République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

UNIVERSITE DE MEDEA

Faculté des Sciences et de la Technologie

Département de Génie des Procédés et Environnement

Mémoire de Fin d'Etudes pour l'obtention du diplôme de Master en
Génie des Procédés

Spécialité : **Procédés Pharmaceutiques**

THEME

Estimation de la viscosité des gaz et des liquides par les réseaux de neurones artificiels

Dirigé par :
M^elle^ KHAOUANE Latifa

Co-Dirigé par :
Pr. HANINI Salah

Etudié par :
M^elle^ BOUREKBA Souraya.
M^elle^ RAHOUI Nawel.

2012 - 2013

Remerciement

*Nous remercions tout d'abord, **ALLAH DJELLA WA ALA** de nous avoir donné la santé, le courage et la volonté durant de notre travail pour terminer ce travail.*

Nous remercions vivement notre promotrice M^elle KHAOUANE Latifa, Enseignante à L'UM, qui nous a extrêmement aidé et encouragé tout au long de ce travail. Nous lui devons les remerciements les plus sincères.

Nous tenant à exprimer nos plus vif remerciements a notre Co-rapporteur Pr. HANINI Salah, Professeur à l'UM, pour son aide, son accompagnent et ses éclairage technique.

Nous remercions tous les enseignants de l'UM qui nous ont guidés tout au long de notre vie universitaire.

A tous nos collègues et amies qui nous ont soutenu et encouragé pour terminer ce travail et à toute la promotion Master 2012-2013.

Dédicace

Tout d'abord, je rends un grand hommage à mon père et je pris ALLAH le tout puissant de l'accepter dans son vaste paradis.

Je dédie ce modeste travail, A la lumière de ma vie et l'espoir de mon existence ma mère.

A mon cher frère : MOHAMED.

A ma meilleure amie et binôme que j'ai passé avec elle Les meilleurs temps : SOURAYA.

A ma sœur de cœur : MERIEM.

Mes cousines et cousins et toute ma famille.

Á toutes mes amies surtout M. Hiba, H. Asmaa, B. Aicha.

A tous les professeurs qui m'ont formé.

Á Toutes la promotion de génie des procédés pharmaceutique «LMD»2012-2013.

NAWEL

Sommaire…….……I
Abréviation……..……..……..……IV
Nomenclature…….……..……..……V
Liste des tableaux……..……..……..……....VII
Liste des figures……..……..……..VIII
Introduction générale ……...1

Chapitre I: Les réseaux de neurones artificiels

I.1.Introduction……..……...3
I.2. Historique……...……3
I.3. Neurone biologique……6
I.4. Réseaux de neurones artificiels…….……7
I.5. Neurone formel……..7
I.5.1. Entrées "xi"……8
I.5.2. Poids synaptiques "w_i" ……...…….……...8
I.5.3. Seuil "θ"……8
I.5.4. Fonction d'activation "F"……9
I.5.4.1. Fonction binaire a seuil…….....9
I.5.4.2. Fonction identité……...10
I.5.4.3. Fonction linéaire à seuil……...10
I.5.4.4. Fonction non linéaire……...10
I.4.4.5. Fonction gaussienne…….…11
I.5.5. Sortie du neurone "S"……..……12
I.6. Étude comparative……...12
I.7. Architecture et connexionnisme des réseaux de neurones……...13
I.7.1. Réseau de neurones non bouclés……...13
I.7.1.1. Perceptron…….……..14
I.7.1.2. Perceptron multicouche (MLP)……..14
I.7.1.3. Réseaux RBF (Radial Basis Function)……...15
I.7.2. Réseaux de neurones bouclés……16
I.8. Apprentissage……...17
I.8.1. Apprentissage supervisé……17
I.8.2. Apprentissage non supervisé……18
I.9. Conclusion ……..19

Chapitre II : La viscosité des gaz et des liquides

II.1. Introduction……20
II.2. Généralité……20
II.3. Définitions des unités de la viscosité……20
II.4. Classification des fluides……21
II.4.1. Les fluides newtoniens……21
II.4.2. Les fluides non-newtoniens……22
II.5. Les flux laminaires et turbulents……27
II.6. Théories de propriétés de transport de gaz ……27
II.7. Théorie Cinétique Élémentaire ……28
II.8. Effet des forces intermoléculaires ……29
II.9. Aspect théorique et modèles proposés……30
II.9.1. viscosité des gaz……30
II.9.1.1. Méthode de Chung, et autres……31
II.9.1.2. Méthode d'état de correspondance……32
II.9.1.3. Méthode de Reichenberg……33
II.9.2. viscosité des liquides……33
II.9.2.1. Méthode d'Orrick et d'Erbar……34
II.9.2.2. Méthode de Sastri-Rao……34
II.9.2.3. Méthode de Przezdziecki et de Sridhar……35
II.10. Conclusion……36

Chapitre III : Modélisation neuronale de la viscosité des gaz

III.1. Introduction……37
III.2. Méthodologie de calcul……37
III.2.1. Elaboration de la base des données……37
III.2.1.1. Choix des entrées et de sortie……38
III.2.1.2. Collecte des données……39
III.2.1.3. Mise en forme des données……41
III.2.1.4. Normalisation de la base des données……41

III.2.2. Conception et optimisation……41
III.2.3. Evaluation de la performance du réseau de neurone..……42
III.3. Structure du RNSO obtenu……...….42
III.4. Comparaison entre le modèle neuronale et les modèles théoriques…… 45
III.5. Analyse de sensibilité……46
III.6. Conclusion……..**.....**51

Chapitre IV : Modélisation neuronale de la viscosité des liquides

IV.1. Introduction……...52
IV.2. Méthodologie de calcul……52
IV.2.1. Elaboration de la base des données……..52
IV.2.1.1. Choix des entrées et de sortie……...54
IV.2.1.2. Collecte des données……....55
IV.2.1.3. Mise en forme des données…….……57
IV.2.1.4. Normalisation de la base des données……..57
IV.2.2. Conception et optimisation……..57
IV.2.3. Evaluation de la performance du réseau de neurone..……58
IV.3. Structure du RNSO obtenu……....58
IV.4. Comparaison entre le modèle neuronale et les modèles théoriques……..61
IV.5. Analyse de sensibilité……**.....**62
IV.6. Conclusion……68

Conclusion général et perspectives…….……69

Références bibliographiques…….....……...71

Chapitre I. Les réseaux de neurones artificiels

Figure I.1. Neurone biologique……..……..6
Figure 1.2. Neurone formel…….8
Figure I.3. Neurone formel modèle étendu…….9
Figure I.4. Fonction binaire à seuil……..9
Figure 1.5. Fonction identité……...…….……..10
Figure 1.6. Fonction linéaire à seuil……..…….10
Figure 1.7. Fonction sigmoïde exponentielle……....11
Figure 1.8. Fonction sigmoïde tangentielle……...11
Figure 1.9. Fonction gaussienne…….....12
Figure I.10. Comparaison entre un neurone biologique et un neurone formel.....13
Figure I.11. Réseau multicouche non bouclé classique……14
Figure I.12. Principe d'un perceptron..……..15
Figure I.13. Réseau Radial Basis Function (RBF)……16
Figure I.14. Le RN bouclé à deux entrées contenant une boucle ente les neurones (1) et (2)…..….16
Figure I.15. Illustration de l'apprentissage supervisé……....17
Figure I.16. Illustration de l'apprentissage non supervisé…….....18

Chapitre II. Viscosité des gaz et des liquides

Figure II.1. Le comportement d'un fluide newtonien……...…….22
Figure II.2. Le comportement d'un fluide pseudoplastiques…….23
Figure II.3. Le comportement d'un fluide dilatant……...….24
Figure II.4. Le comportement d'un fluide plastique……..….24
Figure II.5. Le comportement d'un fluide thixotropie…….……25
Figure II.6. Le comportement d'un fluide rhéopexie……26

Chapitre III. Modélisation neuronale de la viscosité des gaz

Figure III.1. Schéma simplifié de l'architecture du RNSO……..…42
Figure III.2. Validation des valeurs calculées avec les valeurs expérimentales……...……44
Figure III.3. Classement des modèles selon les erreurs……45
Figure III.4. Organigramme de calcule l'analyse de sensibilité……...47
Figure III.5. Influence des entrées sur la viscosité…….……..48
Figure III.6. Influence de chaque entrée sur la viscosité……..50

Chapitre IV. Modélisation neuronale de la viscosité des liquides

Figure IV.1. Schéma simplifié de l'architecture du RNSO……..58

Figure IV.2. Validation des valeurs calculées avec les valeurs expérimentales…….....60

Figure IV.3. Classement des modèles selon les erreurs……...……61

Figure IV.4. Organigramme de calcule l'analyse de sensibilité……63

Figure IV.5. Influence des entrées sur la viscosité……....64

Figure IV.6. Influence de chaque entrée sur la viscosité……...67

Chapitre III. Modélisation neuronale de la viscosité des gaz

Tableau III.1. Liste des composés utilisés dans cette étude…….38

Tableau III.2. Liste des paramètres des entrées et de sortie……...39

Tableau III.3. Liste des minimums et maximums des paramètres choisis……...39

Tableau III.4. Liste des données d'entrée utilisée dans cette étude…….40

Tableau III.5. Structure des RNSO utilisés dans la modélisation de la viscosité…….……42

Tableau III.6.Récapitule les performances du RNSO obtenu en termes de la REQM, ERAM, R^2 .45

Tableau III.7. Poids de connexion entrée-cachée, cachée-sortie……..46

Tableau III.8. Importance individuelle…….47

Tableau III.9. Importance relative……47

Chapitre IV. Modélisation neuronale de la viscosité des liquides

Tableau IV.1. Liste des composés utilisés dans cette étude……..53

Tableau IV.2. Liste des paramètres des entrées et de sortie…..……54

Tableau IV.3. Liste des minimums et maximums des paramètres choisis……54

Tableau IV.4. Liste des données d'entrée utilisée dans cette étude……..55

Tableau IV.5. Structure des RNSO utilisés dans la modélisation de la viscosité……..…58

Tableau IV.6.Récapitule les performances du RNSO obtenu en termes de la REQM, ERAM, R^2.61

Tableau IV.7. Poids de connexion entrée-cachée, cachée-sortie…….……62

Tableau IV.8. Importance individuelle…….63

Tableau IV.9. Importance relative……63

ERAM	**E**rreur **R**elative **A**bsolue **M**oyenne
FA	**F**onction d'**A**ctivation
MLP	**M**ulti-**L**ayer **P**receptron
RBF	**R**adial **B**asis **F**unction
REQM	**R**acine de l'**E**rreur **Q**uadratique **M**oyenne
RN	**R**éseaux de **N**eurones
RNA	**R**éseaux de **N**eurones **A**rtificiels
RNSO	**R**éseaux de **N**eurones **S**tatique **O**ptimal

ملخص: ***تقدير لزوجة الغازات والسوائل بواسطة شبكات الخلايا العصبونية الاصطناعية***

تهدف هذه الدراسة إلى وضع تقنية ترتكز على شبكات الخلايا العصبونية الاصطناعية متعددة الطبقات (MLP) لتقدير لزوجة الغازات و السوائل.

في هذا الإطار تم تصميم نموذجين عصبيين : الأول لحساب لزوجة الغازات (5-[10]-1: ERAM= 0.16%) و الثاني لحساب لزوجة السوائل (6-[19]-1: ERAM=0.22%). و في الأخير قمنا بمقارنة بين النموذج العصبي والنماذج الأخرى المنشورة في بحوث علمية . وقد أثبتت هذه الدراسة مدى دقة و نجاعة النماذج العصبونية المنجزة لحساب لزوجة الغازات.

الكلمات المفتاحية: نمذجة، شبكات الخلايا العصبونية الاصطناعية، لزوجة ، السوائل، الغازات.

Résumé : ***Estimation de la viscosité des gaz et des liquides par les réseaux de neurones artificiels***

Le but de cette étude est la mise en œuvre d'une technique basée sur les réseaux de neurones artificiels de type perceptron multicouches (MLP), pour l'estimation de la viscosité des gaz et des liquides.

Dans ce contexte, nous avons développé deux modèles neuronaux : le premier destiné au calcul de la viscosité des gaz (5-[10]-1 : ERAM = 0.16%) et le second pour le calcul de la viscosité des liquides (6-[19]-1 : ERAM = 0.22%). En fin, nous avons effectué une étude comparative entre les modèles neuronaux et les modèles proposés dans la littérature.

Cette étude a révélé la précision et l'efficacité des modèles neuronaux conçus et optimisés pour la prédiction de la viscosité des gaz.

***Mot clés* :** Modélisation, Réseaux de neurones artificiels, Viscosité, Liquides, Gaz.

Abstract: ***Estimation of the viscosity of gases and liquids by using artificial neural networks***

The goal of this study is the implementation of a technique based on the artificial neural networks type multi-layer perceptron (MLP), for the estimation of the viscosity of gases and liquids.

In this context, we developed two neuronal models: the first intended for calculation of the viscosity of gases (5-[10]-1: ERAM = 0.16%) and the second for the calculation of the viscosity of liquids (6-[19]-1: ERAM = 0.22%). In end, we carried out a comparative study between the neuronal models and the models suggested in the literature. This study revealed the precision and the effectiveness of the neuronal models designed and optimized for the prediction of the viscosity of gases.

Keywords: Modeling, Artificial Neural Networks, Viscosity, Liquids, Gas.

La viscosité est désignée comme une propriété de transport parce qu'elle est liée au mouvement d'agitation des molécules. Les transports moléculaires de quantité de mouvement, d'énergie et d'espèce chimique sont les corollaires des forces de cohésion du fluide.

La détermination (ou le calcul) de la viscosité de meure une nécessité capitale pour la recherche scientifique et l'industrie. Les procédures expérimentales, empiriques et semi empiriques sont très délicates et coûteuses et prennent beaucoup temps elles ne se font que dans des laboratoires spécialisés. En revanche les approches théoriques, relativement accessibles, sont de plus en plus sollicitées pour l'estimation de ces propriétés de transport des gaz et des liquides d'une manière simple et à moindre coût. Mais la complexité et la nature de l'écoulement des gaz et des liquides n'ont fait qu'augmenter le défi.

L'objectif du présent mémoire est de développer une nouvelle approche basée sur les réseaux de neurones pour le calcul de la viscosité des gaz et des liquides. Cette approche inspirée du traitement de l'information effectué par le cerveau, semble offrir un nouvel espace de modélisation tout à fait original. En effet, les réseaux de neurones artificiels (RNA) suscitent toujours un vif intérêt dans la plupart des domaines d'ingénierie non seulement pour leur attirante capacité d'apprentissage mais aussi pour leur flexibilité et leur bonne performance, par rapport aux approches classiques. Les RNA sont capables d'approximer des relations complexes et fortement non linéaires entre un vecteur de variables d'entrées x et une sortie y.

Le présent mémoire est organisé en quatre chapitres :

Le premier chapitre est consacré exclusivement à la présentation des réseaux de neurones d'une façon générale : historique, inspiration biologique, neurone formel, réseaux multicouches et règles d'apprentissage. Nous avons, bien entendu, mis l'accent sur les réseaux non bouclés type MLP (Multi-Layer Preceptron) du fait qu'ils sont utilisés dans les modélisations statiques.

Le deuxième chapitre est usité à une présentation de la viscosité des gaz et des liquides. Une synthèse bibliographique nous a permis de définir la viscosité, de donner leur fondement théorique et de présenter les principaux travaux consacrés à leur détermination.

Quant au troisième et quatrième chapitre, on y présente la modélisation de la viscosité des gaz et des liquides par une technique basée sur les réseaux de neurones multicouches. Un descriptif détaillé de la procédure est présenté au début du chapitre. En fin on donne une comparaison entre les réseaux de neurones (RN) optimaux obtenu avec les modèles classiques dans le but de mesurer leurs performances.

Nous terminerons ce document par une conclusion générale et des perspectives.

I.1. Introduction

Le rêve de créer une machine dotée d'une forme d'intelligence est présent depuis fort longtemps dans l'imagination humaine. Comment l'homme fait-il pour penser, raisonner ou même éprouver des sentiments ? Toutes ces questions ont conduit les chercheurs à l'étude des réseaux de neurones.

Un réseau de neurone artificiel est un modèle de calcul dont la conception est très schématiquement inspiré du fonctionnement de vrais neurones humains. Les réseaux de neurones sont considérés par certains comme un outil statistiques et par d'autres comme une technique d'intelligence artificielle; ils permettent de traiter des problèmes, jadis qualifiés des complexes, en s'appuyant d'avantage sur la perception que sur le raisonnement logique formel (www.wikipedia.org/wiki/R%C3%A9seau_de_neuroneshttp.2007; Corriou 1995; www.techno-science.net/?onglet=articles&article=12 http 2004).

Il faut en réalité distinguer deux types de réseaux neuroniques. D'une part, il y a ceux qui sont censés fournir un modèle idéalisé permettant d'étudier le fonctionnement et les propriétés des systèmes nerveux biologiques. D'autre part, il y a les réseaux qui sont des systèmes de traitement dont le but est de réaliser certaines taches technologiques bien précises (Touzet 1992; Kamp & Hasler 1990; www.wcours.gel.ulaval.ca/2007/a/21410/default/5notes/titre. pdf http 2004). C'est à ce dernier type de réseaux qu'on s'intéressera dans ce chapitre. Nous aborderons les principales architectures des réseaux que l'on retrouve dans la littérature. Il ne s'agit pas de les étudier toutes, car elles sont trop nombreuses, mais plutôt d'en comprendre les mécanismes internes fondamentaux et de savoir comment et quant les utiliser en particulier pour la modélisation statique de type boite noire.

I.2. Historique

Deux ingrédients sont à la base de tout avancement des connaissances. Premièrement, il importe de posséder un nouveau concept, ou un nouveau point de vue à propos d'un sujet, qui vient jeter une lumière là où il n'y avait qu'obscurité. Deuxièmement, il importe aussi de posséder des outils technologiques permettant de construire des systèmes concrets. L'histoire des réseaux de neurones est donc tissée à travers des découvertes conceptuelles et des développements technologiques survenus à diverses époques.

Les premières recherches remontent à la fin du 19 et au début du $20^{ème}$ siècle. Ils consistent en divers travaux en physique, en psychologie et en neurophysiologie par des scientifiques tels que

Hermann Von Helmholtz, Ernst Mach et Ivan Pavlov (Touzet 1992; www.wcours.gel.ulaval.ca/ 2007/a/21410/default/5notes/titre.pdf http 2004). A cette époque, il s'agissait de théories plutôt

générales sans modèle mathématique précis d'un neurone. On s'entend pour dire que la naissance du domaine des réseaux de neurones artificiels remonte aux années 1940 avec les travaux de Warren McCulloch et Walter Pitts.

1. **Le début** (www.wikipedia.org/wiki/R%C3%A9seau_de_neuroneshttp 2007; www.techno-science.net/?onglet=articles&article=12 http 2004; Touzet 1992; Kamp & Hasler 1990; www.wcours.gel.ulaval.ca/2007/a/21410/default/5notes/titre.pdf http 2004).
   - **1943 :** W. McCulloch et W. Pitts laissent leurs noms à une modélisation du neurone biologique (un neurone au comportement binaire). Ceux sont les premiers à montrer que des réseaux de neurones formels simples peuvent réaliser des fonctions logiques, arithmétiques et symboliques complexes (tout au moins au niveau théorique).
   - **1949 :** D. Hebb, physiologiste américain, a proposé une théorie fondamentale pour l'apprentissage. La règle qu'il propose connue sous le nom de règle de Hebb, est presque partout présente dans les modèles actuels, même les plus sophistiqués.
2. **Les premiers succès** (www.wikipedia.org/wiki/R%C3%A9seau_de_neuroneshttp 2007;Touzet 1992; Kamp & Hasler 1990; www.wcours.gel.ulaval.ca/2007/a/21410/default/5notes/titre.pdf http 2004).
   - **1954 :** F. Rosenblatt développe le modèle du perceptron. Il construit le premier neuro-ordinateur basé sur ce modèle et l'applique au domaine de la reconnaissance de formes.
   - **1960 :** B. Windrow, un automaticien, développe le modèle Adaline (Adaptative Linear Element). Dans sa structure, le modèle ressemble au perceptron, cependant la loi d'apprentissage est différente. Celle-ci est à l'origine de l'algorithme de rétropropagation du gradient très utilisé aujourd'hui avec les perceptrons multicouches.
   - **1969 :** M. Minsky et S. Papert publient un ouvrage qui met en exergue les limitations théoriques du perceptron. Limitations alors connues, notamment concernant l'impossibilité de traiter par ce modèle des problèmes non linéaires. Ils étendent implicitement ces limitations à tous les modèles de réseaux de neurones artificiels. Leur objectif est atteint, il y a abandon financier des recherches dans le domaine (surtout aux USA), d'autant plus qu'on ne disposait pas à l'époque d'ordinateurs suffisamment puissants pour effectuer des calculs complexes.
3. **L'ombre** (Touzet 1992; Kamp & Hasler 1990; www.wcours.gel.ulaval. ca/2007/a/21410/ default /5notes/titre. pdf http 2004).

- **1967-1982 :** Toutes les recherches ne sont, bien sur, pas interrompues. Elles se poursuivent, mais déguisées, sous le couvert de divers domaines comme : le traitement adaptatif du signal, la reconnaissance de formes, la modélisation en neurobiologie, etc. De grands noms travaillent durant cette période telle que S. Grossberg, T. Kohonen, J. Anderson…etc.

4. **Le renouveau (**www.wikipedia.org/wiki/R%C3%A9seau_de_neuroneshttp 2007; Touzet 1992).
   - **1982 :** JJ. Hopfield est un physicien reconnu à qui l'on doit le renouveau d'intérêt pour les réseaux de neurones. A cela plusieurs raisons : Au travers d'un article court, clair et bien écrit, il présente une théorie du fonctionnement et des possibilités des réseaux de neurones. Il faut remarquer la présentation non-conformiste de son article. Alors que les auteurs s'acharnent jusqu'alors à proposer une structure et une loi d'apprentissage, puis à étudier les propriétés émergentes ; J.J. Hopfield fixe préalablement le comportement à atteindre pour son modèle et construit à partir de là, la structure et la loi d'apprentissage correspondant au résultat espéré. Ce modèle est aujourd'hui encore très utilisé pour des problèmes d'optimisation. D'autre part, entre les mains de ce physicien distingué, la théorie des réseaux de neurones devient respectable. Elle n'est plus réservée exclusivement à un certain nombre de psychologues et neurobiologistes dépassés. Enfin, une petite phrase, placée en commentaire dans son article initial, met en avant l'isomorphisme de son modèle avec le modèle d'Ising (magnétisme). Cette idée va drainer un flot de physiciens vers les réseaux de neurones artificiels. Notons qu'à cette date, l'intelligence artificielle est l'objet d'une certaine déception, elle n'a pas répondue à toutes les attentes et s'est même heurtée à de sérieuses limitations. Malgré que les limitations du perceptron mises en avant par M. Minsky ne soient pas levées par le modèle de Hopfield, les recherches sont relancées.

5. **La levée des limitations (**www.wikipedia.org/wiki/R%C3%A9seau_de_neuroneshttp 2007**;** Touzet 1992; www.wcours.gel.ulaval.ca/2007/a/21410/default/5notes/titre.pdf http 2004).
   - **1983 :** La machine de Boltzman est le premier modèle connu capable de traiter de manière satisfaisante les limitations recensées dans le cas du perceptron. Mais l'utilisation pratique s'avère difficile car la convergence de l'algorithme est extrêmement longue (les temps de calcul sont considérables).
   - **1985 :** La rétropropagation du gradient apparaît. C'est un algorithme d'apprentissage adapté aux réseaux de neurones multicouches (aussi appelés perceptrons multicouches). Sa découverte a été réalisée par trois groupes de chercheurs indépendants. Dés cette découverte, nous avons eu la possibilité de réaliser une fonction non linéaire

d'entrée/sortie sur un réseau en décomposant cette fonction en une suite d'étapes linéairement séparables. Depuis ce temps, le domaine des réseaux de neurones artificiels

- bouillonne constamment de nouvelles théories, de nouvelles structures et de nouveaux algorithmes, qui trouvent leurs applications dans divers domaines que nous citerons ultérieurement. Cependant, les réseaux multicouches et la rétropropagation du gradient reste le modèle le plus étudié et le plus productif au niveau des applications. Nous lui avons consacré la plus grande partie de ce chapitre.

I.3. Neurone biologique

Les neurones sont les cellules nerveuses constituant le système nerveux. Chez l'être humain, on en compte environ cent milliards 10^{11}, ce qui correspond à environ 10^{15} connexions (www.techno-science.net/?onglet=articles&article=12 http 2004).

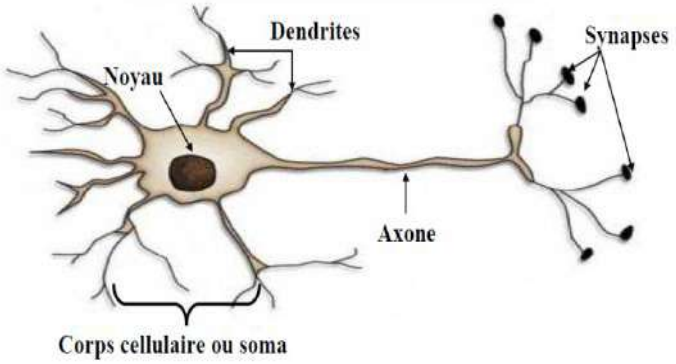


Figure I.1. Neurone biologique (Bouzidi 2006).

