

UNIVERSITE DE BLIDA 1

Faculté de Technologie

Département du Génie des Procédés

THESE DE DOCTORAT

En Génie des Procédés

Spécialité : Génie de l'Environnement

ETUDE COMPARATIVE ET MODELISATION DES PROPRIETES THERMO-
PHYSICOCHIMIQUES DE QUELQUES GAZ A POLLUTION ATMOSPHERIQUE ET
LEURS SUBSTITUANTS NON POLLUANTS

Présentée par

Naima GHALEM

Devant le jury composé de :

D.TOUIL	Professeur, Université Saad DAHLAB Blida 1	Président
M. HAMADACHE	MCA, Université Yahia FARES, Médéa	Examineur
D. ELHADI	Professeur, Université Saad DAHLAB Blida 1	Examineur
S. HANINI	Professeur, Université Yahia FARES Médéa	Directeur de thèse
M. W. NACEUR	Professeur, Université Saad DAHLAB Blida 1	Co-directeur de thèse

Blida, Juin 2020.

ملخص

الهدف من هذه الأطروحة هو تطوير منهجيات قائمة على النمذجة وتحديد الخواص الكيميائية الفيزيائية الحرارية لبعض المبردات (R32 ، R125 ، R134a ، R152a ، R143a) ، ومزائجها الثنائية والثلاثية ، الأكثر استخداما حاليا في مجال التبريد وتكييف الهواء في الحالة السائلة والبخارية بواسطة الشبكات العصبية الاصطناعية وتلك لأغراض التنبؤ. وينقسم هذا العمل إلى مساهمتين :

ركزت المساهمة الأولى على نمذجة الموصلية الحرارية باستخدام نمذجة الشبكة العصبية الاصطناعية RNA ، وتشمل المنهجية 11 نظاماً مجموعة من 3227 نقطة بيانات (BD1) مقسمة : 1817 نقطة بيانات للأنظمة البحتة ، 794 نقطة بيانات للأنظمة الثنائية و 616 نقطة بيانات للأنظمة الثلاثية ، تمت مقارنة القيم المتوقعة التي تم الحصول عليها مع قيم الموصلية الحرارية المقاسة ، وتم العثور على ارتباط جيد ($R = 0.996$ للأنظمة النقية ، $R = 0.998$ للأنظمة الثنائية و $R = 0.998$ للأنظمة الثلاثية) و $R = 0.996$ للنظام الكلي (RN0) ، استخدمت تسع خلايا عصبية في طبقة الإدخال ، وثلاثة عشر خلية عصبية في الطبقة المخفية وواحدة فقط في طبقة المخرجات ، خوارزمية تم تطبيق Levenberg-Marquardt ، تم استخدام نفس وظيفة نقل الظل السيني للطبقة المخفية وطبقة الإخراج. ثم ، استخدام التقنيات الجديدة (القيم المخفضة) لحساب الخصائص الحرجة الزائفة لتحسين أداء نتائج النمذجة السابقة. بالإضافة إلى ذلك، تم جمع قاعدة بيانات جديدة (BD2)، بشأن المبردات الضارة (660 نقطة بيانات) والتي تتضمن ثلاثة أنظمة نقية (R142b،R124،R22)، نظامان ثنائيان (R22 + R142b،R152a،R22)، و نظام ثلاثي (R142b + R124 + R22)،للتنبؤ ، وتم العثور على علاقة جيدة للنظام الكلي مع $R^2 = 0.953$ و $RMSE = 0.0123$.

