	323	11.9	12.15	2.1	12.13	1.9	12.15	2.1	12.21	2.6	12.11	1.8	11.85	0.41
	353	12.9	12.94	0.3	13.39	3.8	13.00	0.8	13.09	1.5	13.27	2.9	12.99	0.73
	403	14.7	14.71	0.1	15.32	4.2	14.92	1.5	15.01	2.1	15.01	2.1	14.92	1.51
ERM, %				1.41		4.75		2.78		7.97		1.55		0.89

4. Conclusion

La méthode neuronale, adoptée pour le calcul de la viscosité dynamique des gaz polaires à pression modérée, s'avère efficace. En effet, les différents tests, effectués sur le modèle neuronal conçu, ont permis de mettre en évidence une bonne concordance des valeurs expérimentales aux valeurs calculées au vu des erreurs commises amplement acceptables. L'étude comparative, effectuée entre ce dernier et les modèles proposés dans la littérature, a également appuyé cette constatation. En plus, l'avantage de cette méthode est de simplifier la détermination de la viscosité avec une erreur acceptable et pour un domaine de température assez large. Contrairement aux autres modèles, cette approche utilise dans son calcul des données usuelles (T , M , T_b , T_c , P_c et ...) souvent disponibles dans la littérature.

Références

- [1] A. Gosse, A. Déroulède, et C. Dutheil, Propriétés de transport des gaz à pression modérée; Viscosité, Conductivité thermique, Coefficient de diffusion, Données thermodynamiques des fluides, Banques et bases de données en thermodynamique, Technique de l'ingénieur, (Paris, 1991), K425(1-17), K530(1-17), K535(122).
- [2] R.C. Reid, J.M. Prausnitz et T.K. Sherwood, The properties of gases and liquids, McGraw-Hill Book Company, USA, (1977).
- [3] Bouzidi, S. Hanini, F. Souahi, B. Mohammedi, M. Touiza, Viscosity Calculation at Moderate Pressure for Nonpolar Gases via Neural Network, ANSI, journal of Applied Sciences, Vol. 7, No. 17, pp. 2450-2455, (2007).
- [4] Division scientifique de L'AIR LIQUIDE, Encyclopédie des Gaz, Elsevier, (Netherlands, 1976).
- [5] G. Dreyfus et co., Réseaux de neurones Méthodologie et applications, Editions Eyrolles, (2002), Paris.
- [6] C. Si-Moussa, S. Hanini, R. Derriche, M. Bouhedda, A. Bouzidi, Prediction of High-Pressure Vapour Liquid Equilibrium of Six Binary Systems, Carbon Dioxide with Six Esters, Using An Artificial Neural Network Model, Brazilian Journal of Chemical Engineering (BJChE), Vol. 25, No. 01, pp. 1-17, January ó March, (2008).