Un neurone biologique est composé de trois parties essentielles :

- Le corps cellulaire effectue les transformations biochimiques nécessaires à la vie du neurone.
- Les dendrites forment une arborescence autour du corps cellulaire et permettent au neurone de capter les signaux qui parviennent de l'extérieur.
- L'axone est une fibre nerveuse qui transporte les signaux émis par le neurone, il se ramifie en extrémité là où il communique avec les autres neurones à travers des synapses**.**

L'influx nerveux se propage toujours de la dendrite vers le corps cellulaire et de celui-ci vers l'axone. Chaque neurone reçoit des signaux excitateurs ou inhibiteurs par ses dendrites. Ces signaux pondérés sont combinés dans le corps cellulaire. Le potentiel résultant est comparé au seuil interne, s'il est supérieur à celui ci, le neurone provoque l'émission dans l'axone d'un train d'impulsions vers les synapses, dans le cas contraire il reste inactif.

I.4. Réseaux de neurones artificiels

Un réseau de neurones artificiels est un processeur parallèle de traitement d'informations distribuées, qui présente une propension naturelle à la mémorisation et à l'exploitation de connaissances relatives à l'environnement dans lequel il est immergé, connaissances acquises à partir de l'expérience. Sa structure repose sur une interconnexion massive de cellules élémentaires de traitement d'information, appelées neurones formels.

C'est en 1943 que le premier modèle de neurone formel est proposé par W.S. McCulloch et W. Pitts (Mcculloch & Pitts 1943). Il s'inspire du neurone biologique : il possède un certain nombre d'entrées, similaires aux dendrites du neurone biologique, un corps servant d'unité de traitement, et un axone permettant la transmission d'un potentiel d'action à d'autres neurones.

L'analogie entre un réseau de neurones formels et le cerveau est suscitée par deux remarques (Haykin 1994):

- Un réseau de neurones artificiels acquiert la connaissance de son environnement par l'intermédiaire d'un apprentissage qui "simule" la plasticité du cerveau. En cours d'apprentissage, le réseau peut être amené à modifier sa structure en créant ou supprimant des neurones ou des liaisons entre neurones.
- La connaissance acquise par un réseau de neurones est encodée par les forces ou intensités évolutives des connexions établies entre neurones formels. Les forces des connexions liant les neurones réfèrent aux valeurs des poids ou coefficients synaptiques qui définissent les paramètres du modèle interne du réseau.

I.5. Neurone formel

Un neurone formel ou artificiel, aussi fréquemment appelé neurone de McCulloch et Pitts, est la représentation mathématique simplifié d'un neurone biologique. Un neurone possède des entrées qui peuvent être les sorties d'autres neurones, ou des entrées de signaux extérieures, et une sortie. La valeur de la somme des entrées, pondérées par des coefficients (dits poids de connexions ou poids synaptiques) et du calcul d'une fonction non linéaire (dite fonction d'activation) de cette somme pondérée. Le résultat obtenu provoque ou non le déclenchement d'un potentiel d'action suivant le dépassement d'un seuil, et sert à son tour d'entrée à d'autres neurones (Figure I.2).Un neurone formel peut être défini par les cinq éléments suivants (Davalo & Naïm 1993; Jodouin 1994):

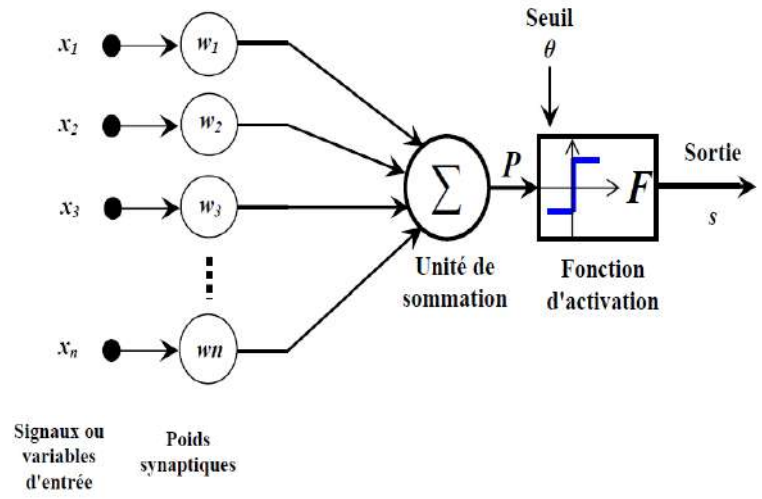


Figure I.2. Neurone formel (Hassani 2003).

I.5.1. Entrées "x_i"

Typiquement, les valeurs d'entrée sont des stimuli externes en provenance de l'environnement ou des sorties d'autres neurones artificiels. Elles peuvent être discrétisées grâce à un ensemble tel que {0,1} ou bien être des valeurs réelles.

I.5.2. Poids synaptiques "w_i"

La première chose que fait un neurone formel est de calculer la somme pondérée de ses entrées :

$$P = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i \qquad \textbf{I.1}$$

Les poids sont des valeurs réelles qui déterminent la contribution de chaque entrée. Un algorithme d'apprentissage permet de déterminer le meilleur ensemble de poids pour le problème considéré. Trouver l'ensemble optimal est souvent un compromis entre temps de calcul, minimisation de l'erreur et conservation de la capacité de généralisation pour le réseau.

I.5.3. Seuil "θ"

Le seuil est un nombre réel qui est soustrait de la somme pondérée des valeurs d'entrée. Pour des raisons de simplicité, le seuil peut être vu comme une entrée supplémentaire associée à un poids, où w_0=θ et $x_0 = -1$, tel qu'il est illustré par la figure suivante :

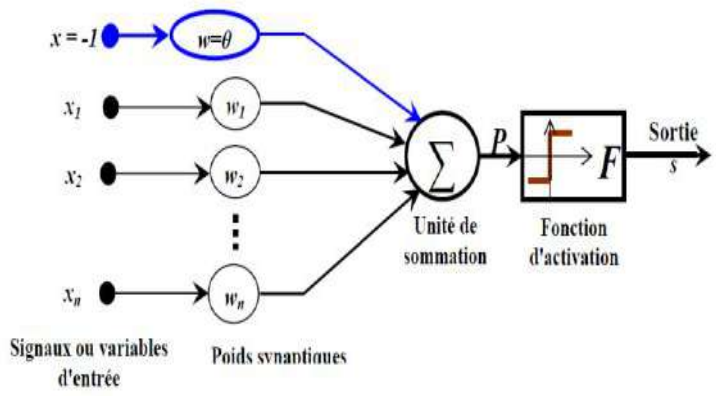


Figure I.3. Neurone formel modèle étendu (Hassani 2003).

I.5.4. Fonction d'activation "F"

L'état que peut prendre un neurone est en général binaire mais peut aussi bien prendre une valeur discrète ou bien continue. Selon le type de cet état, on aura donc différentes formes pour la fonction de transition (d'activation).

Nous décrivons par la suite les fonctions de transitions les plus utilisées actuellement dans le cadre des réseaux neuronaux (Davalo & Naïm 1993; Jodouin 1994).

I.5.4.1. Fonction binaire a seuil

Elle a été utilisée par McCulloch et Pitts dans leur modèle du neurone formel (Mcculloch & Pitts 1943) .Elle fait passer l'activation du neurone d'une valeur à une autre des que l'entrée résultante dépasse un certain seuil (équation I.2). Le seuillage introduit une non linéarité dans le comportement du neurone. Cependant, il limite la gamme de ses réponses possibles à deux valeurs (Figure I.4). L'inconvénient de cette fonction est qu'elle n'est pas différentiable, ce qui pose un problème pour les algorithmes basés sur le gradient. L'équation qui définit l'état du neurone est :

$$S = F(P - \theta) = F(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i - \theta) \qquad \textbf{I.2}$$

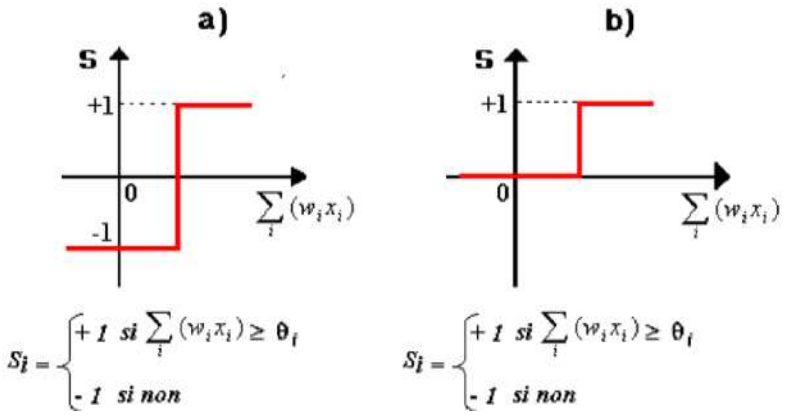


Figure I.4. Fonction binaire à seuil (Hassani 2003).

I.5.4.2. Fonction identité :

L'état est calculé à l'aide de l'équation suivante :

$$S = F(P) = P = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i \qquad \textbf{I.3}$$

Nous remarquons que cette fonction admet des valeurs non bornées pour les états, ce qui peut entraîner des débordements lors des simulations. Elle est utilisée, entre autre, par T.Kohonen pour construire son modèle de mémoires associatives (Kohonen .1984).

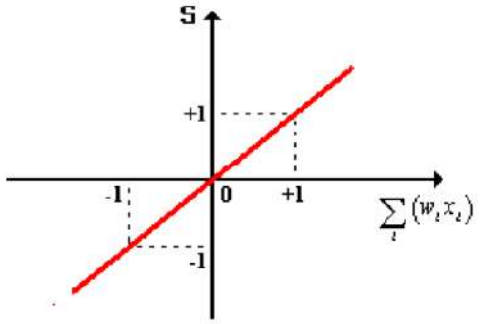


Figure I.5. Fonction identité (Hassani 2003).

I.5.4.3. Fonction linéaire a seuil

Cette fonction représente un compromis entre la fonction linéaire et la fonction seuil : entre ses deux bornes de saturation, elle confère au neurone une gamme de réponses possibles. En modulant la pente de linéarité, on affecte la plage de réponses du neurone (Figure I.6).

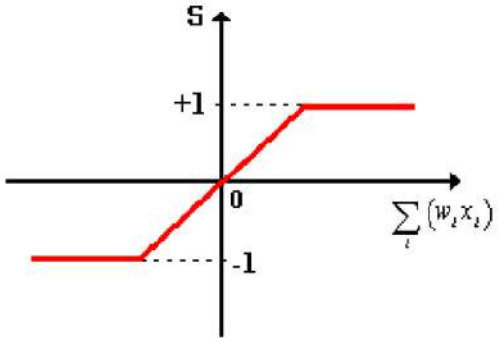


Figure I.6. Fonction linéaire à seuil (Hassani 2003).

I.5.4.4. Fonction non linéaire

a. Fonction sigmoïde exponentielle

La fonction sigmoïde est l'équivalent continu de la fonction linéaire bornée. Vu ses nombreux avantages (continuité et différentiabilité), ce type de fonction est généralement employé dans le réseau de neurones multicouches (Figure I.7).

L'équation qui définit l'état du neurone est :

$$F(P) = \frac{1}{1+e^{-aP}} \quad \textbf{I.4}$$

Pour $0 < F(P) < +1$

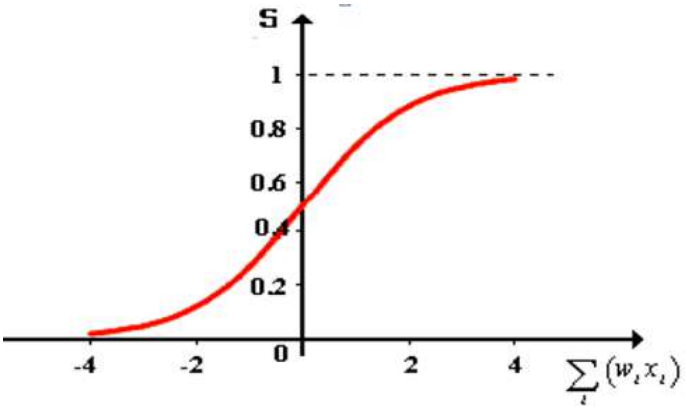


Figure I.7. Fonction sigmoïde exponentielle (Hassani 2003).

b. Fonction sigmoïde tangentielle

C'est une autre fonction sigmoïde forte répandue (Figure I.8). L'équation qui définit l'état du neurone est :

$$F(P) = \frac{1-e^{-aP}}{1+e^{-aP}} \quad \textbf{I.5}$$

$Pour \quad -1 < F(P) < +1$

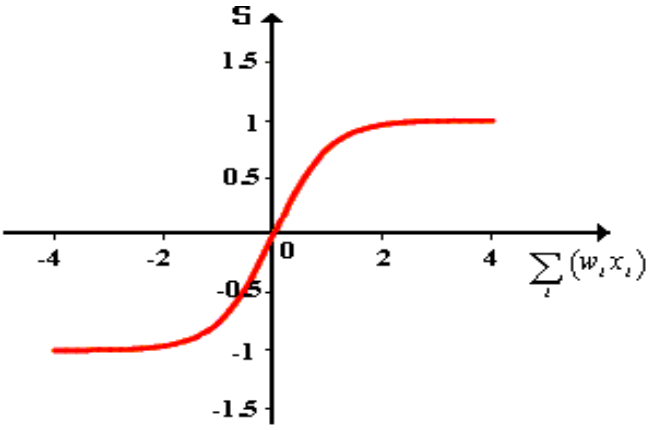


Figure I.8. Fonction sigmoïde tangentielle (Hassani, 2003).

I.5.4.5. Fonction gaussienne

Cette fonction n'est pas monotone croissante, elle est souvent employé dans les réseaux RBF (Radial Basis Function).

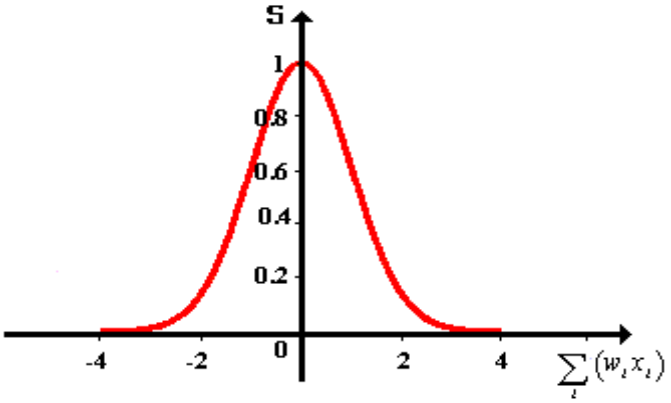


Figure I.9. Fonction Gaussienne (Hassani 2003).

Dans une étude comparative de fonctions d'activation (DasGupta & Schnitger 1993), la fonction sigmoïde s'est révélée meilleure en termes de capacité d'approximation. H.N. Mhaskar et C.A. Micchelli (Mhaskar & Micchelli 1994) ont établi une relation entre la précision de l'approximation, le nombre d'unités cachées dans un réseau à une seule couche cachée et la régularité de la fonction d'activation. D'après leur théorème, plus la fonction d'activation est régulière, plus la précision de l'approximation est bonne. Cependant, Fombellida et autres. (Fombellida *et al* 1990) ont constaté que l'utilisation de fonctions d'activation non monotones peut présenter certains avantages : accélération de l'apprentissage, réduction du nombre d'unités cachées, etc.

I.5.5. Sortie du neurone "S"

Le neurone artificiel calcule sa sortie grâce à l'équation (I.6), elle peut être discrète ou réelle selon la fonction d'activation utilisée.

$$S = F(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i - \theta) = F(\sum_{i=1}^{n} w_i x_i) \qquad \textbf{I.6}$$

Une fois que la sortie est calculée, elle peut être passée à un autre neurone (ou groupe de neurones) ou directement à l'environnement extérieur.

I.6. Étude comparative

La figure suivante fait le parallélisme entre le neurone formel ou artificiel et le neurone biologique. On remarque dans cette description schématique, que chaque composant ou constituant du neurone formel trouve son inspiration biologique.

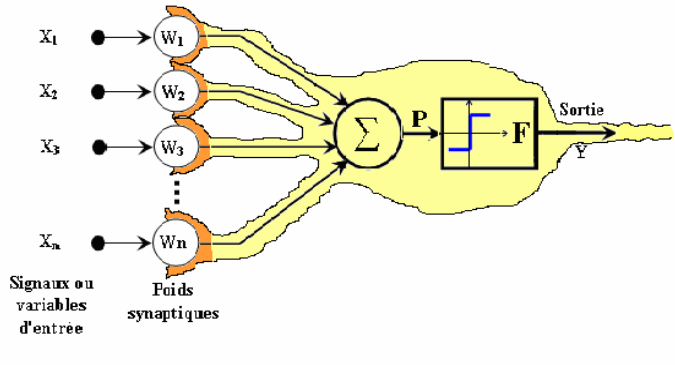


Figure I.10. Comparaison entre un neurone biologique et un neurone formel (Hassani 2003).

I.7. Architecture et connexionnisme des réseaux de neurones

Comme nous l'avons vu plus haut, un neurone réalise simplement une fonction non linéaire, paramétrée, de ses variables d'entrée. L'intérêt des neurones réside dans les propriétés qui résultent de leur association en réseaux, c'est-à-dire de la composition des fonctions non linéaires réalisées par chacun des neurones.

Les connexions entre les neurones qui composent le réseau décrivent la « topologie » du modèle. Le plus souvent, cette topologie fait apparaître une certaine régularité de l'arrangement des neurones ; cependant, celui-ci peut être quelconque.

Selon le mode de connexion des neurones, On distingue les réseaux suivants :

I.7.1. Réseau de neurones non bouclés

La définition de ce type de réseaux selon G. Dreyfus (Dreyfus *et al* 2002) est :

"Un réseau de neurones non bouclé réalise une (ou plusieurs) fonction algébriques de ses entrées, par composition des fonctions réalisées par chacun des neurones".

Un réseau de neurones non bouclé est donc représenté graphiquement par un ensemble de neurones connectés entre eux, l'information circulant des entrées vers les sorties sans retour en arrière : si l'on se déplace dans les réseaux, à partir d'un neurone quelconque, en suivant les connexions, on ne peut pas revenir au neurone de départ. Les neurones qui effectuent le dernier calcul de la composition des fonctions sont les neurones de sortie; ceux qui effectuent des calculs intermédiaires sont les neurones cachés. Il convient d'insister sur le fait que le temps ne joue aucun rôle fonctionnel dans le réseau de neurones non bouclé : si les entrées sont constantes, les sorties sont également. Le temps nécessaire pour le calcul de la fonction réalisée par chaque neurone est négligeable et, fonctionnellement, on peut considérer ce calcul comme instantané. Pour cette raison, les réseaux non bouclés sont souvent appelés "réseau statique", par opposition aux réseaux bouclés ou dynamique que nous introduirons plus loin.

Le domaine d'application par excellence des réseaux non bouclé, dont l'apprentissage est souvent supervisé, la modélisation statique type boite noire. En effet, si on dispose d'un ensemble de variables mesurées et d'un ensemble de mesures d'une grandeur relative à un processus de nature quelconque (physique, chimique, économique, financier…) et en supposant qu'il existe une relation (suffisamment régulière) entre le vecteur des variables et la grandeur en question, alors il est possible d'approximer cette relation par un réseau de neurone non bouclé.

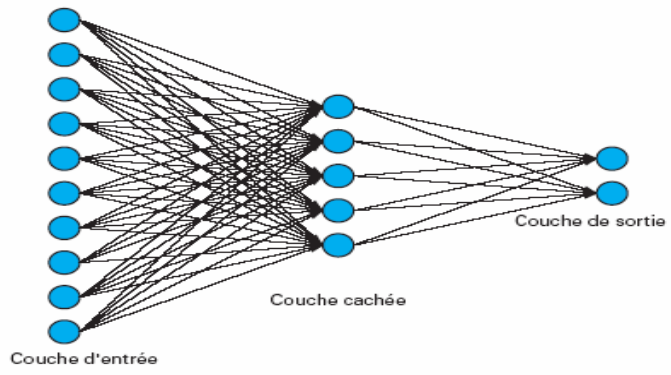


Figure I.11. Réseau multicouche non bouclé classique (Hassani 2003).

Selon le nombre de couches dans un réseau et la fonction d'activation, on distingue :

I.7.1. 1. Perceptron

C'est l'un des premiers réseaux de neurones, conçu en 1958 par F. Rosenblatt (Rosenblatt 1962). Il est linéaire et représente l'unité élémentaire d'un réseau de neurones.

Le perceptron est inspiré du système visuel. La première couche ou la couche d'entrée représente la rétine, et la couche de sortie est équivalente aux cellules de décision.

Un Perceptron calcule à partir d'un vecteur de n entrées réelles $[x_1 x_2 \ldots x_n]$, une combinaison linéaire de ces entrées ; le résultat P de cette combinaison est ensuite utilisé comme argument d'une fonction F d'une variable pour délivrer la valeur de sortie s (Figure I.12). On a donc la relation :

$$S = F(P) = F(b + \sum_{i=1}^{n} x_i w_i) \qquad \textbf{I.7}$$

Dans laquelle les (ω_i) $i \leq n$ appelés poids représentent la contribution des entrées (x_i) $i \leq n$ sur la sortie du perceptron. La fonction F est appelée fonction d'activation du neurone.

I.7.1.2. Perceptron multicouche (MLP)

Les réseaux neurones multicouches contiennent en plus des couches d'entrée et de sortie, un certain nombre (supérieur ou égal à un) de couches intermédiaires ou cachées dont les neurones ont une fonction d'activation sigmoïde. Les liens n'existent évidemment qu'entre les cellules d'une

couche avec les cellules de la couche suivante (réseau non bouclé). De telles architectures sont habituellement désignées dans la littérature sous le nom "**M**ulti-**L**ayer **P**erceptron" MLP (Figure I.11) (Dreyfus *et al* 2002).

Les MLP possédant un seul neurone de sortie linéaire, peuvent approcher toute fonction bornée suffisamment régulière, avec une précision arbitraire, dans un domaine fini de l'espace de ses variables (Hornik 1991). Néanmoins, cette propriété, qui n'est qu'un théorème d'existence et ne donne pas la méthode de trouver les paramètres du réseau, n'est pas spécifique aux réseaux de neurones. C'est la propriété de parcimonie qui leur est particulière et fait tout leur intérêt. Les MLP sont, en effet, des approximateurs parcimonieux, c'est-à-dire; que le nombre des paramètres de pondération ou poids, pour une précision donnée, croit linéairement avec le nombre des variables d'entrées du modèle. La parcimonie, qui est une propriété fondamentale des MLP, est donc d'autant plus importante que le nombre des entées d'un modèle est grand (Dreyfus *et al* 2002).

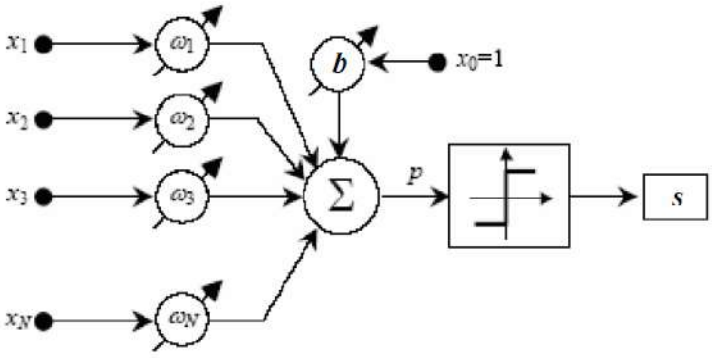


Figure I.12. Principe d'un perceptron (Hassani 2003).

I.7.1.3. Réseaux RBF (Radial Basis Function)

Ces réseaux ont été introduits par M. Powel (Powel 1985) et D. Broomhead et autres (Broomhead & Lowe 1988). Il s'agit d'une "spécialisation" d'un perceptron multicouche (MLP). Les neurones de ces réseaux sont actifs pour une zone restreinte de l'espace d'entrée qui est définie par des fonctions radiales. Cette technique consiste à utiliser la non linéarité d'une fonction (par exemple une gaussienne) pour ponctuer la réponse des neurones des couches cachées (Figure I.13) (Hassani 2002-2003; Zemouri *et al* 2002; Berthold & Diamond 1995).

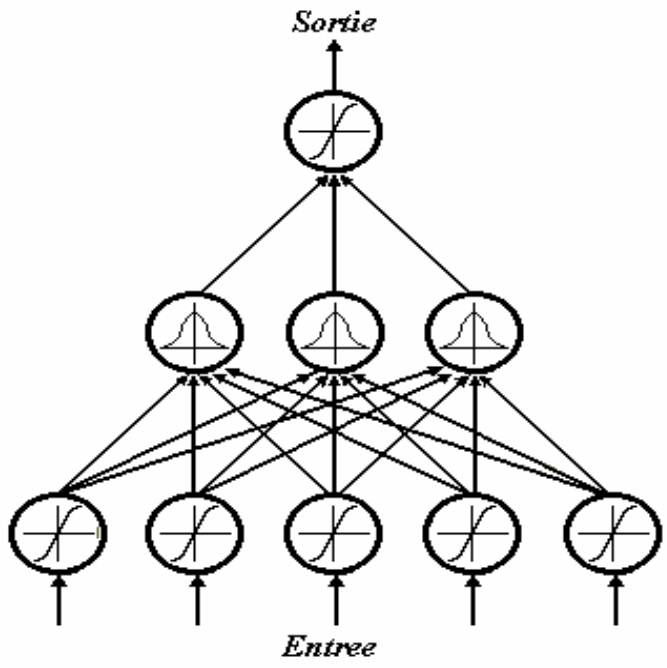


Figure I.13. Réseau Radial Basis Function (RBF) (Hassani 2003).