لقد ناقشنا في المساهمة الثانية جزأين من النماذج من خلال تقنية الخلايا العصبية. الجزء المفصل الأول للتنبؤ بالكثافة باستخدام قاعدة بيانات من 777 نقطة تجريبية. تعتمد هذه المنهجية على محورين رئيسيين: اختيار معاملات المدخلات والمخرجات ، واختيار بنية الحمض النووي الريبي. ركزنا بشكل أساسي على اختيار: خوارزمية التعلم ، تقنية التوحيد وبنية الشبكة. هذا سمح لنا بالوصول إلى نموذج مثالي، وكانت النتائج التي تم الحصول عليها مرضية للغاية مع معامل الارتباط $R^2 = 0.997$ وجذر التربيع لمتوسط الخطأ التربيعي $RMSE = 0.0022$. يتوافق جزء النمذجة الثاني للتنبؤ l'entropie او l'enthalpie (7646 نقطة). تم اعتماد هندسة (9-15-2) ، استخدمت وظائف النقل اللوغاريتمي السيني والخطي في الطبقة المخفية وطبقة المخرجات على التوالي. النتائج التي تم الحصول عليها مرضية للغاية ودقيقة للغاية مع معامل ارتباط 99.99 % وخطأ متوسط التربيع MSE صغير جدا.

الكلمات المفتاحية: المبردات ، الموصلية الحرارية ، الكثافة،الخصائص الديناميكية الحرارية ، النمذجة ، الشبكة العصبية الاصطناعية

RÉSUMÉ

L'objectif de cette thèse vise à développer des méthodologies basées sur la modélisation et la détermination des quelques propriétés thermo physico-chimiques de certains fluides frigorigènes (R32, R125, R134a, R152a, R143a), et leurs mélanges binaires et ternaires, parmi les plus utilisés actuellement dans le domaine du froid et de la climatisation à l'état liquide et vapeur, par les réseaux de neurones artificiels et ce dans le but de la prédiction. Ce travail est basé sur deux contributions :

La première contribution a porté sur la modélisation de la conductivité thermique utilisant la modélisation par réseau de neurone artificiel RNA. La méthodologie englobe 11 systèmes pour un ensemble de 3227 points de données (BD1) répartis comme suit: 1817 points de données pour les systèmes purs, 794 points de données pour les systèmes binaires et 616 points de données pour les systèmes ternaires. Les valeurs prédites obtenues ont été comparées aux valeurs de la conductivité thermique mesurées, et de bonnes corrélations ont été trouvées ($R = 0.996$ pour les systèmes purs, $R = 0.998$ pour les systèmes binaires, $R = 0.998$ pour les systèmes ternaires et $R = 0.996$ pour le système global (RN0)). Neuf neurones ont été utilisés dans la couche d'entrée, treize dans la couche cachée et un seul dans la couche de sortie. L'algorithme de Levenberg-Marquardt a été appliqué. La fonction de transfert tangente sigmoïde a été utilisée simultanément pour la couche cachée et la couche de sortie. Ensuite, on a utilisé de nouvelles techniques (valeurs réduites) afin de calculer les propriétés pseudo-critiques pour améliorer la performance des résultats précédents de la modélisation. De plus, une nouvelle base de données (BD2) concernant des réfrigérants nocifs (660 points de données) a été collectée. Cette base englobe trois systèmes purs (R22, R124, R142b), deux systèmes binaires (R22+R142b, R22+R152a), et un système ternaire (R142b+R124+R22). Une bonne corrélation a été trouvée pour le système global avec $R = 0.953$ et $RMSE = 0.0123$.

La seconde contribution a traité la modélisation par la technique neuronale. Une première étude a été dédiée à la prédiction de la densité volumique en utilisant une base de données provenant de 777 points expérimentaux. Cette méthodologie est basée sur deux axes principaux: la sélection des paramètres d'entrées et de sortie, et la sélection de la structure du RNA. Nous nous sommes focalisés surtout sur le choix de l'algorithme d'apprentissage, la technique de normalisation et l'architecture du réseau. Cela nous a permis d'atteindre un modèle optimal avec des résultats très satisfaisants ($R^2 = 0.997$ et $RMSE = 0.0022$). La seconde étude concernait la prédiction de l'enthalpie et de l'entropie (7646 points générés). Une architecture (9-15-2) a été adoptée, les fonctions de transferts logarithmiques sigmoïdes et linéaires ont été utilisées dans la couche cachée et la couche de sortie respectivement. Les résultats obtenus sont très satisfaisants et très précis avec un coefficient de détermination de 99,99% et une erreur quadratique moyenne MSE très petite.