I.7.2. Réseaux de neurones bouclés

Un réseau de neurone et dit bouclé ou récurrent lorsque des sorties de neurones d'une couche sont connectées aux entrées d'une couche d'indice inférieur**.** Autrement dit, lorsqu'on se déplace dans le réseau en suivant le sens des connexions, il est possible de trouver au moins un chemin qui revient à son point de départ. La sortie d'un neurone du réseau peut donc être fonction d'elle-même; cela n'est évidemment concevable que si la notion de temps est explicitement prise en considération. Raison pour la quelle ce type de réseaux sont appelés dynamique. Ainsi, à chaque connexion d'un réseau de neurones bouclé est attaché, outre un poids comme pour les réseaux non bouclé, un retard, multiple entier de l'unité de temps choisie (Dreyfus *et al* 2002). Une grandeur, à un instant donné, ne pouvant pas être fonction de sa propre valeur au même instant, tout cycle du graphe du réseau doit avoir un retard non nul.

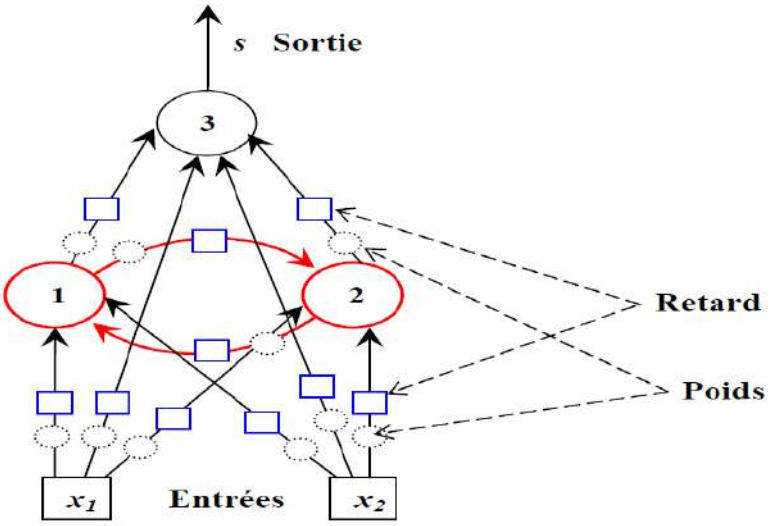


Figure I.14. Un réseau de neurone bouclé à deux entrées contenant une boucle ente les neurones (1) et (2) (Hassani 2003).

Les réseaux de neurones bouclés sont mise en œuvre essentiellement pour concevoir des modelés dynamiques. Ils peuvent être utilisés à titre d'exemples; comme modèle de simulation pour prévoir l'évolution d'un processus quelconque dans le temps ou comme prédicateur à très court terme (une période d'échantillonnage) afin de l'intégrer à un système de commande (Dreyfus *et al* 2002).

1.8. Apprentissage

On appelle apprentissage des réseaux de neurones la procédure qui consiste à estimer les paramètres (poids) des neurones du réseau, afin que celui-ci remplisse au mieux la tâche qui lui est affectée (Dreyfus *et al* 2002). L'apprentissage est une phase du développement du réseau de neurones durant laquelle on calcule les poids des neurones de telle manière que les sorties du réseau soient aussi proches que possible des sorties désirées. L'apprentissage fait appel à des exemples de comportement du processus à modéliser (Hinton 1989).

On distingue deux types d'apprentissage : l'apprentissage supervisé et l'apprentissage non supervisé, selon qu'on fournit ou non au modèle les sorties désirées :

I.8.1. Apprentissage supervisé

L'apprentissage supervisé admet l'existence d'un expert (ou professeur) qui possède une connaissance innée de l'environnement. Le rôle de l'expert est de fournir les informations relatives à l'environnement nécessaires à l'apprentissage du réseau, sous forme d'un ensemble d'exemples composés de stimuli auxquels sont associées des réponses désirées. L'apprentissage supervisé exige

donc que les exemples ou les données soient constitués de couples de valeurs du type : (valeur d'entrée, valeur de sortie désirée). Tout le problème de l'apprentissage supervisé consiste, étant donné un vecteur d'apprentissage de n couples *(x,d) i = 1, 2, …, n*, à déterminer le vecteur des poids des neurones capables de prédire le même vecteur de sortie à partir du même vecteur d'entrée.

Un apprentissage supervisé force donc le réseau à converger vers un état final précis, en même temps qu'on lui présente un motif (données).

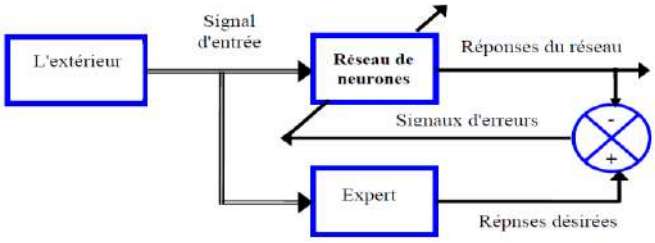


Figure I.15. Illustration de l'apprentissage supervisé (Hassani 2003).

I.8.2. Apprentissage non supervisé

Contrairement à l'apprentissage supervisé, lors d'un apprentissage non-supervisé, le réseau est laissé libre de converger vers n'importe quel état final lorsqu'on lui présente un motif. Il n'y a donc pas de professeur qui dirige le réseau vers une situation souhaitée, c'est au réseau de découvrir les ressemblances entre les éléments de la base des données, et de les traduire par des réponses adéquates. L'apprentissage est qualifié donc de non supervisé lorsque seules les valeurs d'entrée sont disponibles. Dans ce cas, les exemples présentés à l'entrée provoquent une autoadaptation du réseau afin de produire des valeurs de sortie qui soient proches en réponse pour des valeurs d'entrées similaires.

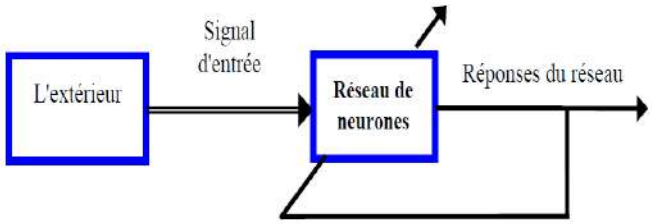


Figure I.16. Illustration de l'apprentissage non supervisé (Hassani 2003).

I.12. Conclusion

Tout au long de ce chapitre, nous avons tenté de donner un maximum d'informations sur les réseaux de neurones d'une façon générale tout en mettant l'accent sur les réseaux de neurones non bouclés ou statiques, type MLP, vraisemblablement les plus utilisés dans les modélisations statiques du fait qu'ils sont doués des propriétés d'approximation universelle. Nous avons présenté un algorithme d'apprentissage très utilisé dans la communauté connexionniste: l'algorithme de rétropropagation du gradient. Plusieurs travaux lui ont été consacrés et un certain nombre de modifications ont été proposées pour accélérer le temps d'apprentissage et améliorer la capacité de généralisation ainsi que les performances du réseau obtenu. Vers la fin, nous avons également présenté une procédure plus au moins détaillée d'une modélisation statique en utilisant les MLP. Cette démarche devrait, nous aider dans le calcul de la viscosité qui fera l'objet des chapitres 3 et 4.

II.1. Introduction

La viscosité est désignée comme étant des propriétés de transport parce qu'elle est liées au mouvement d'agitation des molécules. En effet, cette grandeur apparaissent dans tous les phénomènes mettant en jeu des transferts de quantité de mouvement, d'énergie ou d'espèce chimique qui sont les corollaires des forces de cohésion du fluide (Gosse *et al* 1991).

La détermination de la viscosité de meure une nécessité capitale pour la recherche scientifique et l'industrie. Les procédures expérimentales sont très délicates et coûteuses et elles ne se font que dans des laboratoires spécialisés. En revanche les approches théoriques, relativement accessibles, sont de plus en plus sollicitées pour l'estimation de ces propriétés de transport des gaz et des liquides.

Dans ce chapitre, nous définissons la viscosité et on donne leur fondement théoriques.

II.2. Généralités

La viscosité est un des principaux paramètres mesurés lors de l'étude de l'écoulement de fluides. Les mesures de viscosités sont en général liées à la qualité et aux performances d'un produit. Toute personne ayant à caractériser un flux, en recherche, ou en développement, sera, à un moment ou à un autre, confronté à une mesure de viscosité.

Les données rhéologiques nous aident à comprendre les fluides sur lesquels nous travaillons de sorte que nous puissions savoir comment ils se comportent, ou comment les forcer à se comporter de la façon désirée.

II.3. Définitions des unités de la viscosité

Si un effort de cisaillement est appliqué à n'importe quelle partie d'un fluide confiné, le fluide se déplacera avec un gradient de vitesse avec sa vitesse maximale au point où l'effort est appliqué. Si l'effort de cisaillement local par unité de superficie à un point quelconque est divisé par le gradient de vitesse, le rapport obtenu est défini comme viscosité du milieu. Ainsi, la viscosité est une mesure du frottement du fluide interne, qui tend à s'opposer à n'importe quel changement dynamique du mouvement liquide. Une force de cisaillement appliquée aura comme conséquence d'un grand gradient de vitesse à la basse viscosité. La viscosité accrue fait exercer chaque couche liquide une plus grande drague de friction sur des couches adjacentes qui diminue alternativement le gradient de vitesse.

Il doit être noté que la viscosité diffère à un égard important des propriétés; à savoir, la viscosité peut seulement être mesurée dans a expérience de non-équilibre. C'est une densité

différente qui peut être trouvée dans une charge statique l'appareil et ainsi est une propriété d'équilibre. Sur la micro-échelle, cependant, tous les deux les propriétés reflètent les effets du mouvement et de l'interaction moléculaires. Ainsi, quoique la viscosité désigné d'habitude sous le nom d'une propriété de non-équilibre ; elle est, comme la densité, une fonction de l'état thermodynamique du fluide ; en fait, il peut même être employé à définir l'état du matériel. (Brulé & Starling 1984) ont souligné charmes d'employer la viscosité et les données thermodynamiques pour caractériser le complexe fluides et pour développer des corrélations. Cette discussion est limitée aux fluides newtoniens, c.-à-d., fluides en lesquels la viscosité définie comme, est indépendant de l'un ou l'autre la grandeur du gradient d'effort de cisaillement ou de vitesse (taux de cisaillement). Pour des solutions de polymère ce qui sont non-Newtoniens, le lecteur est visé par Ferry (1980) ou Larson (1999).

Les mécanismes et la théorie moléculaire de viscosité de gaz ont été raisonnablement puits clarifié par les mécanismes statistiques de non équilibré et la théorie cinétique de gaz (Millat *et al* 1996), mais la théorie de viscosité liquide est moins bon développé.

Puisque la viscosité est définie comme effort de cisaillement par unité de superficie divisée par un gradient de vitesse, il devrait avoir dimension de (force) (de temps/ (longueur) ^{2} ou masse/ (longueur) (temps). Les deux groupes dimensionnels sont employés, bien que pour le travail le plus scientifique, les viscosités sont exprimées en équilibres, centipoises, micropoises, …etc. Un poise (P) dénote une viscosité de 0.1 N. s/m^2 et 1.0 cP = 0.01 P. Les facteurs suivants de conversion s'appliquent aux unités de viscosité :

1 P =100 cP =1.000 ×10^{6}µP =0.l N s/m^2 = 1 g/ (cm.s) =0.1 Pa.s.

La viscosité cinématique est le rapport de la viscosité à la densité. Avec la viscosité dans les équilibres et la densité des grammes par centimètre cubique, l'unité de la viscosité cinématique est le chargement, de centimètres carrés d'unités par seconde. Dans le système de SI des unités, des viscosités sont exprimées en N. s/m^2 (ou Pa. s) et viscosité cinématiques en m^2/s ou cm^2/s.

II.4. Classification des fluides

II.4.1. Les fluides newtoniens

Ce type de comportement d'écoulement que Newton avait supposé pour tous les fluides est appelé, comme on peut s'en douter, "newtonien". Ce n'est toutefois qu'un des nombreux types de comportement d'écoulement que l'on peut rencontrer. Le comportement d'un fluide newtonien est représenté graphiquement dans la figure ci-dessous.

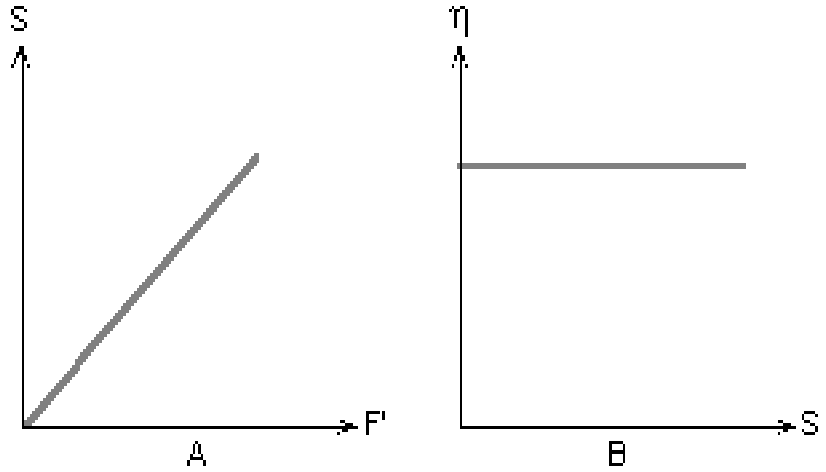


Figure II.1 : Le comportement d'un fluide newtonien (www.perso.latribu.com/shagar/steve/pdf/sa3.pdf).

Le graphique A montre que la relation entre la contrainte de cisaillement (F') et le taux de cisaillement (S) est une ligne droite. Le graphique B montre que la viscosité du fluide reste constante lorsque le taux de cisaillement varie. Comme exemples typiques de fluides newtoniens, on trouve l'eau et les huiles de moteur fines.

Ce que cela signifie en pratique, est qu'à une température donnée, la viscosité d'un fluide newtonien va rester constante, quelle que soit le modèle de viscosimètre utilisé. Ces fluides sont les plus simples à mesurer, mais ils ne sont malheureusement pas aussi communs que le groupe de fluides plus complexes, non-newtoniens, dont nous allons parler dans la prochaine section.

II.4.2. Les fluides non-newtoniens

Un fluide non-newtonien est défini, au sens large, comme étant un fluide pour lequel le rapport F'/S n'est pas une constante. En d'autres mots, lorsque le taux de cisaillement varie, la contrainte de cisaillement ne varie pas dans les mêmes proportions (ni même nécessairement dans la même direction). La viscosité de tels fluides va donc varier à mesure que le taux de cisaillement change. Donc, les paramètres expérimentaux du viscosimètre peuvent avoir un impacte sur la mesure de la viscosité d'un fluide non-newtonien. Dans ce cas, la viscosité mesurée est appelée "viscosité apparente" du fluide et n'a de sens que lorsque les paramètres expérimentaux sont décrits explicitement.

Un flux non-newtonien peut être imaginé en pensant à tout fluide comme étant un mélange de molécules avec différentes formes et tailles. Lorsqu'elles passent l'une près de l'autre, comme cela arrive durant un écoulement, leur taille, forme et cohésion va déterminer quelle force est

nécessaire pour les faire bouger. A chaque taux de cisaillement spécifique, l'alignement peut être différent et une force plus ou moins importante peut être requise pour maintenir le mouvement.

Il y a différents types de comportement d'écoulement non-newtonien, caractérisés par la façon dont la viscosité du fluide varie en réponse à un changement de taux de cisaillement. Les types les plus communs de fluides non-newtoniens sont décrits ci-dessous.

a. Pseudoplastiques

Ce type de fluide présente une viscosité décroissante lorsque le taux de cisaillement augmente, comme représenté dans la figure ci-dessous.

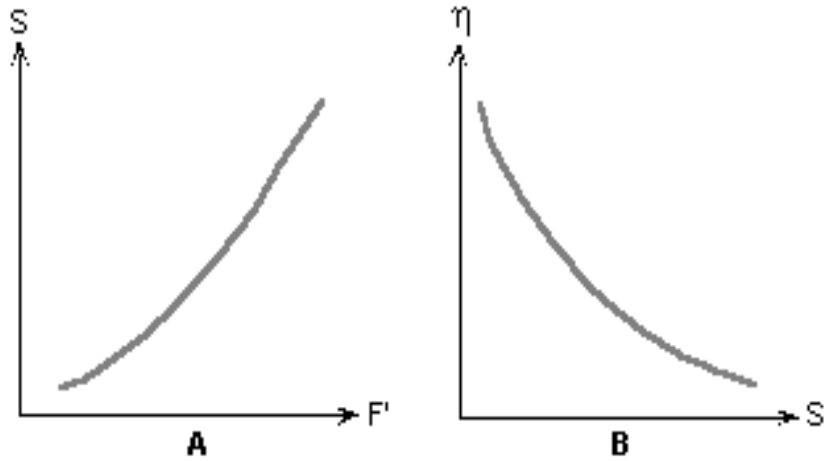


Figure II.2 : Le comportement d'un fluide pseudoplastiques (www.perso.latribu.com/shagar/steve/pdf/sa3.pdf).

Sans doute le plus commun des fluides non-newtoniens, les pseudoplastiques comprennent la peinture, les émulsions et les dispersions de nombreux types. Ce genre de comportement d'écoulement est parfois appelé "fluidification par cisaillement".

b. Dilatant

Une viscosité croissante avec une augmentation du taux de cisaillement est caractéristique d'un fluide dilatant et ce comportement est illustré dans la figure ci-dessous.

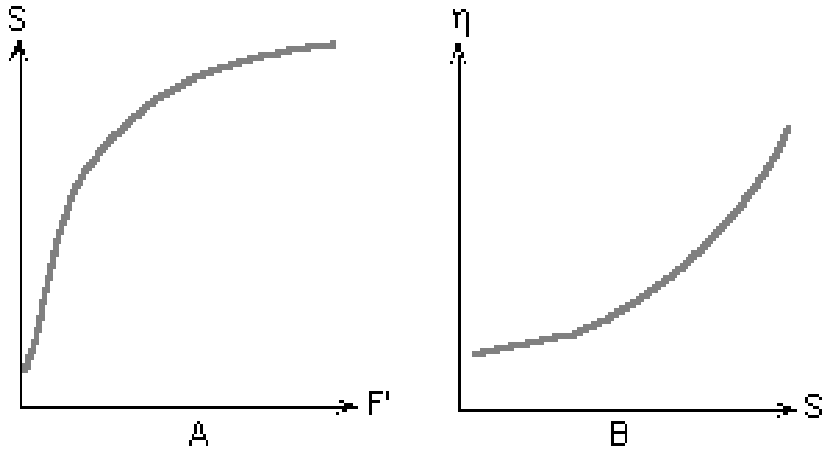


Figure II.3 : Le comportement d'un fluide dilatant
(www.perso.latribu.com/shagar/steve/pdf/sa3.pdf).

Bien que plus rare que la pseudoplasticité, la dilatance (épaississement) est fréquemment observée dans les fluides contenant un haut taux de solides défloculés, comme les boues d'argile, les composés sucrés, la fécule de maïs dans l'eau et l'eau sablonneuse. La dilatance est également connue sous le terme d'épaississement par cisaillement.

c. Plastique

Ce type de fluide se comporte comme un solide sous des conditions statiques. Une certaine quantité de force doit être appliquée au fluide avant qu'il n'y ait écoulement. Cette force est appelée "seuil d'écoulement". Une fois le seuil d'écoulement dépassé et l'écoulement engagé, les fluides plastiques peuvent présenter des caractéristiques newtoniennes, pseudoplastiques ou dilatantes. La figure ci-dessous représente l'un de ces cas.

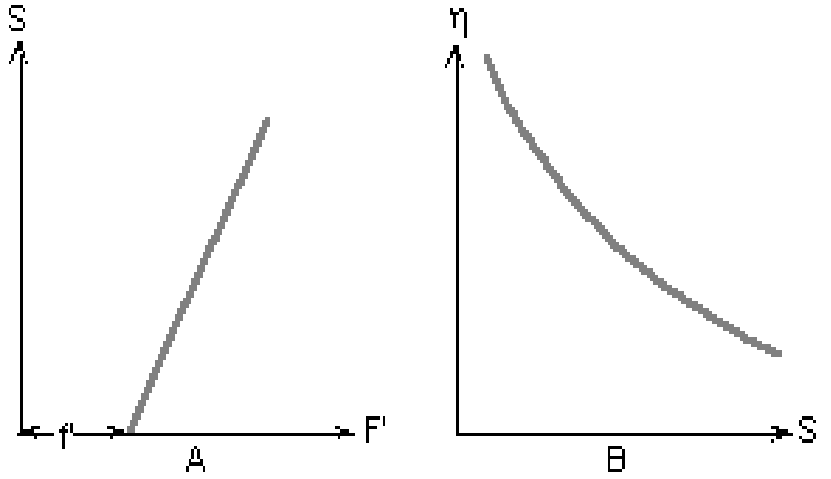


Figure II.4 : Le comportement d'un fluide plastique
(www.perso.latribu.com/shagar/steve/pdf/sa3.pdf).

Jusqu'à présent, nous n'avons discuté l'effet du taux de cisaillement sur les fluides non-newtoniens. Que ce passe-t-il lorsque le temps est considéré ? Cette question nous conduit à examiner deux types d'écoulement non-newtoniens supplémentaires : les thixotropes et les rhéopectiques.

d. Thixotropie et rhéopexie

Certains fluides présentent une modification de la viscosité avec le temps, sous des conditions de taux de cisaillement constant. Il y a deux catégories à considérer :

- **La thixotropie**

Comme montré dans la figure ci-dessous, un fluide thixotrope subit une décroissance de viscosité avec le temps, lorsqu'il est soumis à un cisaillement constant.

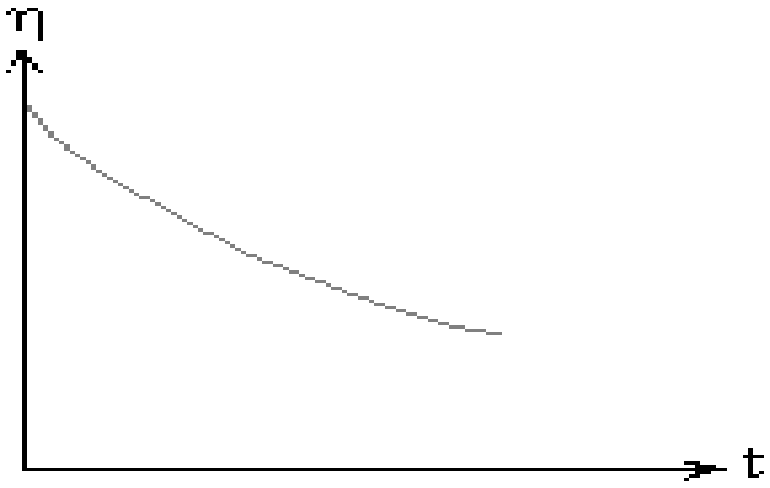


Figure II.5 : Le comportement d'une fluide thixotropie (www.perso.latribu.com/shagar/steve/pdf/sa3.pdf).

La rhéopexie

C'est essentiellement le comportement opposé du comportement thixotrope, en ce sens que la viscosité du fluide augmente avec le temps lorsqu'il est soumis à un taux de cisaillement constant. La figure ci-dessous représente graphiquement ce type de comportement.

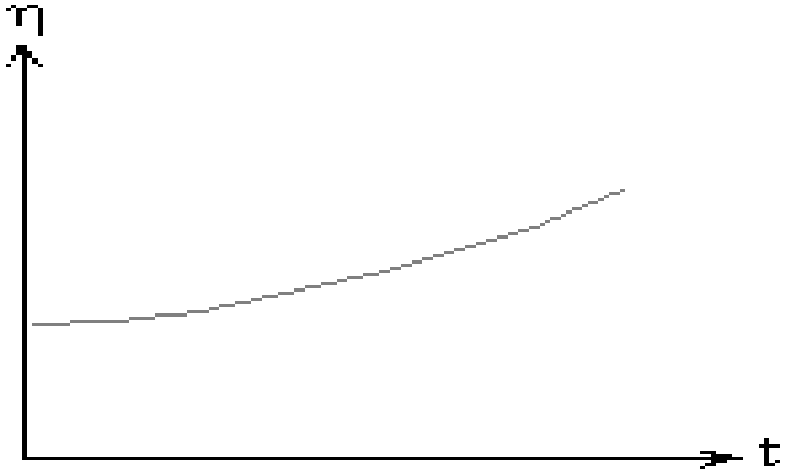


Figure II.6 : Le comportement d'un fluide rhéopexie (www.perso.latribu.com/shagar/steve/pdf/sa3.pdf).