Mots clés : Fluide frigorigène, Conductivité thermique, Densité volumique, Propriétés thermodynamiques, Modélisation, Réseau de neurone artificiel.

Abstract

The objective of this thesis is to develop methodologies based on neural networks for prediction of thermal conductivity of liquid and vapor refrigerants for pure and their binary, ternary mixtures using artificial neural network and this for the purpose of prediction. This work is divided into two contributions:

The first contribution focused on the modeling of thermal conductivity using Artificial Neural Network Modeling RNA, the methodology includes 11 systems a set of 3227 data points (BD1) divided: 1817 data points for pure systems, 794 points data for binary systems and 616 data points for ternary systems, the predicted values obtained were compared with the measured thermal conductivity values, and good correlations were found ($R = 0.996$ for pure systems, $R = 0.998$ for binary systems and $R = 0.998$ for ternary systems and $R = 0.996$ for the global system (RN0), nine neurons were used in the input layer, thirteen neurons in the hidden layer and only one in the output layer, the Levenberg-Marquardt algorithm was applied, the same sigmoidal tangent transfer function was used for the hidden layer and the output layer. Then, the use of new technique (reduced values) to calculate the pseudo-critical properties to improve the performance of previous modeling results. In addition, a new database (BD2) has been collected, concerning harmful refrigerants (660 data points) which includes three pure systems (R22, R124, R142b), two binary systems (R22 R142b, R22 R152a), and a ternary system (R142b R124 R22), for prediction and good correlation was found for the global system with $R = 0.953$ and $RMSE = 0.0123$.

We have discussed in the second contribution two parts of modeling by the neuronal technique. A first detailed part to predict the density by using a database from 777 experimental points. This methodology is based on two main axes : the selection of the input and output parameters, and the selection of the structure of the RNA. We focused especially on the choice of the learning algorithm, the standardization technique and the network architecture, this allowed us to achieve an optimal model, the results obtained are very satisfactory and very accurate with a determination coefficient $R^2 = 0.997$ and root of the mean squared error $RMSE = 0.0022$. A second modeling part to predict enthalpy and entropy (7646 points generated). An architecture (9-15-2) has been adopted, the sigmoid and linear logarithmic transfer functions were used in the hidden layer and the output layer respectively. The results obtained are very satisfactory and very accurate with a determination coefficient of 99.99% and mean squared error MSE a very small.

Key words: Refrigerant, Thermal Conductivity, Density, Thermodynamic properties, Modeling, Artificial Neural Network.

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail à :

L'archée chaste de mon père. رحمه الله

Ma très chère mère qui a veillé sur moi pendant toute ma vie.

*Mes frères et mes sœurs sans oublier mes nièces et surtout
"Lokman".*

Ma petite sœur "Fahima", a qui je souhaite une très belle vie.

A toute la famille Ghalem.

A toutes mes collègues et amies sans exception.

Naima Ghalem

REMERCIEMENTS

Tout d'abord, je tiens à remercier le **Tout Puissant ALLAH** qui m'a donnée le courage, la volonté et la force pour achever ce travail.

Je tiens à remercier mon directeur de thèse, Monsieur HANINI Salah Professeur à l'UYFM, pour sa grande patience tout au long de l'élaboration de ce travail, pour ses aides précieuses qui ont judicieusement éclairé mon chemin vers l'aboutissement et la réussite de la concrétisation de ma thèse de Doctorat.

J'adresse mes chaleureux remerciements à mon co-directeur de thèse, Monsieur NACEUR Mohamed Wahib professeur à l'USDB pour son aimable contribution à ce travail.

J'adresse également mes plus grands remerciements au Docteur LAIDI Maamar Maître de Conférences (A) à l'UYFM, pour sa compétence, ses encouragements et ses précieux conseils. Un merci tout particulier à Monsieur AMRANE Abdeltif Professeur à l'université de Rennes (France) pour toute la sollicitude et la grande disponibilité dont il a fait preuve à mon égard.