La thixotropie et la rhéopexie peuvent toute deux avoir lieu en combinaison avec n'importe quel comportement d'écoulement que nous venons de voir jusqu'à présent, ou seulement à certains taux de cisaillement. Le facteur temps est extrêmement variable, sous des conditions de cisaillement constant, certains fluides peuvent atteindre leur valeur de viscosité finale en quelques secondes, alors que d'autres prendront plusieurs jours.

Un tracé de la contrainte de cisaillement versus le taux de cisaillement est réalisé en augmentant le taux de cisaillement jusqu'à une certaine valeur, puis en le réduisant immédiatement, jusqu'au point de départ. Notons que les courbes "ascendante" et "descendante" ne coïncident pas. Ce cycle d'hystérésis est provoqué par la diminution de la viscosité du fluide avec l'augmentation du temps de cisaillement. Ce type d'effet peut être, ou ne pas être, réversible ; certains fluides thixotropes, si on les laisse reposer un moment, récupèrent leur viscosité initiale, alors que d'autres ne la retrouvent jamais. Le comportement rhéologique d'un fluide peut, bien entendu, avoir d'importants effets sur la technique de mesure de la viscosité. Nous discuterons plus tard de certains de ces effets et de la façon d'en tenir compte.

II.5. Les flux laminaires et turbulents

La définition que nous avons donnée de la viscosité implique l'existence de ce qu'on appelle un flux laminaire : le mouvement d'une couche de fluide sur une autre, sans transfert de matière de l'un vers l'autre en fonction d'un certain nombre de facteurs, il y a une vitesse maximale déterminée à laquelle une couche de fluide peut se déplacer par rapport à une autre, au delà de laquelle un transfert de masse apparaît. C'est ce qu'on appelle le phénomène de turbulence. Des molécules ou des particules plus grandes, sautent d'une couche à une autre et dissipent une quantité d'énergie substantielle dans ce processus. Le résultat global est qu'un plus grand apport d'énergie est requis pour maintenir ce flux turbulent que dans un flux laminaire qui aurait la même vitesse.

L'augmentation de l'apport d'énergie se manifeste comme une contrainte de cisaillement apparemment plus grande que celle qui serait observée dans des conditions de flux laminaire au même taux de cisaillement, ce qui résulte en la lecture d'une viscosité faussement élevée.

Le moment où le flux laminaire devient un flux turbulent dépend d'autres facteurs, que la vitesse à laquelle les couches se déplacent.

Une attention tout particulière doit être portée à la distinction entre des conditions de flux turbulent et un comportement d'écoulement dilatant. En général, les matériaux dilatants vont présenter un accroissement régulier de la viscosité avec l'augmentation du taux de cisaillement, lorsque le flux turbulent est caractérisé par une augmentation relativement soudaine et substantielle de la viscosité au delà d'un certain taux de cisaillement. Le comportement d'écoulement du matériau peut alors être newtonien, ou non-newtonien au delà de ce point.

II.6. Théories de propriétés de transport de gaz

La théorie de propriétés de transport de gaz est simplement énoncée, mais elle est tout à fait complexe à exprimer en équations qui peuvent être employées directement pour calculer des viscosités. Dans simple limites, quand un gaz subit un effort de cisaillement de sorte qu'il y ait un certain mouvement en bloc, les molécules à n'importe quel un point ont le vecteur en bloc de vitesse supplémentaire à leurs propres vecteurs aléatoires de vitesse. Les collisions moléculaires causent un échange d'élan dans tout le fluide, et cette vitesse en bloc de mouvement (ou élan) devient distribué.

Près de la source d'effort appliqué, le vecteur en bloc de vitesse est haut, mais car les molécules éloignent de la source, elles sont ralenti dû à collisions moléculaires aléatoires. Cet échange aléatoire et moléculaire d'élan est cause prédominante de viscosité gazeuse.

II.7. Théorie Cinétique Élémentaire

Si le gaz est modelé de la façon la plus simple, il est possible de montrer les relations générales parmi la viscosité, la température, la pression, et la taille moléculaire. Plus rigoureux les traitements rapportent les relations semblables mais avec des facteurs importants de correction. Le modèle de gaz élémentaire assume toutes les molécules non attraction les sphères rigides du diamètre σ (avec la masse m) se déplaçant aléatoirement à une vitesse moyenne *v*. La densité molaire est les volumes unitaire des molécules *n* en tandis que la densité de masse est la masse en volume unitaire.

Les molécules se déplacent le gaz et se heurtent élan de transfert dans un gradient de vitesse et énergie dans un gradient de la température. Le mouvement transfère également l'espèce moléculaire dans un gradient de concentration. Le flux net de l'élan, de l'énergie, ou de la masse composante entre deux couches est proportionnel assumé à l'élan, à l'énergie, ou à la masse gradient de densité, c.-à-d :

$$Flux\ \alpha\ -\frac{d\rho'}{dz} \qquad \textbf{II.1}$$

Là où les diminutions de densité ρ' de la direction *de* $+z$ et ρ' peuvent être ρ_i (densité de masse).nmv_y, (densité d'élan), ou $C_v nT$ (densité d'énergie). Le coefficient de la proportionnalité pour tous ces flux est donné par théorie cinétique élémentaire comme $vL/3$, où *v* est la vitesse moléculaire moyenne et *L* est le chemin libre moyen.

L'équation II.1 est également employée pour définir les coefficients de transport de diffusivité *D*, viscosité η, et conductivité thermique λ; c'est-à-dire :

$$Masse\ de\ flux = -Dm\frac{dni}{dz} = -\frac{VL}{3}\frac{dpi}{dz} \qquad \textbf{II.2}$$

$$Le\ flux\ d'élan = \eta\frac{dvy}{dz} = \frac{vL}{3}mn\frac{dvy}{dz} \qquad \textbf{II.3}$$

$$Flux\ d'énergie = -\lambda\ \frac{dT}{dz} = -\frac{vL}{3}C_v n\ \frac{dT}{dz} \qquad \textbf{II.4}$$

Les équations II.2 à II.4 définissent les coefficients *D* de transport η et λ, si la vitesse moyenne est proportionnelle à $(RT/M)^{1/2}$ et le chemin libre moyen $(n\sigma^2)^{-1}$

$$D = \frac{vL}{3} = (const)\frac{T^{3/2}}{M^{1/2}P\sigma^2} \qquad \textbf{II.5}$$

$$\eta = \frac{m\rho vL}{3} = (const)\frac{T^{1/2}M^{1/2}}{\sigma^2} \qquad \textbf{II.6}$$

$$\lambda = \frac{vL\,c_{vn}}{3} = (\text{const})\frac{T^{1/2}}{M^{1/2}\sigma^2} \qquad \textbf{II.7}$$

Les multiplicateurs constants dans les équations. (II.5) à (II.7) être différent dans chaque cas; le fait

intéressant à noter de ces résultats est la dépendance du divers transfert coefficients sur *T*, *P*, *M* et σ. Un traitement semblable pour les sphères rigides et non attirant avoir une distribution de vitesse de Maxwellian rapporte les mêmes équations finales mais avec constantes numériques légèrement différentes.

La relation de viscosité pour une sphère rigide, et non-attraction du modèle montré par l'équation (II.6) est (Hirschfelder *et al* 1954) :

$$\eta=26.69 \times \frac{(MT)^{1/2}}{\sigma^2} \qquad \textbf{II.8}$$

Où

η : viscosité, µP

M : Poids moléculaire, g/mol

T : La température, K

σ : Diamètre de dur-sphère, Å

II.8. Effet des forces intermoléculaires

Si les molécules attirent ou repoussent un autre en vertu des forces intermoléculaires, la théorie de colporteur et d'Enskog est normalement utilisée (colporteur & capotages 1939; Hirschfelder *et al* 1954). Il y a quatre prétentions importantes dans ce développement :

(1) le gaz est suffisamment dilué pour que seulement les collisions binaires se produisent (gaz idéal);

(2) le mouvement des molécules pendant une collision peut être décrit par mécanique classique;

(3) seulement les collisions élastiques se produisent;

(4) les forces intermoléculaires agissent seulement entre les centres fixes des molécules; c.à.d. la fonction potentielle intermoléculaire est sphériquement symétrique. Avec ces restrictions, il s'avérerait que résulter la théorie devrait être applicable seulement à gaz monoatomique à basse pression et à hautes températures. Les restrictions de pression et de la température sont valides pour des gaz poly atomique sont proportionné pour les la plupart modeler des buts. Le traitement de Colporteur-Enskog développe des relations intégrales pour les propriétés de transport quand les interactions entre les molécules se heurtantes sont décrites par la fonction d'énergie potentielle ψ(r). Les équations exigent la solution numérique complexe pour chaque choix de modèle potentiel intermoléculaire. D'une façon générale, la solution du premier ordre pour la viscosité peut être écrite comme suit :

$$\eta=26.69 \times \frac{(MT)^{1/2}}{\sigma^2} \qquad \textbf{II.9}$$

Où la dépendance de la température de l'intégrale de collision, Ω_v est différente pour chaque ψ(r) et tous les symboles et unités sont définis comme dans l'équation (II.8), Ω_v est unité si les molécules ne s'attirent pas. Des corrections peuvent être trouvées en colporteur et Cowling (1939) et Hirschfelder et autres (1954).

II.9. Aspect théorique et modèles proposés

II.9.1. Viscosité des gaz

Le fondement théorique de la viscosité des gaz n'a pu être clarifié que par l'exploitation de la théorie cinétique des gaz. En effet, quand un gaz subit un effort de cisaillement de sorte qu'il y ait un certain mouvement en bloc, les molécules à n'importe quel point ont une vitesse d'entraînement ou vitesse d'ensemble qui s'ajoute à leurs vitesses individuelles. La collision moléculaire cause donc un échange de quantité de mouvement dans tout le fluide.

Près de la source où l'effort est appliqué, la vitesse d'entraînement est importante. En s'éloignant de ce point, les molécules sont ralenties dans la direction de l'écoulement en bloc, entraînant les autres sections du fluide à se déplacer dans cette direction. Cet échange de quantité de mouvement aléatoire est la cause prédominante de la viscosité des gaz (Reid *et al* 1977). L'équation de premier ordre de viscosité de Colporteur-Enskog a été donnée comme l'équation (II.9) collision intégral Ω_v doit être trouvée. Dans la dérivation d'équation (II.9), Ω_v est obtenu comme une fonction d'une température sans dimensions T^* qui dépend de potentiel intermoléculaire choisi. Pour n'importe quelle courbe potentielle, la température sans dimensions T^* est connexe par ε

$$T^* = \frac{kT}{\varepsilon} \qquad \textbf{II.10}$$

Là où k est la constante de Boltzmann's et ε est le minimum de l'énergie potentiel de paire.

L'équation fonctionnant pour le η doit avoir autant de paramètres comme ont été employés pour définir la relation originale de $\psi(r)$. Tandis qu'on a proposé beaucoup de modèles potentiels (Hirschfelder *et al* 1954), le Lennard-Jones 12-6 était le premier et le plus souvent appliqué pour la viscosité idéale de gaz.

$$\psi(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right] \qquad \textbf{II.11}$$

Dans l'équation (II.11), σ est un diamètre moléculaire et est la valeur de r qui cause $\psi(r)$ à être zéro. Avec ce potentiel, l'intégrale de collision a été déterminée près un certain nombre d'investigateurs (Barker *et al* 1964; Hirschfelder *et al* 1954; Itean *et al* 1961; Klein & Smith 1968; Monchick & Mason 1961; et O'Connell & Prausnitz 1965). Neufeld et autres (1972) proposé une équation empirique qui est commode pour l'application informatique :

Ω_v=$[A(T^*)^{-B}] + C[\exp(-DT^*)] + E[\exp(-FT^*)]$ **II.12**

Où $T^* = \mathrm{kT}/\varepsilon$, $A = 1.16145, B = 0.14874,$
$C = 0.52487, D = 0.77320, E = 2.16178\ et\ F = 2.43787$. L'équation (II.12) est applicable de $0.3 \leq T^* \leq 100$ avec un écart moyen de seulement 0.064 %.

$$\eta = \frac{16.64\times(\mathrm{M})^{1/2}\times\mathrm{T}}{(\varepsilon/k)^{1/2}\times\sigma^2} \quad \textbf{II.13}$$

Là où les unités sont les mêmes que dans l'équation (II.9). Ici σ et ε/k de paramètres sont combinés comme limite simple $(\varepsilon/k)^{1/2}\sigma^2$. L'équation (II.13) suggère cela quand $\mathrm{T_r} \leq 1.4$, les viscosités à basse pression de gaz sont essentiellement proportionnel à la température absolue.

La conclusion à tirer de cette discussion est cet équation (II.9) peut être employé pour calculer la viscosité de gaz, bien que l'ensemble choisi de ε/k et de σ puisse avoir peu de relation aux propriétés moléculaires.

La difficulté en obtenant des valeurs significatives a priori du ε/k et du σ a mené la plupart des auteurs spécifier les règles qui rapportent ε/k et σ aux paramètres macroscopiques tels que les constantes critiques. Une telle méthode est montrée ci-dessous.

II.9.1.1. Méthode de Chung, et autres (1984, 1988)

Ces auteurs ont employé l'équation (II.9) avec :

$$\frac{\varepsilon}{k} = \frac{T_c}{1.2593} \quad \textbf{II.14}$$

$$\sigma = 0.809 \times {V_c}^{1/3} \quad \textbf{II.15}$$

Où ε/k et $\mathrm{T_c}$ en kelvins, σ en angströms, et V_c en $\mathrm{cm^3/mol}$. Puis, utilisant les équations (II.10) et (II.14).

$$T^* = 1.2593 \times T_r \quad \textbf{II.16}$$

Ω_v dans l'équation (II.9) est trouvé d'équation (II.12) avec T^* défini par l'équation (II.16). Chung, multiplient et autres également le côté droit d'équation (II.9) par un facteur $\mathrm{F_c}$ pour expliquer des formes et des polarités moléculaires des gaz dilués. Leur résultat final peut être exprimé comme :

$$\eta = 40.785 \times \frac{F_c(MT)^{1/2}}{V_C^{2/3}\times\Omega_v} \quad \textbf{II.17}$$

Où η : Viscosité, μP; M : poids moléculaire, g/mol; T : température, K; V_c: volume critique, $\mathrm{cm^3/mol}$.

Ω_v : Collision de viscosité intégrale dans l'équation (II.12) et T^*= $1.2593\mathrm{T_r}$

$$Fc = 1 - 0.2756\omega + 0.059035 \times \mu_r^4 + \kappa \quad \textbf{II.18}$$

Dans l'équation (II.18), ω est le facteur acentrique et κ est une correction spéciale pour les substances fortement polaires telles que des alcools et des acides.

Le μ_r de limite est un moment dipolaire sans dimensions. Quand V_c est en cm^3 /mole, T_c est en les kelvins, et le μ est en les debyes,

$$\mu_r = 131.3 \times \frac{\mu}{(Vc \times Tc)^{1/2}} \quad \textbf{II.19}$$

II.9.1.2. Méthodes d'états de correspondance

D'une équation comme l'équation (II.9), si on s'associe σ^3 avec V_c comme dans l'équation (II.15) et suppose que V_c est proportionnel à RT_c / p_c une viscosité sans dimensions peut être définie :

$$\eta_r = \xi\eta = f(T_r) \quad \textbf{II.20}$$

$$\xi = \left[\frac{(RT_c) \times (N\circ)^2}{M^3 \times p_c^4}\right]^{1/6} \quad \textbf{II.21}$$

Dans des unités de SI, si R= 8314 J / (kmol. K) et $N\circ$ (le nombre d'Avogadro) 6.023×10^{23} $(kmol)^{-1}$ et avec T_c en kelvins, M en kg/kmol et P_c en N/m^2, ξ la viscosité inverse leur unité de m^2 / (N .s).

$$\xi = 0.176 \times \left(\frac{T_c}{M^3 \times P_c^4}\right)^{1/6} \quad \textbf{II.22}$$

Dans unités plus commodes.

ξ: la viscosité inverse réduite en μP^{-1}, T_c en kelvins, M en g/mol et P_c en bars.

L'équation (II.20) a été recommandée par plusieurs auteurs (Flynn & Thodos 1961; Golubev 1959; Malek & Stiel 1972; Mathur & Thodos 1963; Trautz 1931; Yoon & Thodos 1970).

La forme spécifique proposée par Lucas (Lucas 1980; Lucas 1983; Lucas 1984) est illustré ci-dessous.

$$\eta\xi = [0.807 \times T_r^{0.618} - 0.357 \exp(0.449 \times T_r)\, 0.340 \exp(-4.058 \times T_r) + 0.018] F_p^\circ \times F_Q^\circ \quad \textbf{II.23}$$

ξ est défini par l'équation (II.22), η est dans μP, Tr est la température réduite et F_p° et F_Q° sont des facteurs de correction pour représenter la polarité ou des effets quantiques. Obtenir, un moment de dipôle réduit est exigé. Lucas définit cette quantité quelque peu différemment qu'a fait Chung, et d'autres. Dans l'équation (II.19), c'est-à-dire,

$$\mu_r = 525.46 \times \frac{\mu^2 \times p_c}{T_C^2} \quad \textbf{II.24}$$

Où μ en debyes, p_c en bars et T_c en kelvins. Alors les valeurs de F_p° sont trouvées comme :

$$F_p^\circ = 1 \qquad 0 \leq \mu_r < 0.022$$

$$F_p^\circ = 1 + 30.55 \times (0.292 - Z_c)^{1.72} \qquad 0.022 \leq \mu_r < 0.075$$

$$F_p^\circ = 1 + 30.55 \times (0.292 - Z_c)^{1.72} \times |0.96 + 0.1(T_r - 0.7)| \qquad 0.075 \leq \mu_r \quad \textbf{II.25}$$

Le facteur F_Q° est utilisé seulement pour les gaz quantiques He, H_2 et D_2

$$F_Q^\circ = 1.22 \times Q^{0.15}\{1+0.00835\times [T_r - 12)^2]^{1/M} \text{ sign } e(T_r\text{-}12)\} \quad \textbf{II.26}$$

Où Q= 1.38 (He), Q= 0.76 (H_2), Q =0.52 (D_2). Le signe () indique qu'il faudrait utiliser + 1 ou -1 selon si la valeur de l'argument () est plus grande qu'ou moins que le zéro.

L'équation (II.23) est semblable à une équation proposée par Thodos et des collègues (Yoon & Thodos 1970). Il est intéressant de noter que, si $Tr \leq 1$, le f (Tr) entre parenthèses dans l'équation (II.25) est étroitement rapproché par 0.606Tr, c'est-à-dire :

$$\eta\xi \approx (0.606\times T_r) \times F_p^\circ \times F_Q^\circ T_r \leq 1 \quad \textbf{II.27}$$

II.9.1.3. Méthode de Reichenberg (1971, 1979)

Reichenberg (1971, 1979) a proposé une relation alternative d'états de correspondance pour la viscosité à basse pression de gaz des composés organiques.

$$\eta = \frac{M^{1/2}T}{1+\left(\frac{4}{T_c}\right)[1+0.36T_r(T_r-1)^{1/6}} \times \frac{T_r(1+270\mu_r^4)}{T_r+270\mu_r^4} \quad \textbf{II.28}$$

η en μP; M est le poids moléculaire; T est la température; T_c est la température critique, en kelvins; Tr est la température réduite et μ_r est le moment de dipôle réduit défini plus tôt dans l'équation (II.24). Le paramètre a* est défini comme :

$$a^* = \Sigma\, n_i \times C_i \quad \textbf{II .29}$$

La ou n_i représente le nombre de i^{éme} groupes du type et C_i est la contribution de groupe. Le terme $(1 + 4/T_c)$ dans le dénominateur d'Eq. (II.28) peut être négligé à part le traitement de gaz quantiques avec les valeurs basses de T_c.

II.9.2. Viscosité des liquides

Il n'y a aucune base théorique comparable à l'évaluation des viscosités liquides. Ainsi, il est particulièrement souhaitable de déterminer des viscosités liquides des données expérimentales quand de telles données exister. Viswanath et Natarajan (1989) ont édité une compilation des données liquides de viscosité pour plus de 900 composés et énumèrent les constantes qui corrèlent ces données.

Des données liquides de viscosité peuvent également être trouvées en Porc et *al* (1993-1998), Riddick et *al* (1986), Stephan et Lucas (1979), Stephen et Hildwein (1987), Stephan et Heckenberger (1988), Timmermans (1965), et Vargaftik et *al* (1996). Données pour l'électrolyte aqueux des solutions peuvent être trouvées en Kestin et Shankland (1981), Lobo (1990), et Zaytsev et Aseyev (1992). Les tabulations des constantes ont été édité dans Daubert, et *al* (1997), Duhne

(1979), van Velzen et *al* (1972), et Yaws (1995, 1995a) qui permettent des évaluations des viscosités liquides.

Quand ces constantes sont dérivées des données expérimentales elles peuvent être employées avec confiance, mais parfois (Yaws 1995, 1995a) elles sont basées sur des viscosités prévues, elles devraient être employées seulement avec prudence. Phase liquide des valeurs de viscosité peuvent également être trouvées dans le doyen (1999), le Lide (1999), et le Perry et Green (1997).

Les méthodes d'évaluation pour la viscosité liquide à basse température utilisent souvent les paramètres structuraux ensitive qui sont valides seulement pour certaine série homologue ou sont trouvés des contributions de groupe. Nous présentons deux telles méthodes dans cette section. Nous décrivons également une technique qui utilise des concepts d'états de correspondance. Aucune des trois méthodes considérées n'est particulièrement fiable.

II.9.2.1. Méthodes d'Orrick et d'Erbar (1974)

Cette méthode utilise une technique de contribution de groupe pour estimer A et B dans l'équation (II.30).

$$\ln \frac{\eta_L}{\rho_L \times M} = A + \frac{B}{T} \qquad \textbf{II.30}$$

Où η_L= Viscosité liquide, cP

ρ_L = Densité liquide à 20℃, g/cm^3

M= Poids moléculaire, g/mol

T= Température, K

A, *B* sont les distributions des groupes.

Orrick et Erbar ont examiné cette méthode pour 188 liquides organiques. Les erreurs ont varié considérablement, mais elles ont rapporté une déviation moyenne de 15%. Pour des liquides cela ont un point d'ébullition normal en-dessous 20 °C, emploient la valeur du ρ_L est 20 °C; pour les liquides dont le point de congélation est au-dessus 20 °C, ρ_L au point de fusion devrait être utilisé. Depuis ρ_L dans l'équation (II.30) la température du liquide est 20 °C.

II.9.2.2. Méthode de Sastri-Rao (1992)

Dans cette méthode, la viscosité liquide pure est calculée avec l'équation

$$\eta = \eta_B \times P_{vp}^{-N} \qquad \textbf{II .31}$$

P_{vp} est la pression de vapeur aux atmosphériques et η_B est la viscosité au point d'ébullition normal, T_b dans mPa.s. Au-dessous de T_b, Sastri et Rao déterminent P_{vp} avec l'équation :

$$\ln P_{vp} = (4.5398 + 1.0309 \ln T_b) \times \left(1 - \frac{(3-2\times T/T_b)^{0.19}}{T/T_b} - 0.38 \times (3 - 2 \times T/T_b)^{0.19} \ln (T/T_b)\right) \quad \textbf{II.32}$$

L'équation (II.32) devrait être employée seulement quand T < T_b. L'équation (II.32) n'est pas nécessairement l'équation la plus précise pour des prévisions de pression de vapeur mais devrait être employée avec l'équation (II.31) parce que les contributions de groupe employées pour estimer η_B et N ont été déterminées quand P_{vp} a été calculé avec l'équation (II.32). η_B est déterminé avec l'équation

$$\eta_B = \sum \Delta\eta_B + \sum \Delta\, \eta_{Bcor} \quad \textbf{II.33}$$

N est déterminé de

$$N = 0.2 + \sum \Delta N + \sum \Delta\, N_{cor} \quad \textbf{II.34}$$

II.9.2.3. Méthodes de Przezdziecki et de Sridhar (1985)

Dans cette technique, les auteurs proposent d'employer l'équation Hildebrand-modifiée de Batschinski (Batschinski 1913; Hildebrand 1971; Vogel & Weiss 1981).

$$\eta_L = \frac{V_o}{E(V-V_o)} \quad \textbf{II.35}$$

Où η_L= Viscosité liquide, cP

V = Volume de molaire liquide, cm^3/mol

Et les paramètres E et V_o est défini ci-dessous.

$$E = -1.12 + \frac{V_c}{12.94+0.10\times M-0.23\times P_c+0.0424\times T_{fp}-11.58\times(T_{fp}/T_c)} \quad \textbf{II.36}$$

$$V_o = 0.0085 \times \omega \times T_c - 2.02 + \frac{V_m}{0.342\times(T_{fp}/T_c)+0.894} \quad \textbf{II.37}$$

Où T_c = Température critique, K

P_c = Pression critique, bar

V_c = Volume critique, cm^3/mol

M = Poids moléculaire, g/mol

T_{fp} = Point de congélation, K

ω = Facteur acentrique

V_m = Volume molaire de liquide à T_{fp}, cm^3/mol.