Je tiens également à remercier les membres du jury : Mr Touil Djamel Professeur à l'Université de Blida pour avoir accepté de présider le jury de cette thèse, Mr HAMADACHE Mabrouk (MCA) de l'université de Médéa pour avoir mobilisé ses compétences et son temps pour juger ce travail et Mr ELHADI Djamel Professeur à l'Université de Blida d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse et pour l'attention accordée.

TABLE DES MATIÈRES

RESUME	
REMERCIEMENTS.	
DEDECACE	
TABLE DES MATIERES	
LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX	
INTRODUCTION	14
1. L'OZONE ET LES FLUIDES FRIGORIGENES	21
1.1 Introduction	21
1.2 Position de problème	21
1.2.1 Destruction de la couche d'ozone	21
1.2.1.1 L'ozone	21
1.2.1.2 La couche d'ozone	22
1.2.1.3 Comment l'ozone est-il détruit ?	23
1.2.1.4 Les substances appauvrissant la couche d'ozone	24
1.3 Contribution à l'effet de serre	24
1.4 Les fluides frigorigènes	25
1.4.1 Définition des fluides frigorigènes	26
1.4.2 Classification des fluides frigorigènes	26
1.4.2.1 Les réfrigérants halogénés	26
1.4.2.2 Les réfrigérants naturels	28
1.5 Les règles de la sélection des réfrigérants.	30
1.5.1 Les critères écologiques (ODP, GWP)	30
1.5.2 Les critères de sécurité (toxicité et inflammabilité)	32
1.5.3 Les critères économiques	35
1.5.4 Les critères thermodynamiques	36
1.6 La substitution des réfrigérants	36
1.7 Les fluides de substitution	37
1.8 Réglementation et évolution	38
1.9 Conclusion	40
2. L'ETAT DE L'ART ET GENERALITE SUR LES RESEAUX DE NEURONS ARTIFICIELS	41
2.1 Introduction	41
2.2 L'état de l'art et revue critique de la littérature	41
2.2.1 Travaux expérimentaux réalisés dans le domaine de la réfrigération	41
2.2.2 Travaux réalisés sur la modélisation dans le domaine de la réfrigération	42

2.2.3	Etat statistique des références bibliographiques	44
2.2.4	Les mélanges de réfrigérants	46
2.3	Généralités sur les réseaux de neurones artificiels	47
2.3.1	Historique	48
2.3.2	Le neurone biologique	49
2.3.2.1	Définition d'un réseau de neurones artificiel (RNA)	50
2.3.2.2	Principe du neurone artificiel	50
2.3.3	Modèles réseaux de neuronaux	52
2.3.4	Fonctions d'activations	54
2.4	Conclusion	55
3.	MATERIELS ET METHODES	57
3.1	Introduction	57
3.2	Modélisation de la conductivité thermique utilisant les réseaux de neurones artificiels	59
3.2.1	Procédure de développement du RNA	59
3.2.2	Modélisation neuronale des différents systèmes des fluides frigorigènes	61
3.2.2.1	Collection des données	61
3.2.2.2	Sélection des paramètres d'entrées et de sorties du RNA	65
3.2.2.3	Calcul des propriétés pseudo-critiques	66
3.2.2.4	Préparation et division des données	67
3.2.2.5	Normalisation des données	68
3.2.2.6	Apprentissage et structure du réseau adopté	69
3.2.2.7	Analyse de sensibilité	69
3.2.3	Technique de la réduction	71
3.2.4	Prédiction de la conductivité thermique utilisant le réseau de neurone artificiel	73
3.2.4.1	Elaboration et collection d'une nouvelle base de données	73
3.2.5	Modélisation neuronale (BD1+BD2)	74
3.3	Propriétés thermodynamiques	75
3.3.1	Energie interne	75
3.3.2	Enthalpie	75
3.3.3	Entropie	75
3.3.4	Energie libre	76
3.4	Modélisation de quelques propriétés thermodynamiques (la densité volumique, de l'enthalpie et de l'entropie) utilisant le RNA	76
3.4.1	Modélisation de la densité volumique utilisant le réseau de neurones artificiel	76
3.4.1.1	Elaboration et collection des données	77