Ainsi, pour employer l'équation (II.35), on doit avoir des valeurs pour T_c, P_c, V_c, T_{fp}, ω et V_m en plus du volume molaire liquide V à la température d'intérêt. Les auteurs recommandent que la V_m et le V soient estimés à partir de T_{fp} et de T par les méthodes de Gunn-Yamada (1971). Dans la méthode de Gunn-Yamada, une valeur précise de V est exigée dans la température ambiante de

l'applicabilité d'équation (II.35). Nous définissons ce point de repère comme V^R au T^R ; alors à toute autre température T,

$$V(T) = \frac{f(T)}{f(T^R)} \times V^R \quad \textbf{II .38}$$

Où

$$f(T) = H_1 (1 - \omega \times H_2) \quad \textbf{II.39}$$

$$H_1 = 0.33593 - 0.33953 \times T_r + 1.51941 \times T_r^2 - 2.02512 \times T_r^3 \quad \textbf{II.40}$$

$$H_2 = 0.29607 - 0.09045 \times T_r - 0.04842 \times T_r^2 \quad \textbf{II.41}$$

II.10. Conclusion

Au terme de ce chapitre, nous pouvons conclure que; le coefficient de transport, «la viscosité dynamique», bien que nécessaire pour l'étude des phénomènes de transport, les démarches de leur détermination demeurent une opération tant sur le plan théorique que sur le plan expérimental. Par voie de conséquence, une recherche dans le sens d'apporter une amélioration à la façon de leur estimation est plus que nécessaire au vu de leurs importances.

Cette préoccupation fera l'objet du chapitre suivant, où une nouvelle technique basée sur les réseaux de neurones artificiels, est mise à l'épreuve.

III.1. Introduction

La théorie cinétique des gaz a permis d'établir des formules pour leurs calculs dont l'application certes valable, mais très astreignante parce qu'elles comportent plusieurs paramètres souvent très difficile à rassembler. C'est précisément dans ce contexte, que nous avons voulu apporter une alternative en proposant cette étude, dont l'objectif, est la mise en œuvre d'une méthode pratique de calcul basée sur les réseaux de neurones artificiels de type multicouche (MLP) et en utilisant des données usuelles souvent disponibles dans la littérature, afin d'approcher ces paramètres avec une erreur acceptable.

Les réseaux de neurones multicouches de type non bouclés, dont l'apprentissage est supervisé constituent une technique relativement récente de modélisation (boite noire) qui a montré ces performances. Il suffit d'avoir un ensemble de variables mesurées et d'un ensemble de mesures d'une grandeur de nature quelconque et en supposant qu'il existe une relation suffisamment régulière entre les variables et la grandeur alors, il est possible d'approximer cette relation par un réseau de neurones non bouclé (Dreyfus *et al* 2002). C'est parfaitement le cas pour les coefficients de transport.

Dans ce chapitre nous présentons les résultats préliminaires de la modélisation de la viscosité des gaz par les réseaux de neurones artificiels. Ce chapitre est divisé en trois parties : la première partie concerne l'élaboration de la base de données. Dans la deuxième partie on s'intéresse à la modélisation neuronale de la viscosité des gaz. Dans la troisième partie on étudie la contribution des variables d'entrée sur la viscosité (analyse de sensibilité). Enfin on conclue ce chapitre en analysant et interprétant les différents résultats obtenus.

III.2. Méthodologie de calcul

III.2.1. Elaboration de la base de données

Une des étapes les plus importantes dans le développement du modèle neuronal suggéré est la disponibilité des données expérimentales fiables pour la formation du modèle. Ces données incluent des données éditées expérimentales sur la température critique, le volume critique, le poids moléculaire et la pression critique des composants aussi bien que la viscosité aux différentes températures. En cette étude, 150 données expérimentales ont été rassemblées de différentes littératures.

Dans le but de constituer une base de données fiable et représentative, nous avons suivi une méthodologie, inspirée de l'étude bibliographique (Dreyfus *et al* 2002), qui revêt les étapes suivantes :

• Sélection des entrées du modèle neuronal;

• Collecte des données;

• Mise en forme des données;

• Normalisation des données.

Les composés utilisés dans cette étude sont présenté dans le tableau III.1.

Tableau III.1. Liste des composés utilisés dans cette étude (Poling *et al* 2001 ; Kestin *et al* 1971).

Numéro	**Composés**	**17**	Éthanol
1	Acide acétique	**18**	Éther diéthylique
2	Acétylène	**19**	n-hexane
3	Ammoniaque	**20**	Méthane
4	Benzène	**21**	Acétate méthylique
5	Bromotrifluoromethane	**22**	Méthanol
6	Isobutane	**23**	Chlorure méthylique
7	n-butane	**24**	Azote
8	1-Butene	**25**	Isopropanol
9	Anhydride carbonique	**26**	Propylène
10	tétrachlorure de carbone	**27**	Anhydride sulfureux
11	Chlore	**28**	Toluène
12	Chloroforme	**29**	Hélium
13	Cyclohexane	**30**	Néon
14	Éther diméthylique	**31**	Argon
15	Éthane	**32**	Krypton
16	Acétate éthylique	**33**	Xénon

III.2.1.1. Choix des entrées et sorties

La sélection des entrées consiste à déterminer les variables pertinentes par rapport à la grandeur à modéliser. Elle vise deux points essentiels (Dreyfus *et al* 2002) :

• Réduction de la dimension de l'espace de représentation des variables du modèle,

• Elimination des entrées qui n'ont pas ou peu d'influence sur la sortie.

Il est important de mentionner que chaque ajout d'une variable encombre le modèle et entraîne une multiplication des paramètres du réseau. Raison pour laquelle, la représentation des entrées doit contenir tous les facteurs pertinents par rapport à la grandeur à modéliser.

On a choisi dans cette étude de travailler avec les entrées et la sortie illustrée dans le tableau III.2. Le tableau III.3 résume les minimums et maximum des paramètres choisis.

Tableau III.2. Liste des paramètres des entrées et de sortie.

	Symbole	Nom
Entrées	M	Masse molaire
	T	Température
	T_c	Température critique
	P_c	Pression critique
	V_c	Volume critique
Sortie	η	Viscosité

Tableau III.3. Liste des minimums et maximums des paramètres choisis.

Propriétés	Minimum	Maximum
T (K)	260	973
T_c (K)	5.19	594.45
M (g/mol)	4.003	153.82
V_c(cm^3/mol)	41.7	368
P_c (bar)	2.27	113.53
η (μP)	72.3	698.58

III.2.1.2. Collecte des données

Une fois les entrées pertinentes du modèle sont sélectionnées, l'objectif de cette étape est de les recueillir. La base de données ainsi constituée doit répondre à deux exigences (Dreyfus *et al* 2002) :

- Contenir le maximum d'échantillons ou d'exemples (expérimentaux);
- Etre représentative des données susceptibles d'intervenir en phase d'utilisation du modèle neuronal.

Le tableau III.4 récapitule l'ensemble de données d'entrée utilisé dans le développement du modèle neuronal pour différents composés.

Tableau III.4. Liste des données d'entrée utilisée dans cette étude (Poling *et al* 2001; Kestin *et al* 1971).

Numéro	Composés	T_c	M	V_c	P_c
1	Acide acétique	594.45	60.053	171	57.90
2	Acétylène	308.30	26.038	112.2	61.14
3	ammoniaque	405.40	17.031	72.47	113.53
4	Benzène	562.05	78.114	256	48.95
5	Bromotrifluoromethane	340.15	148.910	246	39.70
6	Isobutane	407.85	58.123	262.70	36.40
7	n-butane	425.12	58.123	255	37.96
8	1- Butane	419.50	56.108	218	40.20
9	Anhydride carbonique	304.12	44.010	94.07	73.74
10	Tétrachlorure de carbone	556.30	153.822	276	45.57
11	chlore	417.00	70.905	124	77.00
12	chloroforme	536.50	119.377	240	55
13	cyclohexane	553.50	84.161	308	40.73
14	Ether diméthyliqye	400.10	46.069	170	54.00
15	Ethane	305.32	30.070	145.5	48.72
16	Acétate éthyliqye	523.20	88.106	286	38.30
17	Ethanol	513.92	46.069	167	61.48
18	Ether diéthylique	466.70	74.123	280	36.40
19	n-hexane	507.60	86.177	368	30.25
20	Méthane	190.56	16.043	98.90	45.99
21	Acétate méthylique	506.80	74.079	46.90	46.90
22	Méthanol	512.64	32.042	188	80.97
23	Chlorure méthylique	416.20	50.488	143.00	66.80
24	Azote	126.20	28.014	90.10	33.98
25	Isopropanol	508.30	60.096	220	47.62
26	Propylène	364.90	42.081	184.60	46.00
27	Anhydride sulfureux	430.80	64.065	122	78.84
28	Toluène	591.75	92.141	316.00	41.08
29	Hélium	5.19	4.003	57.30	2.27
30	Néon	44.4	20.18	41.70	27.60
31	Argon	150.86	39.948	74.7	48.98
32	Krypton	209.4	83.8	91.2	55.00
33	Xénon	289.94	131.29	118	58.4

III.2.1.3. Mise en forme des données

Dans cette étape, les 150 données expérimentales rassemblées ont été divisées en trois sous-ensembles :

- Un ensemble pour l'apprentissage (70%);
- Un ensemble pour la phase de validation (15%);
- Un ensemble pour le test (15%).

III.2.1.4. Normalisation de la base de données

La normalisation est une étape importante dans le processus de l'élaboration des données. Elle devient dans la plus part des cas, une exigence pour les matrices des inputs, du fait qu'on utilise souvent des fonctions de transfert bornées de type sigmoïdes dans les modélisations statiques.

Dans notre travail, on a utilisé la base de données qui est représentés en 150 lignes et 6 colonnes (entrées et sortie). Les valeurs numériques ont été normalisées afin d'améliorer l'optimisation. La normalisation se fait par ligne (***mapminmax MATLAB version : 7.8***), chaque paramètre des entrées et de sortie (x_i) est normalisé (x_{in}) par l'expression suivante:

$$x_{in} = \frac{2\{x_i - min(x_i)\}}{\{max(x_i) - min(x_i)\}} - 1 \qquad \textbf{III.1}$$

III.2.2. Conception et optimisation

La conception d'un modèle neuronal consiste à faire une étude d'évaluation des éléments constitutifs du réseau en fonction de la performance de modélisation souhaitée. Elle vise à fixer les éléments suivants :

1. Le type du réseau;

2. Le nombre de couches cachées;

3. Le nombre de neurones dans les couches;

4. La fonction de transfert des neurones;

5. L'algorithme d'apprentissage.

Cette conception et l'optimisation du réseau a était réalisé par le toolbox du réseau de neurones (Neural network toolbox) en MATLAB. Le nombre de neurones dans la couche cachée à été varié de 1 à 20.

On a choisie comme fonction de transfert la fonction tangente sigmoïde « tansig » pour la couche cachée et la fonction identité « purelin » pour la couche de sortie et comme algorithme

d'apprentissage l'algorithme de Levenberg-Marquardt « trainlm ». (Levenberg 1944; Marquardt 1963; Hagan & Menhaj 1994).

III.2.3. Evaluation de la performance du réseau de neurones

La performance du réseau de neurones a été évaluée par la mesure de la racine de l'erreur quadratique moyenne (REQM), l'erreur absolue moyenne (EAM) et le coefficient de détermination (R^2) :

$$ERAM(\%) = 100\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{|\eta^{exp} - \eta^{cal}|}{\eta^{exp}} \quad \textbf{III.2}$$

$$REQM = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sqrt{(\eta^{exp} - \eta^{cal})} \quad \textbf{III.3}$$

Avec : N est le nombre de données et η^{exp}, η^{cal} sont respectivement les valeurs expérimentales et prévues de la viscosité.

III.3. Structure du RNSO obtenu

La structure de base retenue est un perceptron multicouche à trois couches : une couche d'entrée, une couche cachée, une couche de sortie (Figure III.1). Le tableau III.5 récapitule les différents éléments structurels du réseau de neurones optimal.

Tableau III.5. Structure des RNSO utilisés dans la modélisation de la viscosité.

Type du RN	**Couche d'entrée**	**Couche cachée**		**Couche de sortie**		**Algorithme d'apprentissage**
	Nombre de neurones	Nombre de neurones	Fonction d'activation	Nombre de neurones	Fonction d'activation	
Perceptron multicouche	5	10	Tangente sigmoïde « tansig »	1	Identité « purelin »	Levenberg-Marquardt

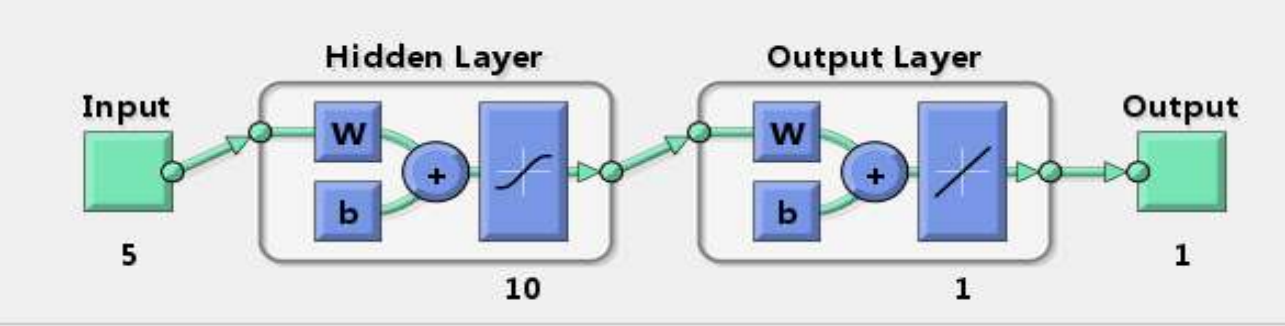
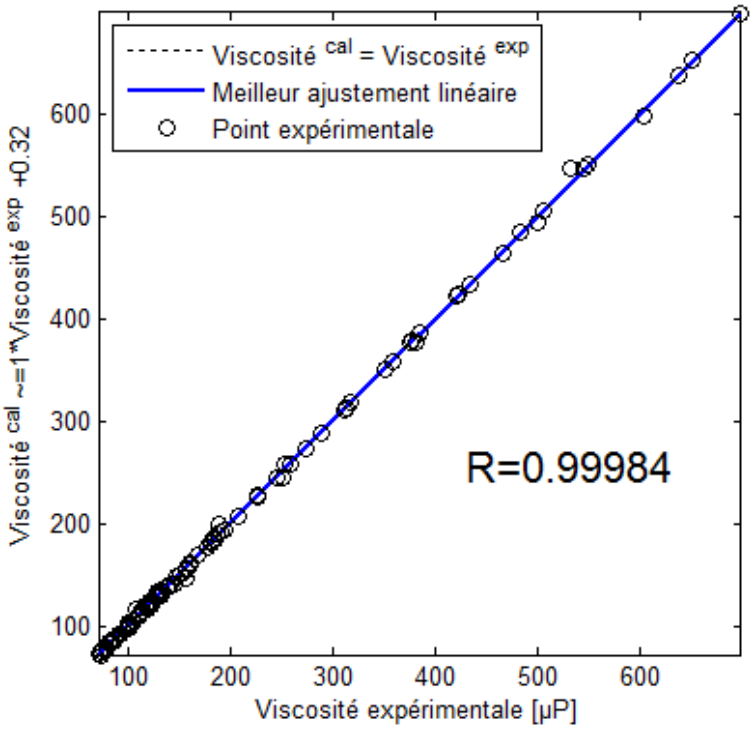
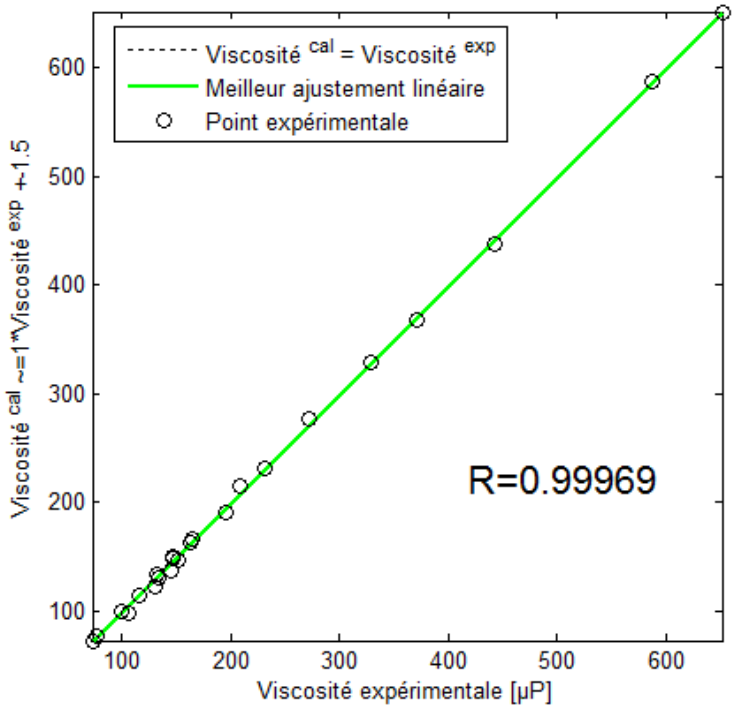


Figure III.1. Schéma simplifié de l'architecture du RNSO.

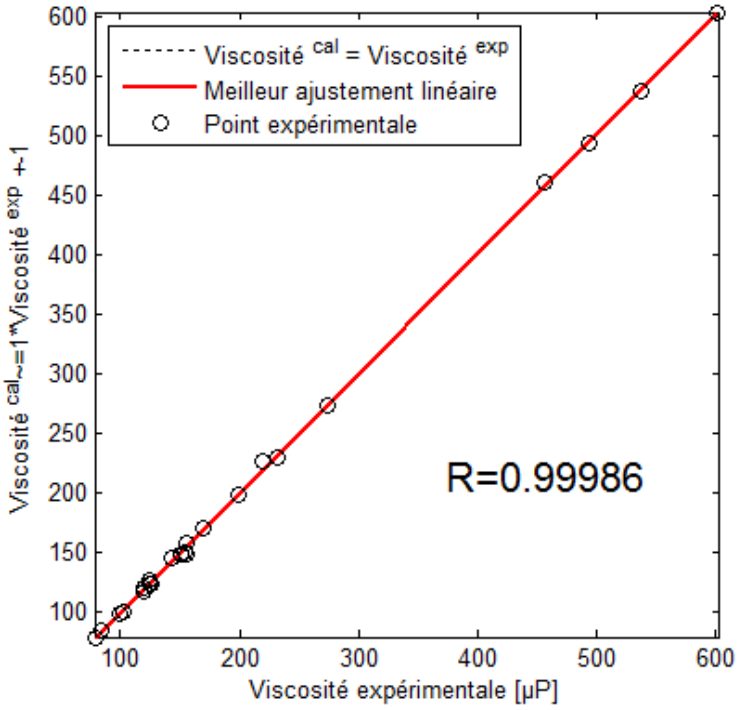
La validation des valeurs calculées avec les valeurs expérimentales pour la base d'apprentissage, de test et de validation est schématisée dans la figure III.2. Le tableau III.6 récapitule les performances du RNSO obtenu en termes de la REQM, ERAM et R^2.



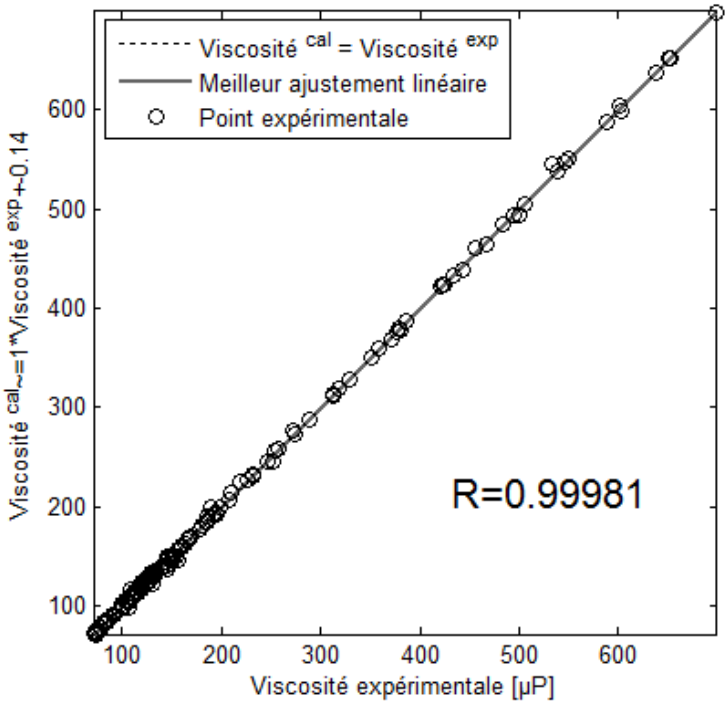
(a)



(b)



(c)



(d)

Figure III.2. La validation des valeurs calculées avec les valeurs expérimentales : **(a)** pour la base d'apprentissage, **(b)** pour la base de validation, **(c)** pour la base de test, **(d)** pour toute la base.

Tableau III.6 Récapitule les performances du RNSO obtenu en termes de la REQM, ERAM et R^2.

Performances	***ERAM(%)***	***REQM***	R^2
Apprentissage	1.6777	0.0583	0.99968
Validation	2.9398	1.2976	0.99938
Test	1.9610	0.1518	0.99972
Tout	0.1593	1.9277	0.99962

III.4. Comparaison entre le modèle neuronale et les modèle théorique

Toujours dans le but de mesurer les performances du modèle neuronale conçu, nous l'avons confronté aux modèles proposés dans la littérature (voir chapitre II).

L'histogramme de la figure III.3 Présente un classement selon l'erreur relative absolue moyenne et la racine de l'erreur quadratique moyenne commise par les différents modèles exposés.

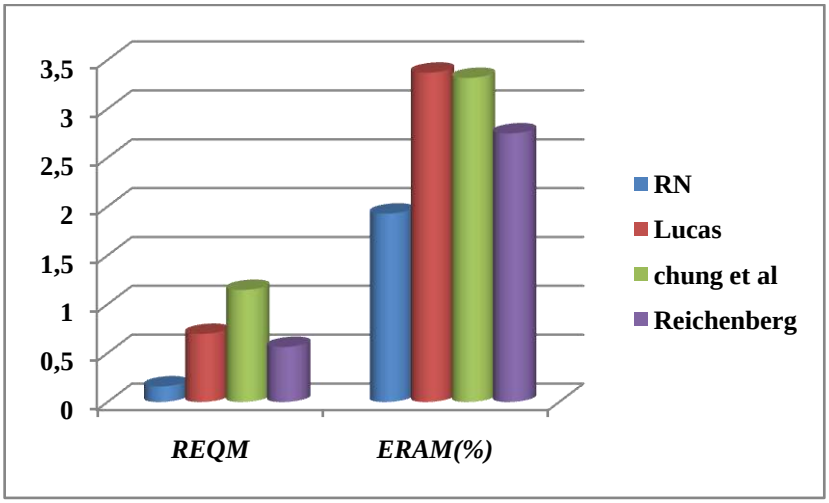


Figure III.3. Classement des modèles selon les erreurs.

La comparaison entre les modèles théoriques et le modèle neuronale fait a partir de classement de l'erreur relative absolue moyenne et la racine de l'erreur quadratique moyenne, nous avons observé que le modèle neuronale possède des minimums erreurs que les autres modèles théoriques (Lucas, Chung et al et Reichenberg), donc nous avons trouvé que le modèle neuronale est très mieux et très précise que les modèles théoriques.

III.5. Analyse de sensibilité

Cette technique est très utilisée pour l'analyse de contribution des variables, elle consiste à éliminer les entrées peu ou moins influentes sur la sortie (viscosité). Elle se base sur le calcul de l'impotence relative des différentes variables d'entrées en utilisant la méthode des « poids de connexion » (Olden *et al* 2004).

Cette méthode nécessite la partition des poids de connexion en :

- Poids de connexion entrée –cachée (input-hidden) IH (Tableau III.7).
- Poids de connexion cachée- sortie (hidden-output) HO (Tableau III.7).

Tableau III.7. Poids de connexion entrée-cachée, cachée-sortie.

Couche cachée						**Couche de sortie**	
Matrice des poids					**Vecteur des biais**	**Vecteur des poids**	**Vecteur des biais**
0,6859	-1,1673	-1,6851	-0,8176	1,6747	-0,3843	-2,1642	0.6189
1.5412	-1,0661	-1,1007	-1,3647	-3,7279	-0,2197	3,2751	
0,5707	-2,9118	-0,3102	0,7712	-3,2754	-0,0372	0,5690	
-0.3030	-0.0572	-0.5005	2.1849	-0.3808	-1.2971	2.2831	
0,5312	-2,5403	0,9536	0,6845	1,8715	0,9187	0,5070	
0,7689	-1,1307	-2,1070	-0,7761	-1,3818	0,1866	-2,0099	
1,2570	-1,9703	2,8401	-1,1878	1,7817	0,1394	2,4851	
-0,5369	2,4992	-0,6658	-0,1547	-1,3338	0,5663	-0,5962	
0,7483	0,1496	-0,6332	-0,1354	-1,0029	0,7236	1,1078	
-0,8503	4,5719	-2,0117	2,5796	0,7544	-0,3636	4,9052	

Le processus de calcul est comme suit :

1. Calcul de l'importance de chaque neurone d'entrée (Tableau III.8)
2. Calcul de l'importance relative (Tableau III.9)

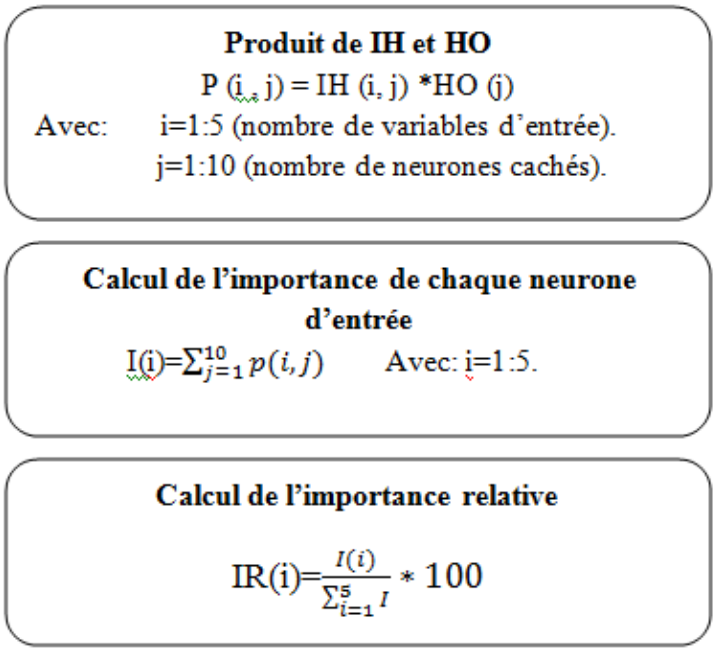


Figure III.4. Organigramme de calcul de l'analyse de sensibilité.

Tableau III.8. Importance individuelle.

Entrées	Importance individuelle
T (K)	1,257
T_c (K)	2,452
M (g/mol)	1,943
V_c (cm^3/mol)	1,708
P_c (bar)	2,639

Tableau III.9. Importance relative.

Entrées	Importance relative
T (K)	12,574
T_c (K)	24,524
M (g/mol)	19,435
V_c (cm^3/mol)	17,081
P_c (bar)	26,387

La figure III.5 illustre l'importance des entrées sur la viscosité, on constate que la température, la température critique, la masse moléculaire, le volume critique et la pression critique sont influencent sur la viscosité. La figure III.6 illustre l'influence de chaque entrée sur la viscosité.

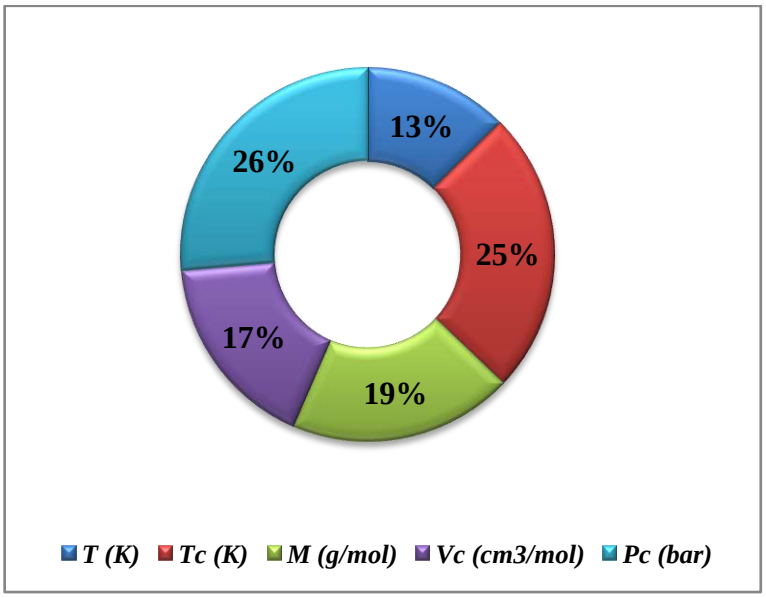
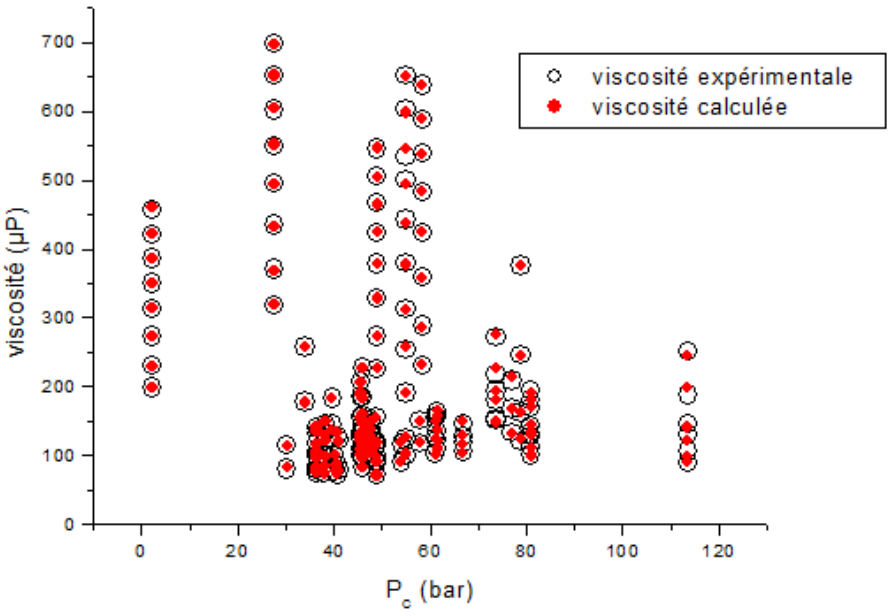
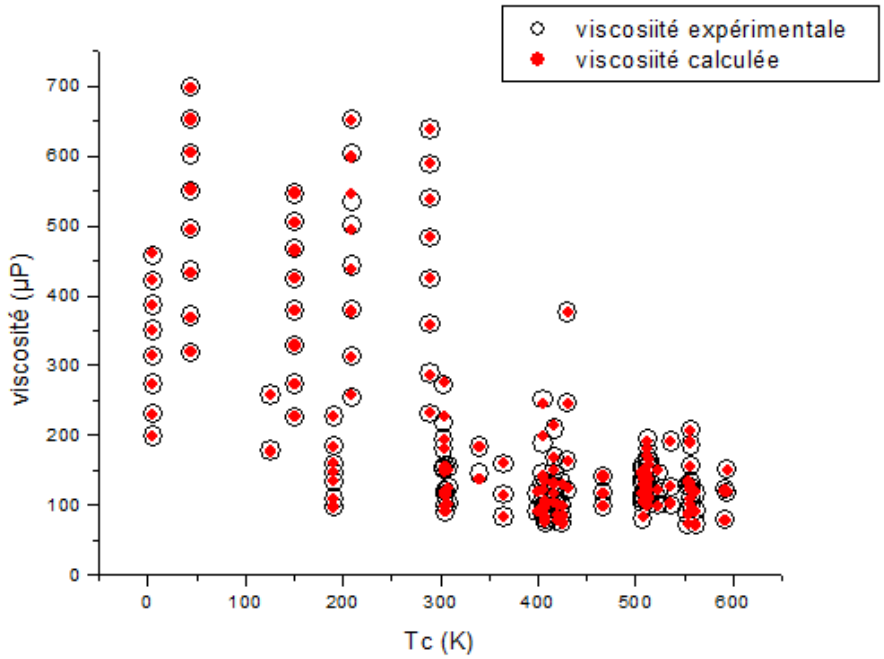


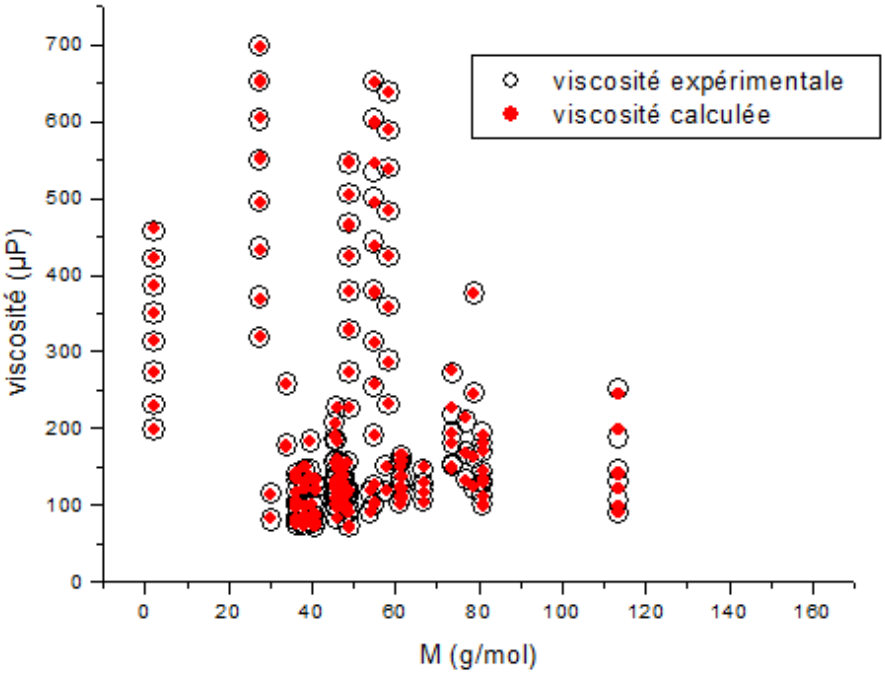
Figure III.5. Influence des entrées sur la viscosité.



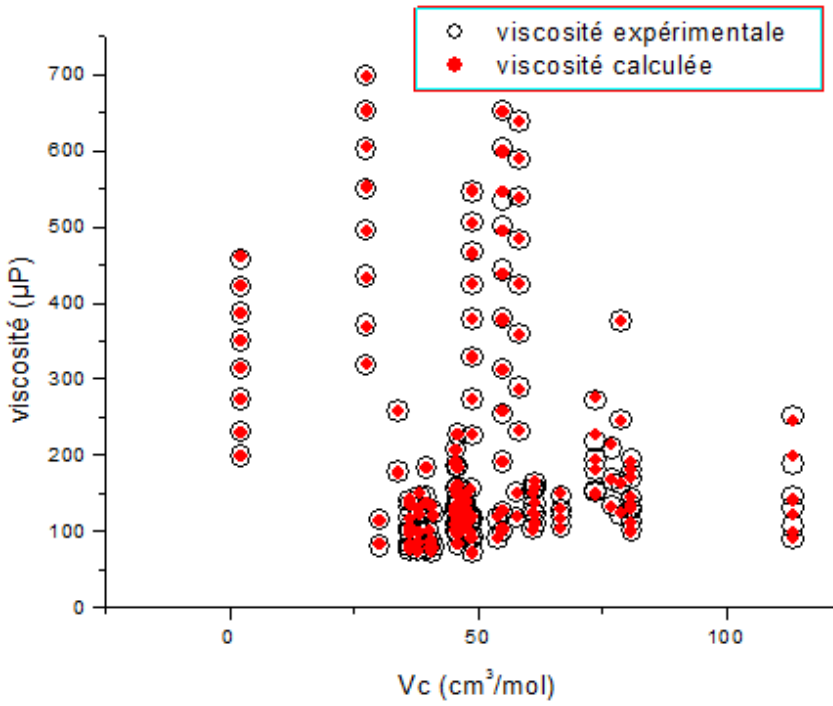
(a)


viscosiité expérimentale
viscosiité calculée
viscosité (µP)
Tc (K)
0
100
200
300
400
500
600
700

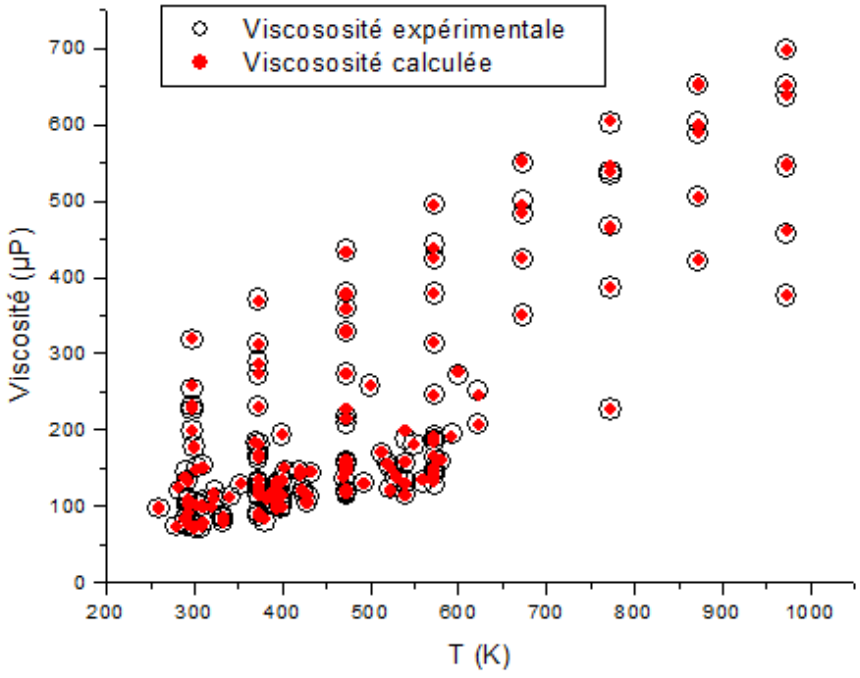
(b)


viscosité expérimentale
viscosité calculée
viscosité (µP)
M (g/mol)
0
20
40
60
80
100
120
140
160
200
300
400
500
600
700

(c)



(d)



(e)

Figure III.6. Influence de chaque entrée sur la viscosité. **(a)** : la pression critique, **(b)** : la température critique, **(c)** : la masse moléculaire, **(d)** : le volume critique et **(e)** : la température sur la viscosité.

III.6. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons abordé le problème de prédiction de la viscosité des gaz, en utilisant le toolbox de RN en MATLAB. Nous avons montré dans ce travail qu'il est possible de relier la viscosité à la pression critique, la température critique, la masse moléculaire, le volume critique et la température. La comparaison du RNSO obtenu avec les modèles de Chung, Lucas et de Reichenberg a démontrée la supériorité de prédiction des RN.

L'analyse de sensibilité nous a permis de connaître les entrées qui ont une influence sur la viscosité. Par l'utilisation de la méthode de poids de connexion on a trouvé que tous les paramètres (la température, la température critique, la pression critique, le volume critique et la masse moléculaire) sont influents sur la viscosité.

IV.1. Introduction

Le calcule de la viscosité des liquides a permis d'établir des formules pour leurs calculs dont l'application certes valable, mais très astreignante parce qu'elles comportent plusieurs paramètres souvent très difficile à rassembler. C'est précisément dans ce contexte, que nous avons voulu apporter une alternative en proposant cette étude, dont l'objectif, est la mise en œuvre d'une méthode pratique de calcul basée sur les réseaux de neurones artificiels de type multicouche (MLP) et en utilisant des données usuelles souvent disponibles dans la littérature, afin d'approcher ces paramètres avec une erreur acceptable.

Les réseaux de neurones multicouches de type non bouclés, dont l'apprentissage est supervisé constituent une technique relativement récente de modélisation (boite noire) qui a montré ses performances. Il suffit d'avoir un ensemble de variables mesurées et d'un ensemble de mesures d'une grandeur de nature quelconque et en supposant qu'il existe une relation suffisamment régulière entre les variables et la grandeur alors, il est possible d'approximer cette relation par un réseau de neurone non bouclé (Dreyfus *et al* 2002). C'est parfaitement le cas pour les coefficients de transport.

Dans ce chapitre nous présentons les résultats préliminaires de la modélisation de la viscosité des liquides par les réseaux de neurones artificiels. Ce chapitre est divisé en trois parties : la première partie concerne l'élaboration de la base de données. Dans la deuxième partie on s'intéresse à la modélisation neuronale de la viscosité des liquides. Dans la troisième partie on étudie la contribution des variables d'entrée sur la viscosité (analyse de sensibilité). Enfin on conclu ce chapitre en analysant et interprétant les différents résultats obtenus.

IV.2. Méthodologie de calcul

IV.2.1. Elaboration de la base de données

Une des étapes les plus importantes dans le développement du modèle neuronal suggéré est la disponibilité des données expérimentales fiables pour la formation du modèle. Ces données incluent des données éditées expérimentales sur la température critique, le volume critique, le poids moléculaire et la pression critique des composants aussi bien que la viscosité aux différentes températures. En cette étude, 160 données expérimentales ont été rassemblées de différentes littératures.

Dans le but de constituer une base de données fiable et représentative, nous avons suivi une méthodologie, inspirée de l'étude bibliographique (Dreyfus *et al* 2002), qui revêt les étapes suivantes :

- Sélection des entrées du modèle neuronal;
- Collecte des données;
- Mise en forme des données;
- Normalisation des données.

Les composés utilisés dans cette étude sont présenté dans le tableau IV.1.

Tableau IV.1. Liste des composés utilisés dans cette étude (Poling *et al*. 2001 ; Kestin *et al* 1971).

Numéro	Composés	**27**	Formate éthylique
1	Acétone	**28**	n-heptane
2	Acide acétique	**29**	n-hexane
3	Aniline	**30**	Isobutane
4	Benzène	**31**	Alcool d'isopropyle
5	Brome	**32**	Méthane
6	n-butane	**33**	Méthanol
7	1-Butane	**34**	Mesitylène
8	n-alcool butylique	**35**	2- méthylbutane
9	tétrachlorure de carbone	**36**	2,2 méthylbutane
10	Chlorobenzène	**37**	2,3 méthylbutane
11	Chloroforme	**38**	Méthylcyclohexane
12	Cyclopentane	**39**	2-méthylheptane
13	Cyclopentene	**40**	3-méthyl hexane
14	Cyclohexane	**41**	Nonane
15	Décane	**42**	1-nonène
16	2,3 –diméthylpentane	**43**	Octène
17	2,4 –diméthylpentane	**44**	n-pentane
18	2,2 –diméthylpropane	**45**	Phénol
19	Ethane	**46**	Propane
20	Chlorure d'éthylène	**47**	Alcool propylique
21	Alcool éthylique	**48**	Toluène
22	Acétate éthylique	**49**	Undecane
23	Benzène éthylique	**50**	Eau
24	Bromure éthylique	**51**	o-xylène
25	Ethylène	**52**	m-xylène
26	Ether éthylique	**53**	p-xylène

IV.2.1.1. Choix des entrées et sorties :

La sélection des entrées consiste à déterminer les variables pertinentes par rapport à la grandeur à modéliser. Elle vise deux points essentiels (Dreyfus *et al* 2002) :

• Réduction de la dimension de l'espace de représentation des variables du modèle,

• Elimination des entrées qui n'ont pas ou peu d'influence sur la sortie.

Il est important de mentionner que chaque ajout d'une variable encombre le modèle et entraîne une multiplication des paramètres du réseau. Raison pour laquelle, la représentation des entrées doit contenir tous les facteurs pertinents par rapport à la grandeur à modéliser.

On a choisi dans cette étude de travailler avec les entrées et la sortie illustrée dans le tableau IV.2. Le tableau IV.3 résume les minimums et maximum des paramètres choisis.

Tableau IV.2. Liste des paramètres des entrées et de sortie.

	Symbole	**Nom**
Entrées	M	Masse molaire
	T	Température
	T_c	Température critique
	P_c	Pression critique
	V_c	Volume critique
	T_{fp}	Point de congélation
Sortie	η	Viscosité

Tableau IV.3. Liste des minimums et maximums des paramètres choisis.

Propriétés	Minimum	Maximum
T (K)	88	473
T_c (K)	150.86	699
M (g/mol)	16.043	156.31
V_c (cm^3/mol)	47.57	689
T_{fp} (K)	82.6	314.05
P_c (bar)	19.8	220.64
η (cP)	0.0998	14.3

IV.2.1.2. Collecte des données

Une fois les entrées pertinentes du modèle sont sélectionnées, l'objectif de cette étape est de les recueillir. La base de données ainsi constituée doit répondre à deux exigences (Dreyfus *et al* 2002) :

• Contenir le maximum d'échantillons ou d'exemples (expérimentaux);

• Etre représentative des données susceptibles d'intervenir en phase d'utilisation du modèle neuronal.

Le tableau IV.4 récapitule l'ensemble de données d'entrée utilisé dans le développement du modèle neuronale pour différents composés.

Tableau IV.4. Liste des données d'entrée utilisée dans cette étude (Poling *et al*. 2001 ; Kestin *et al* 1971).

Numéro	Composés	T_c	M	V_c	P_c	T_{fp}
1	Acétone	58,08	508,1	47	209	178,5
2	Acide acétique	60,053	594,45	57,9	171	289,77
3	Aniline	93,123	699	53,1	273, 9	266,85
4	Benzène	78,114	562,05	48,95	256	278,68
5	Brome	39,948	150,86	48,98	47,57	83,8
6	n-butane	58,123	425,12	37,96	255	134,79
7	1-Butane	56,108	419,5	40,2	240,8	87,79
8	n-alcool butylique	74,123	563,03	44,23	275	183,35
9	tétrachlorure de carbone	153,822	556,3	45,57	276	250
10	Chlorobenzène	112,558	632,4	45,2	308	227,9
11	Chloroforme	119,377	536,5	55	240	209,74
12	Cyclopentane	70,134	511,6	45,08	260	179,28
13	Cyclopentene	68,119	506,5	48	245	138,05
14	Cyclohexane	84,161	553,5	40,73	308	279,69
15	Décane	142,285	617,7	21,1	624	243,49
16	2,3 –diméthylpentane	100,204	537,3	29,1	393	82,6
17	2,4 –diméthylpentane	100,204	519,7	27.4	417.5	153.94

18	2,2 –diméthylpropane	72,15	433,75	31,99	303,2	256,58
19	Ethane	30,07	305,32	48,72	145,5	90,35
20	Chlorure d'éthylène	64,514	460,3	53	199	134,82
21	Alcool éthylique	46,069	513,92	61,48	167	159,05
22	Acétate éthylique	88,106	523,2	38,3	286	189,55
23	Benzène éthylique	106,167	617,15	36,09	374	178,18
24	Bromure éthylique	108,966	503,8	62,3	214,9	154,55
25	Ethylène	28,054	282,34	50,41	131,1	103,99
26	Ether éthylique	74.123	466.7	36.4	280	156
27	Formate éthylique	74,079	508,5	47,4	229	193,55
28	n-heptane	100,204	540,2	27,4	428	182,59
29	n-hexane	86,177	507,6	30,25	368	177,84
30	Isobutane	58,123	407,85	36,4	262,7	183,65
31	Alcool d'isopropyle	60,096	508,3	47,62	220	183,65
32	Méthane	16,043	190,56	45,99	98,6	90,69
33	Méthanol	32,042	512,64	80,97	118	175,49
34	Mesitylène	120,194	637,3	31,27	430	228,43
35	2- méthylbutane	72,15	460,39	33,81	308,3	113,26
36	2,2 méthylbutane	86,177	488.7	30.8	459.1	173.33
37	2,3 méthylbutane	86.177	499,9	31,3	357,6	144,35
38	Méthylcyclohexane	98,188	572,19	34,71	368	146,56
39	2-méthylheptane	114,231	559,6	24,8	488,2	164,13
40	3-méthyl hexane	100,204	535,2	28,1	404	149,35
41	Nonane	128,258	594,6	22,9	555	219,66
42	1-nonène	126,242	594	23,3	526	191,8
43	Octène	112,215	567	26,8	468	171,46
44	n-pentane	72,15	469,7	33,7	311	143,43
45	Phénol	94,113	694,25	61,3	229	314,05
46	Propane	44,097	369,83	42,48	200	91,45
47	Alcool propylique	60,096	536,78	51,75	219	147
48	Toluène	92,141	591,75	41,08	316	178,16
49	Undecane	156,312	639	19,8	689	247,57
50	Eau	18,015	647,14	220,64	55,95	273,15
51	o-xylène	106,167	630,3	37,32	370	247,97
52	m-xylène	106,167	617	35.41	375	225.28
53	p-xylène	106,167	617	35.41	375	225.28

IV.2.1.3. Mise en forme des données

Dans cette étape, les 160 données expérimentales rassemblées ont été divisées en trois sous-ensembles :

- Un ensemble pour l'apprentissage (70%);
- Un ensemble pour la phase de validation (15%);
- Un ensemble pour le test (15%).

IV.2.1.4. Normalisation de la base de données

La normalisation est une étape importante dans le processus de l'élaboration des données. Elle devient dans la plus part des cas, une exigence pour les matrices des inputs, du fait qu'on utilise souvent des fonctions de transfert bornées de type sigmoïdes dans les modélisations statiques.

Dans notre travail, on a utilisé la base de données qui est représentés en 160 lignes, 7 colonnes (entrées et sortie). Les valeurs numériques ont été normalisées afin d'améliorer l'optimisation. La normalisation se fait par ligne (***mapminmax MATLAB version : 7.8***), chaque paramètre des entrées et de sortie (x_i) est normalisé (x_{in}) par l'expression suivante:

$$x_{in} = \frac{2\{x_i - min(x_i)\}}{\{max(x_i) - min(x_i)\}} - 1 \qquad \textbf{IV.1}$$

IV.2.2. Conception et optimisation

La conception d'un modèle neuronal consiste à faire une étude d'évaluation des éléments constitutifs du réseau en fonction de la performance de modélisation souhaitée.

Elle vise à fixer les éléments suivants :

1. Le type du réseau;

2. Le nombre de couches cachées;

3. Le nombre de neurones dans les couches;

4. La fonction de transfert des neurones;

5. L'algorithme d'apprentissage.

Cette conception et l'optimisation du réseau a était réalisé par le toolbox du réseau de neurones (Neural network toolbox) en MATLAB. Le nombre de neurones dans la couche cachée à été varié de 1 à 20.

On a choisie comme fonction de transfert la fonction tangente sigmoïde « tansig » pour la couche cachée et la fonction identité « purelin » pour la couche de sortie et comme algorithme d'apprentissage l'algorithme de Levenberg-Marquardt « trainlm » (Levenberg 1944; Marquardt 1963; Hagan & Menhaj 1994).

IV.2.3. Evaluation de la performance du réseau de neurones

La performance du réseau de neurones a été évaluée par la mesure de la racine de l'erreur quadratique moyenne (REQM), l'erreur absolue moyenne (EAM) et le coefficient de détermination (R^2) :

$$ERAM = 100\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{|\eta^{exp} - \eta^{cal}|}{\eta^{exp}} \quad \textbf{IV.1}$$

$$REQM = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sqrt{(\eta^{exp} - \eta^{cal})} \quad \textbf{IV.2}$$

Avec : N est le nombre de données, et η^{exp}, η^{cal} sont respectivement les valeurs expérimentales et prévues de la viscosité.

IV.3. Structure du RNSO obtenu

La structure de base retenue est un perceptron multicouche à trois couches : une couche d'entrée, une couche cachée, une couche de sortie (Figure IV.1). Le tableau I.5 récapitule les différents éléments structurels du réseau de neurones optimal.

Tableau IV.5. Structure des RNSO utilisés dans la modélisation de la viscosité.

Typedu RN	**Couche d'entrée**	**Couche cachée**		**Couche de sortie**		**Algorithme d'apprentissage**
	Nombre de neurones	Nombre de neurones	Fonction d'activation	Nombre de neurones	Fonction d'activation	
Perceptron multicouche	6	19	Tangente sigmoïde « tansig »	1	Identité « purelin »	Levenberg-Marquardt

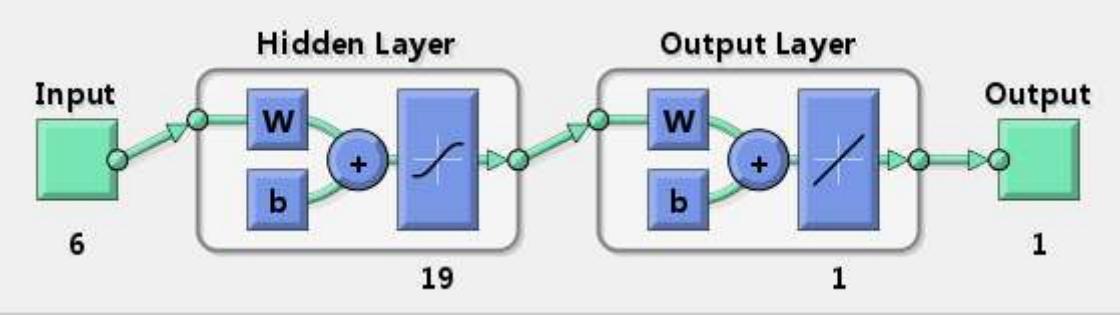
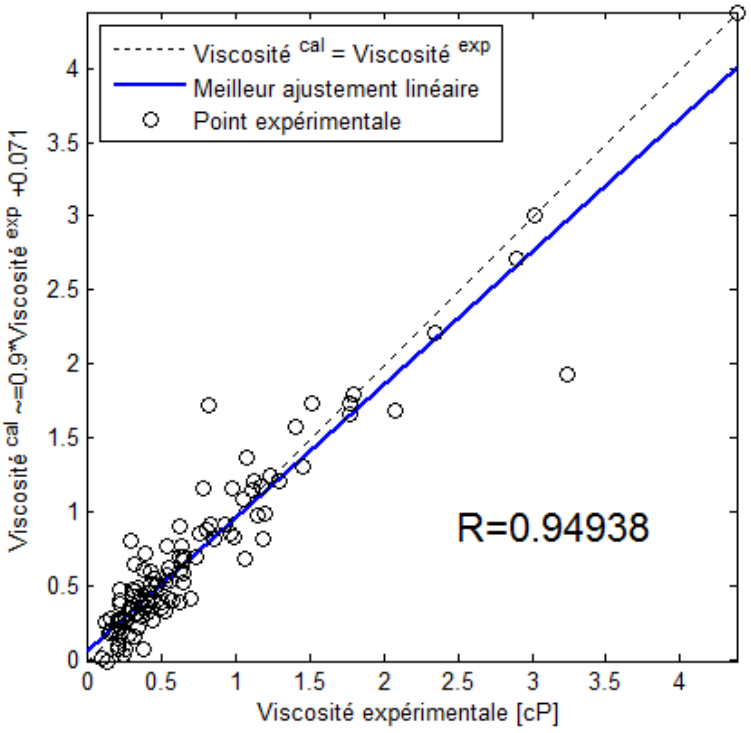
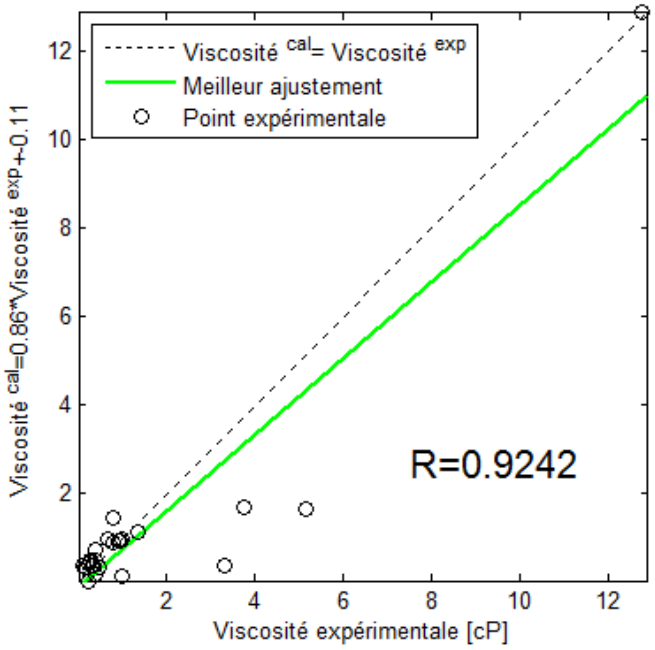


Figure IV.1. Schéma simplifié de l'architecture du RNSO.

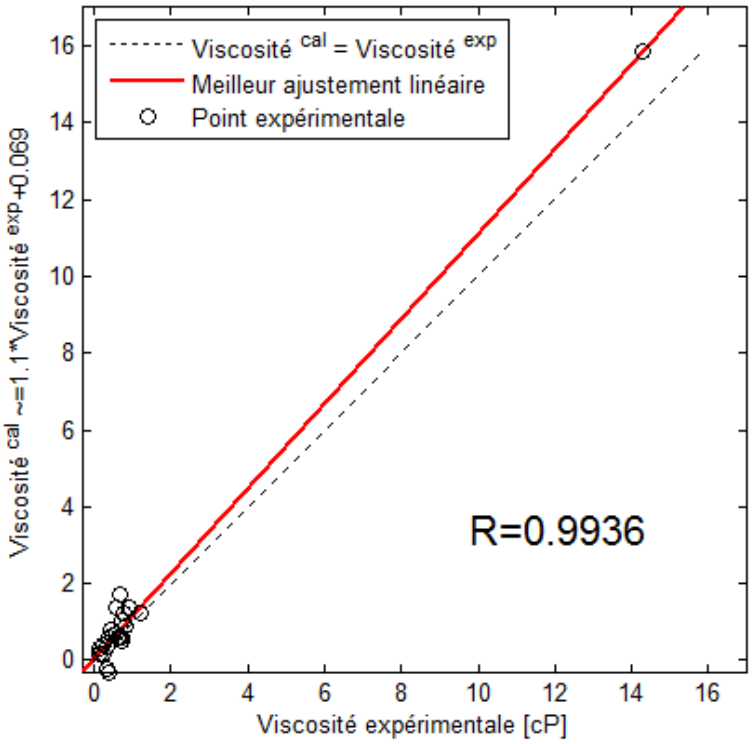
La validation des valeurs calculées avec les valeurs expérimentales pour la base d'apprentissage, de test et de validation est schématisée dans la figure IV.2. Le tableau IV.6 récapitule les performances du RNSO obtenu en termes de la REQM, ERAM et R^2.



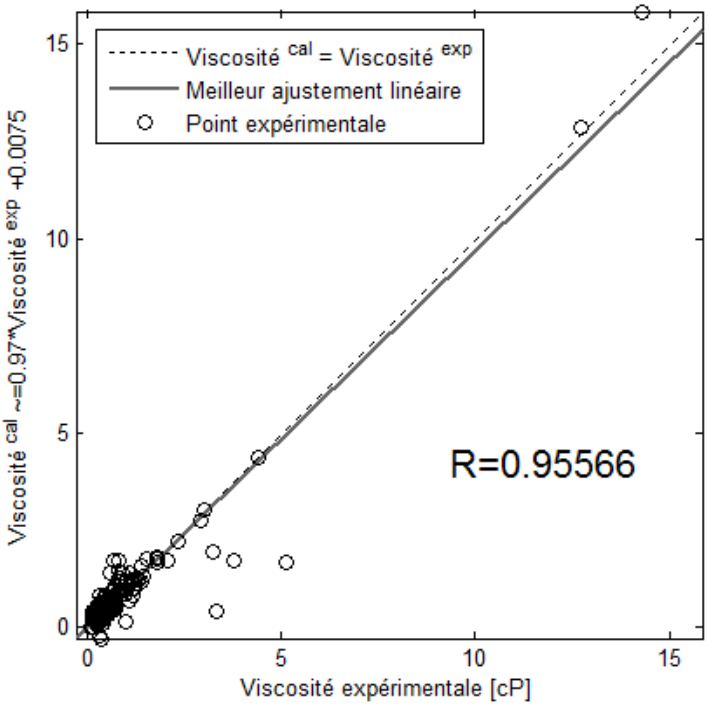
(a)



(b)



(c)



(d)

Figure IV.2. La validation des valeurs calculées avec les valeurs expérimentales : **(a)** pour la base d'apprentissage, **(b)** pour la base de validation, **(c)** pour la base de test, **(d)** pour toute la base.

Tableau IV.6. Récapitulatif des performances du RNSO obtenu en termes de la REQM, ERAM et R^2.

Performances	*ERAM%*	*REQM*	R^2
Apprentissage	0.1344	0.0020	0.9013
Validation	0.5404	0.3094	0.8541
Test	0.3252	0.1858	0.9872
Tout	0.2241	0.0190	0.9132

IV.4. Comparaison entre le modèle neuronale et les modèle théorique

Toujours dans le but de mesurer les performances du modèle neuronale conçu, nous l'avons confronté aux modèles proposés dans la littérature (voir chapitre II). L'histogramme de la figure IV.3 Présente un classement selon l'erreur relative absolue moyenne et la racine de l'erreur quadratique moyenne commise par les différents modèles exposés.

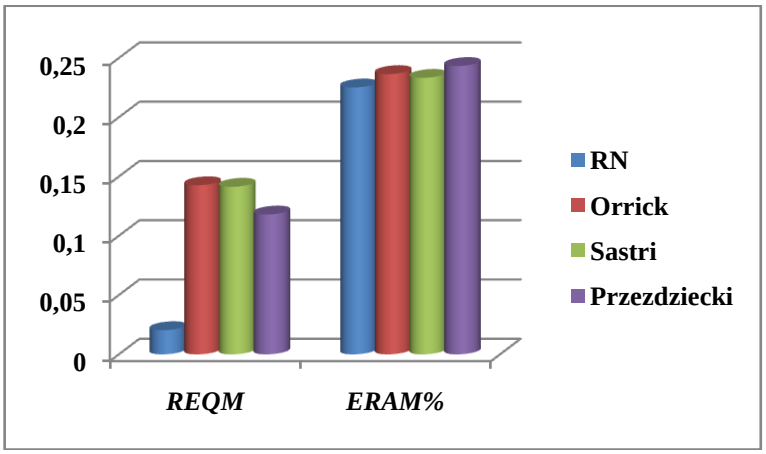


Figure IV.3. Classement des modèles selon les erreurs.

La comparaison entre les modèles théoriques et le modèle neuronale fait a partir du classement de l'erreur relative absolue moyenne et la racine de l'erreur quadratique moyenne, nous avons observé que le modèle neuronale possède des minimums erreurs que les autres modèles théoriques (Orrick, Sastri et de Przezdzeiecki), donc on trouvé que le modèle neuronale est très mieux que les modèles théoriques.

IV.5. Analyse de sensibilité

Cette technique est très utilisée pour l'analyse de contribution des variables, elle consiste à éliminer les entrées peu ou moins influentes sur la sortie (viscosité). Elle se base sur le calcul de l'impotence relative des différentes variables d'entrées en utilisant la méthode des « poids de connexion » (Olden *et al* 2004).

Cette méthode nécessite la partition des poids de connexion en :

- Poids de connexion entrée –cachée (input-hidden) IH (Tableau IV.7).
- Poids de connexion cachée- sortie (hidden-output) HO (Tableau IV.7).

Tableau IV.7. Poids de connexion entrée-cachée et cachée-sortie.

Couche cachée							**Couche de sortie**	
Matrice des poids						**Vecteur des biais**	**Vecteur des poids**	**Vecteur des biais**
-21,038	3,839	-16,641	0,500	9,341	10,100	3,941	0,028	-0.163
-8,571	2,076	10,113	1,613	0,066	2,669	-11,293	1,521	
-1,449	-15,091	6,951	4,109	-1,439	-19,624	2,875	-0,016	
-4,831	-4,616	11,118	1,990	-1,850	1,813	-1,048	-0,014	
0,689	14,795	9,013	4,824	1,933	-15,092	-0,061	-0,475	
-4,865	10,828	3,538	4,827	4,258	-10,097	-0,480	0,026	
6,146	-2,906	-6,974	-9,367	3,122	1,607	-2,944	-0,058	
3,014	16,597	-4,725	-12,077	-19,487	0,081	-0,440	1,066	
-0,061	-9,874	15,756	-9,233	-7,042	-6,431	-5,338	-0,006	
2,419	5,812	-7,908	-0,949	-9,254	1,703	0,032	-0,058	
-4,489	0,666	-2,261	5,820	3,774	0,409	-6,606	-0,117	
2,488	-0,343	7,227	-9,746	-7,756	-0,810	7,903	0,578	
-10,748	-12,073	-26,082	0,894	-5,629	5,290	3,237	-0,028	
-15,339	4,436	7,736	-5,216	-6,072	6,712	-3,282	0,046	
0,705	21,167	12,325	7,446	0,930	-21,147	0,407	0,424	
-1,784	-8,070	0,409	-0,982	-8,839	-1,308	10,123	0,017	
11,685	-8,190	3,049	11,770	4,273	-7,831	4,669	0,055	
21,686	11,522	-8,328	9,129	16,275	1,123	13,626	-0,023	
4,775	5,211	0,314	8,117	-4,569	-0,777	-4,188	0,966	
-21,038	3,839	-16,641	0,500	9,341	10,100	3,941	0,028	
-8,571	2,076	10,113	1,613	0,066	2,669	-11,293	1,521	
-1,449	-15,091	6,951	4,109	-1,439	-19,624	2,875	-0,016	

Le processus de calcul est comme suit :

1. Calcul de l'importance de chaque neurone d'entrée (Tableau IV.8)
2. Calcul de l'importance relative (Tableau IV.9)

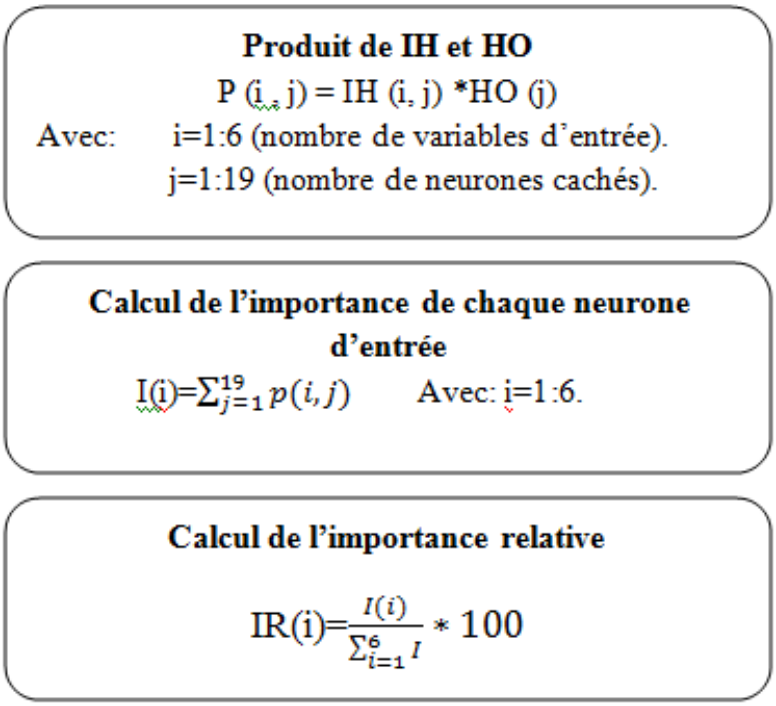


Figure IV.4. Organigramme de calcul l'analyse de sensibilité.

Tableau IV.8. Importance individuelle.

Entrées	Importance individuelle
T (K)	3,108
M (g/mol)	3,656
Tc (K)	3,848
Pc (bar)	2,911
Vc (cm^3/mol)	3,001
Tfp(K)	2,476

Tableau IV.9. Importance relative.

Entrées	**Importance relative**
T (K)	16,357
M (g/mol)	19,244
Tc (K)	20,252
Pc (bar)	15,320
Vc (cm^3/mol)	15,796
Tfp(K)	13,032

La figure IV.5 illustre l'importance des entrées sur la viscosité, on constate que la température, la masse moléculaire, la température critique, la pression critique, le volume critique et le point de congélation sont influencent sur la viscosité. La figure IV.6 illustre l'influence de chaque entrée sur la viscosité.

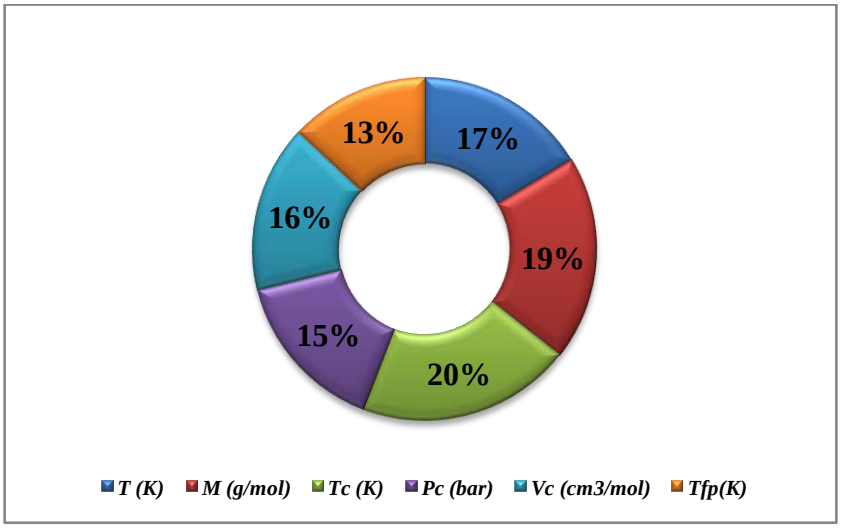
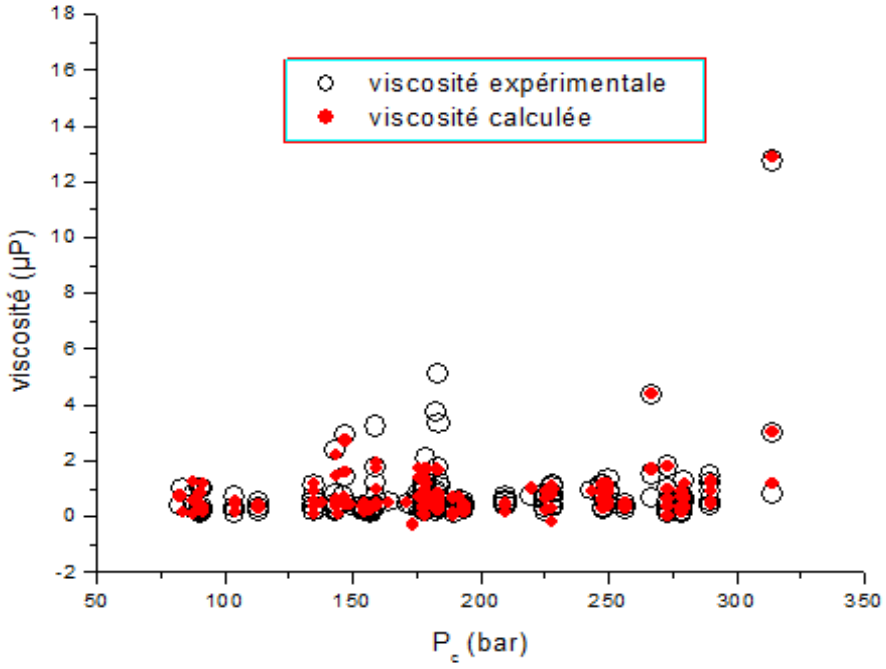
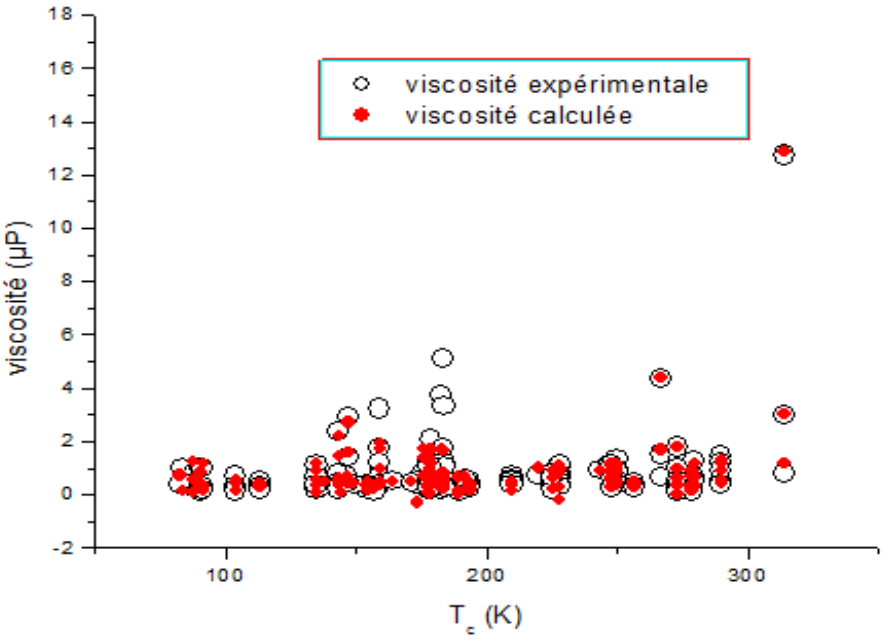


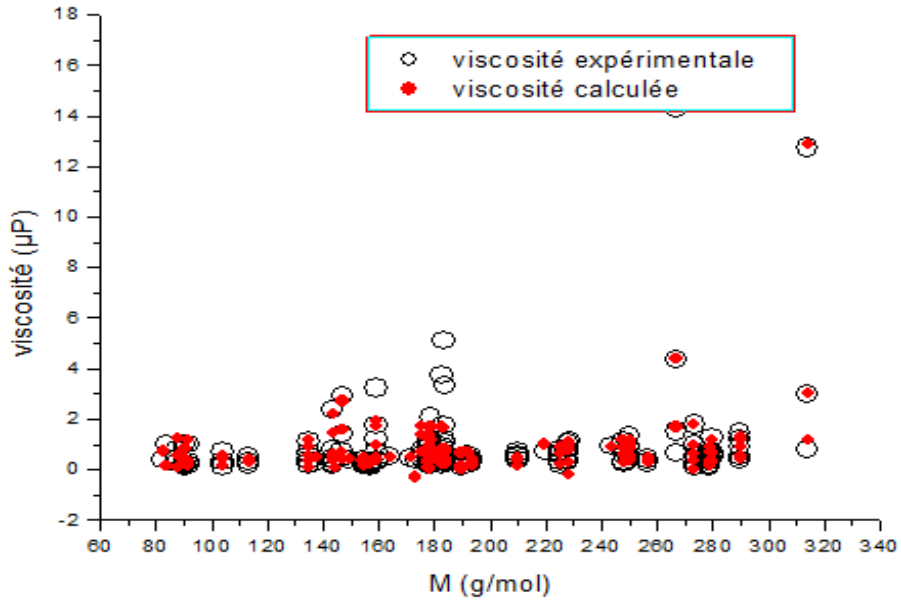
Figure IV.5 Influence des descripteurs sur la viscosité.


viscosité expérimentale
viscosité calculée
viscosité (µP)
P_c (bar)

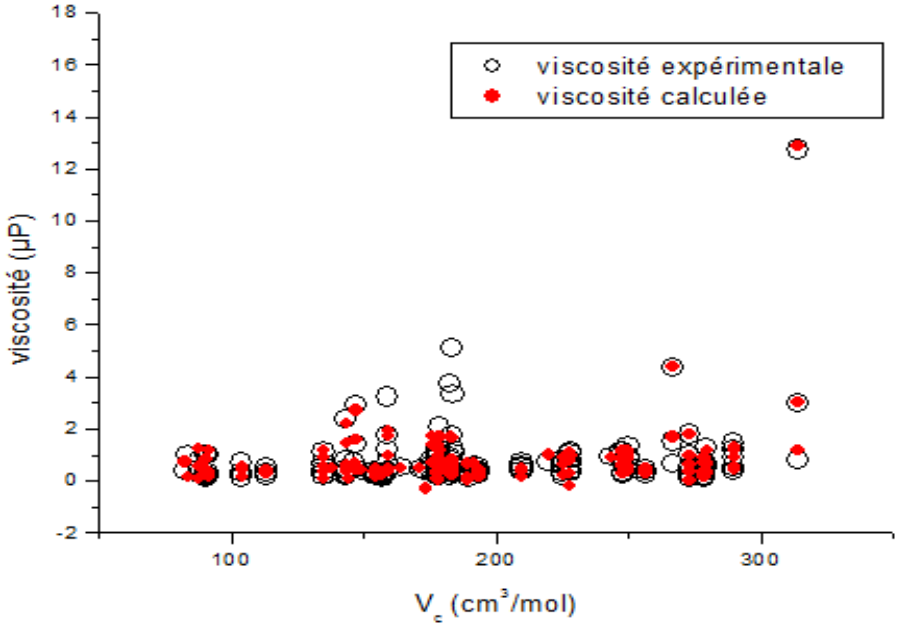
(a)


viscosité expérimentale
viscosité calculée
viscosité (µP)
T_c (K)

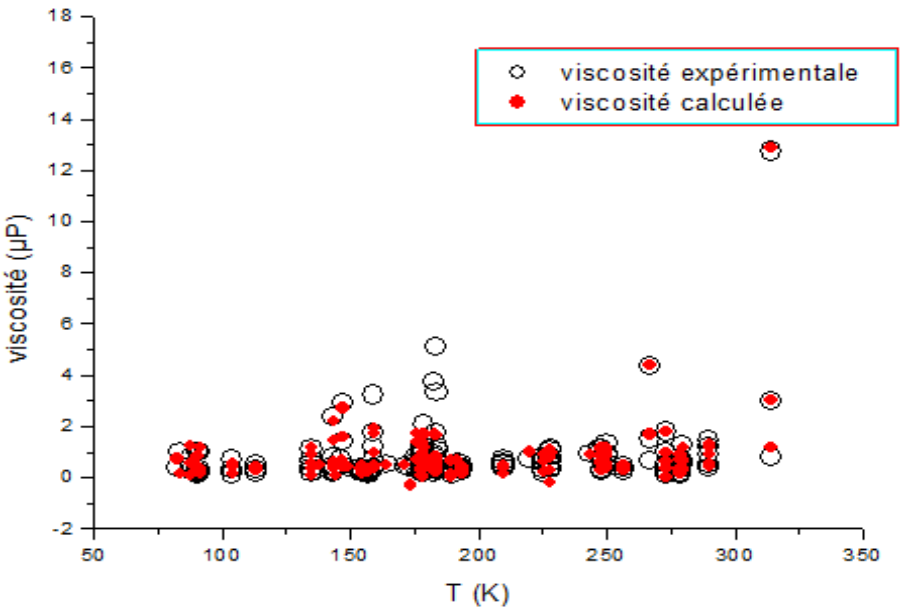
(b)


viscosité expérimentale
viscosité calculée
viscosité (µP)
M (g/mol)

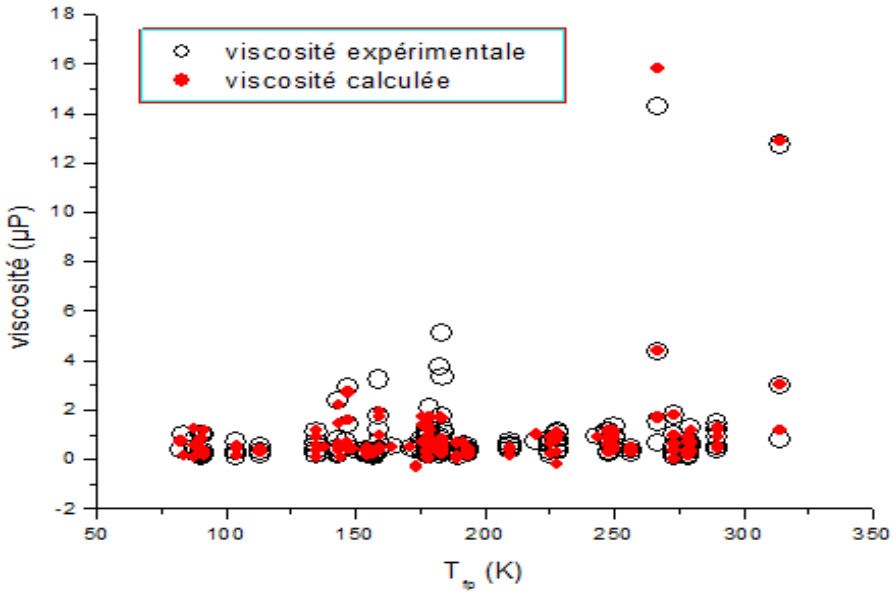
(c)


viscosité expérimentale
viscosité calculée
viscosité (µP)
V_c (cm³/mol)

(d)



(e)



(f)

Figure IV.6. Influence de chaque entrée sur la viscosité. **(a)** : la pression critique; **(b)** : la température critique; **(c)** : la masse moléculaire; **(d)** : le volume critique; **(e)** : la température et **(f)** : le point de congélation.

IV.6. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons abordé le problème de prédiction de la viscosité des liquides, en utilisant le toolbox de RN en MATLAB.

Dans ce chapitre nous avons abordé le problème de prédiction de la viscosité des liquides, en utilisant le toolbox de RN en MATLAB. La comparaison du RNSO obtenu avec les modèles d'Orrick et Erbar, Sastri-Raeo et de Przezdziecki et Sridhar a démontrée la supériorité de prédiction des RN.

L'analyse de sensibilité nous a permis de connaître les entrées qui ont une influence sur la viscosité. Par l'utilisation de la méthode de poids de connexion on a trouvé que toute les paramètres sont influencent (la température critique, la masse moléculaire, la température, la pression critique, le volume critique et le point de congélation).

Le but de ce travail est d'utiliser la modélisation comme approche pour estimation la viscosité des gaz et des liquides.

Notre première contribution a porté sur l'utilisation des réseaux de neurones artificiels (de type perceptron multicouches). Le développement de cette approche après élaboration d'un programme sur MATLAB a été fondé sur deux étapes. En premier, niveau conceptuel qui comportera la préparation de la base de données et l'optimisation pour trouver l'architecture du réseau de neurones statique optimal (RNSO). En second, niveau de la mise en œuvre de l'architecture obtenue, dans le but est le test de généralisation et d'interpolation du réseau de neurones optimisé. Le RNSO obtenu durant cette contribution est :

- {5-[10]-1} pour les gaz : {5 neurones dans la couche d'entrée, 10 neurones dans la couche cachée, neurone dans la couche de sortie} avec une ERAM = 0.1593% et R = 0.99981;
- {6-[19]-1} pour les liquides : {6 neurones dans la couche d'entrée, 19 neurones dans la couche cachée, neurone dans la couche de sortie} avec une ERAM = 0.2241% et R =0.95566.

Notre deuxième contribution a porté sur l'étude comparative entre les modèles neuronaux optimisés et les modèles théoriques : Chang, Lucas et Reichenberg pour le calcul de la viscosité des gaz et Orrick et Erbar, Sastri-Raeo et de Przezdziecki et Sridhar pour le calcul de la viscosité des liquides. Les résultats obtenus lors de cette contribution montrent que les réseaux de neurones sont des outils parfaitement fiables et performants pour la prédiction de viscosité.

Les conclusions à retenir lors de cette étude, sont :

- Les réseaux de neurones fonctionnent comme une boite noire et les paramètres du réseau (poids et biais) n'ont pas de signification physique;

- L'application des réseaux neuronaux ne développe pas directement la théorie de description du système, mais rend faisable la modélisation et la simulation;

- La modélisation par les réseaux de neurones est une méthode qui est basée seulement sur des données expérimentales et/ou semi expérimentale, donc la qualité et la quantité des données décident de l'exactitude et la robustesse du modèle;

- Les réseaux de neurones sont des outils statiques, qui permettent d'ajuster des fonctions non linéaires très générales à des ensembles de points comme toute méthode statique.

En perspective, tout en estimant avoir atteint notre objectif tracé pour cette étude, il serait souhaitable d'essayer de concevoir un seul modèle neuronal, à deux sorties, capable de calculer à la fois la viscosité des gaz et des liquide à n'importe quelle température et à n'importe quelle pression.

1. **Barker J.A., Fock W. et Smith F. (1964)** - Phys. Fluids, 7: 897.
2. **Batschinski A.J. et Physik Z. (1913)** - Chim, 84: 643.
3. **Berthold M.R. et Diamond J. (1995)** - Boosting the Performance of RBF Networks with Dynamic Decay Adjustment, Forschungszentrum Informatik, Uni Karlsruhe, and Intel Corporation.
4. **Broomhead D. et Lowe D. (1988)** - Multivariable Functional Interpolation and Adaptive Networks, Complex Systems, 322-355.
5. **Brulé M.R. et Starling K.E. (1984)** - Ind. Eng. Chem. Process Design Develop, 23: 833.
6. **Chung T.H., Lee L.L. et Starling K. E. (1984)** - Ind. Eng. Chem. Fundam. 23: 8.
7. **Chung T.H., Ajlan M., Lee L.L. et Starling K.E. (1988)** - Ind. Eng. Chem. Res., 27: 671.
8. **Corriou J.P.** ″Les réseaux de neurones pour la modélisation et la conduite des procédés″, Lavoisier Technique et Documentation, **(1995)**, Paris.
9. **DasGupta B. et Schnitger G. (1993)** - "The power of approximating : a comparison of activation functions", In S. J. Hanson, J.D. Cowan, and C.L. Giles editors, Advances in Neural Networks Information Processing Systems, 5, 615-622.
10. **Daubert T.E., Danner R.P., Sibel H.M. et Stebbins C.C. (1997)** - Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals: Data Compilation, Taylor & Francis, Washington, D. C.
11. **Davalo E. et Naïm P. (1993)** - "Des Réseaux de Neurones", Eyrolles, 2ème édition edition, Mar.
12. **Dreyfus G. et al. (2002)** - Réseaux de Neurones Méthodologie et Applications, Editions Eyrolles, Paris.
13. **Duhne C. R. (1979)** - Chem. Eng., 86(15): 83.
14. **Elie F. (1997)** - Conception et Réalisation d'un Système Utilisant des Réseaux de Neurones pourl'Identification et la Caractérisation, à Bord de Satellites, de Signaux Transitoires de typeSifflement", Thèse de Doctorat, Université d'Orléans.
15. **Ferry J.D. (1980)** - Viscoelastic Properties of Polymers, Wiley, New York.
16. **Flynn L.W. et Thodos G. (1961)** - Chem J.. Eng. Data, 6: 457.
17. **Fombellida M.R.J., Minsoul M.J.M. et Destine J.L.O. (1990)** - "Perceptrons multi-couches et fonctions d'activation non monotones", In Proc. Neuronimes'90, EC2 & Cie, Nîmes.
18. **Frédérique Perez. (2004)** - ″Les réseaux de neurones artificiels″, http://www.technoscience.net/?onglet= articles&article =12 http.
19. **Gillet Steve D.Sc**. **(consulter le 27/03/2013)** - ″ Viscosité ″,www.perso.latribu.com/shagar/steve/pdf/sa3.pdf .
20. **Golubev I.F. (1959)** - ''Viscosity of Gases and Gas Mixtures: A Handbook,'' Natl. Tech. Inf. Serv.,TT 70 50022.
21. **Gosse A., Déroulède A. et Dutheuil C. (1991)** - 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, K425 (1-17), K530 (1-17) et K535 (122).
22. **Gunn R.D. et amada T.Y. (1971)** - AIChE J., 17: 1341.
23. **Hagan M.T. et Menhaj M. (1994)** - Training feed forward networks with the marquardt algorithm, IEEE Trans. Neural network. 5, 989-993.
24. **Hanson S.J, Cowan J.D. et Giles C.L. (1993)** - Editors, Advances in Neural Networks Information Processing Systems 5, pp.615-622, Morgan Kaufmann Publishers, San Mateo, CA.
25. **Hassani D. (2002-2003)** - Méthodes des Réseaux de Neurones pour le Calcul de la Dispersion Axiale dans les Lits Fixes, Mémoire de Thèse de Magister, Centre Universitaire de Médéa.
26. **Haykin S**. **(1994)** - "Neural Networks: A Comprehensive Foundation", Mc Millan College Publishing Co.
27. **Hildebrand J.H. (1971)** - Science, 174: 490.
28. **Hinton G**. **(1989)** - Connectionnist Learning Procedures, Artificial Intelligence.
29. **Hirschfelder J.O., Curtiss C.F. et Bird R.B. (1954)** - Molecular Theory of Gases and Liquids, Wiley, New York.
30. **Hornik K. (2004)** - Approximation Capabilities of Multilayer Feed forward Networks, Neuronal Network, 4, p. 251-257, 1991.″Hydrotreating diesel″, Hydrocarbon Processing: Refining Processes, P. 143.
31. **Itean E.C., Glueck A.R. et Svehla R.A. (1961)** - NASA Lewis Research Center, TND 481, Cleveland, Ohio.
32. **Jodouin J.F**. **(1994a)** - "Les réseaux de neurones, principes et définitions", Hermès.
33. **Kamp Yves et Hasler Martin**. **(1990)** - ″Réseaux de neurones récursifs pour mémoires associatives″, Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, Suisse.
34. **Kestin J. et Shankland I.R. (1981)** - in J. V. Sengers, Proc. 8th Symp. Thermophys. Prop., II, ASME, New York, p. 352.
35. **Klein M. et Smith F. J. (1968)** - J. Res. Natl. Bur. Stand., 72A: 359.
36. **Kohonen T. (1984)** - «Self organization and associative memory", Springer -Verlag, New York.
37. **Larson R.G**. **(1999)** - The Structure and Rheology of Complex Fluids, Oxford Univ. Press.
38. **Levenberg K. (1944)** - A method for the solution of certain problems in lest squares, SIAM J. Numer. ANAL. 16, 588 604.

39. **Lide D.R. (1999)** - Handbook of Chemistry and Physics, 80th ed., CRC Press, Boca Raton.
40. **Lobo V.M.M. (1990)** - ‘‘Handbook of Electrolyte Solutions,’’ Phys. Sci. Data Ser., Nos. 41a & 41b, Elsevier.
41. **Lucas K**. **(1980)** - Phase Equilibria and Fluid Properties in the Chemical Industry, Dechema, Frankfurt, p. 573.
42. **Lucas K.** August **(1983)**, September **(1984)** - personal communications.
43. **Malek K.R. et Stiel L.I. (1972)** - Can. J. Chem. Eng., 50: 491.
44. **Marquaedt D. (1963)** - An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters, SIAM J. Appel. Math. 77. 431-441.
45. Masse moléculaire **(consulter le 30/04/2013)**, Article wikipedia.www.wikipedia.org/wiki/Masse_mol%C3% A9culaire.
46. **Mathur G.P. et Thodos G. (1963)** - J. AIChE, 9: 596.
47. **McCulloch W.S. et Pitts W. (1943)** - "A logical calculus for the ideas immanent in nervous activity", Dans Bulletin of Mathematical Biophysics, Vol.5, pp.115-133.
48. **Mhaskar H.N. et Micchelli C.A. (1994)** - "How to choose an activation function", In J.D. Cowan, G. Tesauro and J. Alspector, editors, Advances in Neural Information Processing Systems 6, pp.319-326, Morgan Kaufmann Publishers, San Francisco.
49. **Millat, J., Vesovic V. et Wakeham W.A. (1996)** - Chap. 4 in Transport Properties of Fluids, TheirCorrelation, Prediction and Estimation, (eds.) J. Millat, J. H. Dymond, and C. A. Nieto deCastro, IUPAC, Cambridge Univ. Press, Cambridge.
50. **Monchick L. et Mason E.A.J. (1961)** - Chem. Phys., **35:** 1676.
51. **O’Connell J.P. et Prausnitz J.M. (1972)** - ‘‘Applications of the Kihara Potential to Thermodynamicand Transport Properties of Gases’’ in Advances in Thermophysical Properties at ExtremeTemperatures and Pressures, S. Gratch (ed.), ASME, NY, 1965, pp. 19–31.Neufeld, P. D., A. R. Janzen, and R. A. Aziz: J. Chem. Phys., 57: 1100.
52. **Olden J.D., Joy M.K. et Death R.G. (2004)** - An accurate comparison of methods for quantifying variable importance in artificial neural networks using simulated data, Ecol. Model. 178, pp. 389–397.
53. **Perry R.H. et Green D.W. (1997)** - Chemical Engineers’ Handbook, 7th ed., McGraw-Hill, New York.
54. **Poling B.E., Bransnitz J.M. et O’connell J.P. (2001)** - “The properties of gases and liquids”. 5émé edition, McGREW-HILL, New york, USA.
55. **Powel M**. **(1985)** - Radial Basis Function for Multivariable Interpolation, In IMA Conference on Algorithms for the Approximation of Functions and Data, RCMS Shrivenham, 143-167.
56. Point de congélation, **(consulter le 30/04/2013)** -Articlewikipedia.www.wikipedia.org/wiki/Point_de_fusion.
57. Pression critique, **(consulter le 30/04/2013)** - Article wikipedia.www .wikipedia .org/wiki /pression critique.
58. **Przezdziecki J.W. et Sridhar T. (2007)** - AIChE J., 31**:** 333 (1985). ″Réseau de neurones″, Article de l'encyclopédie libre Wikipédia, http://fr.wikipedia.org/wiki/R%C3%A9seau_de_neuroneshttp.
59. **Reichenberg D. (1974)** - ‘‘The Viscosities of Gas Mixtures at Moderate Pressures,’’ NPL Rept. Chem.29, National Physical Laboratory, Teddington, England, May.
60. **Reichenberg D. (1975)** - (a) DCS report 11, National Physical Laboratory, Teddington, England, August1971; (b) AIChE J., 19: 854 (1973); (c) ibid., 21: 181.
61. **Reichenberg D. (1979)** - Symp. Transp. Prop. Fluids and Fluid Mixtures, Natl. Eng. Lab., East Kilbride, Glasgow, Scotland.
62. **Riddick J. A., Bunger W.B. et Sakano T.K. (1986)** - Organic Solvents Physical Properties and Methods of Purification, 4th ed., Wiley, New York.
63. **Rosenblatt F**. **(1962)** - Principles of Neurodynamics, Spartan Books, New York.
64. **Sastri S.R.S. et Rao K.K. (1992)** - Chem. Eng. J., 50**:** 9.
65. **Stephan K. et Lucas K. (1979)** - Viscosity of Dense Fluids, Plenum, New York.
66. **Stephan K. et Hildwein H. (1987)** - Recommended Data of Selected Compounds and Binary Mixtures, Chemistry Data Series, vol. IV, parts 1 & 2, DECHEMA, Frankfurt.
67. **Stephan K. et Heckenberger T. (1988)** - Thermal Conductivity and Viscosity Data of Fluid Mixtures,Chemistry Data Series, vol. X, part 1, DECHEMA, Frankfurt.
68. Température, **(consulter le 30/04/2013)** - Article l'encyclopédie libre wikipedia.www.wikipedia.Org/wiki/ Temp%C3 %A9rature.
69. Température critique, **(consulter le 30/04/2013)** - Article wikipedia.www.wikipedia.org/wiki/Temp%C3% A9rature_ critique.
70. **Timmermans J. (1965)** - Physico-Chemical Constants of Pure Organic Compounds, vol. 2, Elsevier,Amsterdam.
71. **Trautz M. et Heberling R. (1931)** - Ann. Phys., 10: 155.
72. **Touzet Claude. (1992)** - ″Les réseaux de neurones artificiels, introduction au connexionnisme, cours, exercices et travaux pratiques″, France.

73. **Van Velzen D., Cardozo R.L. et Langenkamp H. (1972)** - ‘‘Liquid Viscosity and Chemical Constitutionof Organic Compounds: A New Correlation and a Compilation of Literature Data,’’Euratom, 4735e, Joint Nuclear Research Centre, Ispra Establishment, Italy.
74. **Vargaftik N.B., Vinogradov Y.K. et Yargin V.S. ,(1996)** - Handbook of Physical Properties of Liquids and Gases, Begell House, New York.
75. Viscosité, Article Wikipedia **(2008)**. **(consulter le 14/05/2013)**. www.wikipedia.org/wiki/Viscosit%C3%A9.
76. **Viswanath, D.S. et Natarajan G. (1989)** - Data Book on the Viscosity of Liquids, Hemisphere Pub. Co., New York.
77. **Vogel E. et Weiss A. (1981)** - Ber. Bunsenges. Phys. Chem., **85:** 539
78. Volume critique, **(consulter le 30/04/2013)** - Article wikipedia.point critique.www.wikipedia.org/wiki/ Volume_ critique.
79. **Yaws C.L. (1995)** - Handbook of Viscosity, Gulf Pub., Houston.
80. **Yaws C.L. (1995a)** - Handbook of Transport Property Data, Gulf Pub, Houston.
81. **Yoon P. et Thodos G. (1970)** - AIChE J, 16: 300.
82. **Zaytsev I.D. et Aseyev G.G. (1992)** - Properties of Aqueous Electrolyte Solutions, CRC Press,Boca Raton.
83. **Zemouri R., Racoc eanu D. et Zerhouni N.** 21 - 22 mars **(2002)** - Application des Réseaux de Neurones Récurrents (RBF) à la Détection Dynamique de Dégradations, Les Journées de travail du GRP GRENOBLE, LAG – ENSIEG.

Caractères latins

Symbole	Signification	Unité
a^*	Somme de groupe de contribution	(-)
A, B	Distributions des groupes	(-)
b_i	Biais du neurone	(-)
C_i	Contribution de groupe	(-)
D	Coefficients de diffusivité	$[m^2.s^{-1}]$
d_i	Sortie désirée	(-)
F_c	Facteur des polarités moléculaires	(-)
F_p°	Facteur de correction polaire à bas pression	(-)
F_Q°	Factor de correction quantité à bas pression	(-)
F'	Contrainte de cisaillement	(-)
K	Constante de Boltzmann ($k = 1{,}380662 .10^{-23}$)	$[J .K^{-1}]$
L	Chemin libre moyen	$[m]$
M	Poids moléculaire	$[g.mol^{-1}]$
N	Nombre de données	(-)
n_i	Nombre des groupes	(-)
N_0	Nombre d'Avogadro (6.023×10^{23})	$[kmol]^{-1}$
P	Pression	$[bar]$
P_c	Pression critique	$[bar]$
P_{vp}	Pression de vapeur atmosphèrique	(-)
Q	Paramètre polaire	(-)
R	Constante des gaz parfaits (R= 8.314)	$[J.mole^{-1}.K^{-1}]$
S	Taux de cisaillement	(-)
T	Température	$[K]$
T^*	Température réduite $(T^*=kT/\varepsilon)$	(-)
T_b	Température d'ébullition	$[K]$
T_c	Température critique	$[K]$
T_{fp}	Point de congélation	$[K]$
V	Volume	$[cm^3]$
V_c	Volume critique	(-)
V_m	Volume de molaire liquide	$[cm^3.mol^{-1}]$
V_o	Volume emballé dur	$[cm^3.mol^{-1}]$
w_i	Poids synaptiques	(-)

Caractères grecs

Symbole	Signification	Unité
E	Paramètre d'énergie dans le potentiel d'interaction	$[J]$
η	Viscosité des gaz	$[\mu P]$
η_B	Viscosité au point d'ébullition normal	(-)
η_L	Viscosité liquide	$[cP]$
κ	Facteur de dissociation	(-)
Λ	Conductivité thermique	$[W.m^{-1}.K^{-1}]$
μ_r	Moment dipolaire	$[Debye]$
V	Vitesse moléculaire moyenne	$[m.s^{-1}]$
Ξ	Viscosité inverse réduite	$[p^{-1}]$
ρ'	Masse volumique (quantité de mouvement ou de chaleur)	$[g.cm^{-3}]$
Σ	Diamètre de dur-sphère,	$[Å]$
ψ	Energie potentiel intermoléculaire	(-)
Ω	Facteur acentrique de Pitzer	(-)
Ω_v	Intégrale de collision de viscosité	(-)

Indices	**Exposants**
b	Ebullition
c	Critique
m	Molaire
p	Pression
Q	Quantité
r	Réduite
vp	Vapeur pression