3.4.1.2	Sélection des entrées du modèle neuronal	77
3.4.1.3	Préparation et partage de la base de données (BD3)	79
3.4.1.4	Normalisation des données	80
3.4.1.5	Conception du modèle neuronal	80
3.4.1.6	RNA développé	85
3.4.2	Modélisation de l'enthalpie et de l'entropie utilisant le réseau de neurones artificiel	86
3.4.2.1	Collecte des données	86
3.4.2.2	Mise en forme des données et structure du réseau adopté	87
3.5	Conclusion	88
4.	RESULTATS ET DISCUSSIONS	90
4.1	Introduction	90
4.2	Résultats de la modélisation de la conductivité thermique	90
4.2.1	RNA développé	90
4.2.1.1	Analyse de sensibilité	96
4.2.1.2	Développement du modèle RN0 utilisant la technique de la réduction	101
4.2.2	Résultats de la prédiction	105
4.2.3	Résultats de la modélisation neuronale optimale (BD1+BD2)	109
4.2.4	Détermination des équations du RNA optimisé	111
4.3	Résultats et modélisation de la densité volumique, de l'enthalpie et de l'entropie	113
4.3.1	Résultats et procédure de modélisation de la densité volumique	113
4.3.1.1	Analyse de la sensibilité des entrées par apport à la sortie	113
4.3.1.2	Performances du modèle neuronal	114
4.3.1.3	Détermination des équations du modèle de RNA optimisé	117
4.3.2	Résultats et procédure de modélisation de l'enthalpie et de l'entropie	118
4.3.2.1	Détermination des équations du modèle de RNA optimisé	121
4.4	Conclusion	121
	CONCLUSION ET PERSPECTIVES	123
	APPENDICE	
	A.PROGRAMME MATLAB DE CALCULE DES VALEURS PREDITES	128
	B. PROGRAMME DE CALCUL DES ERREURS	129
	C.LISTE DES SYMBOLES ET ABREVIATIONS	130
	RÉFÉRENCES	133
	LISTE DES PUBLICATIONS	144

LISTE DES ILLUSTRATIONS, GRAPHIQUES ET TABLEAUX

Figure 1 .1	La formation des molécules d'ozone	22
Figure 1. 2	L'ozone dans l'atmosphère	23
Figure 1. 3	Le rayonnement UV enlève le chlore des CFC	23
Figure 1. 4	Destruction de l'ozone par les CFC	24
Figure 1.5	Représentation des phénomènes d'échanges radiatifs dans l'atmosphère	25
Figure 2.1	Nombre des articles publiés dans toutes les revues scientifiques pour la modélisation de la conductivité thermique	45
Figure 2.2	Nombre des articles publiés pour la modélisation de la conductivité thermique utilisant le RNA	45
Figure 2.3	Structure d'un neurone biologique	50
Figure 2.4	Réseau de neurones artificiel	51
Figure 2.5	Comparaison entre le neurone biologique et artificiel	52
Figure 2.6	Réseau de neurones artificiels de type Feed-forward	53
Figure 3.1	Procédure de développement d'un RNA	60
Figure 3.2	Capture d'écran du logiciel MATLAB	60
Figure 3.3	Architecture du réseau de neurone artificiel développé	67
Figure 3.4	Partage de la base de données	68
Figure 3.5	Organigramme de la méthode de "poids"	70
Figure 3.6	Structure de réseau de neurone adoptée	79
Figure 3.7	Partage de la base de données.	80
Figure 3.8	Organigramme de la méthodologie de calcul du RNA	81
Figure 3.9	Effet de l'algorithme d'apprentissage sur la performance des réseaux de neurones en termes d'erreur quadratique moyenne	82
Figure 3. 10	Effet de la fonction de normalisation sur la performance d'apprentissage du réseau de neurone	83
Figure 3.11	Effet du nombre de neurones de la couche cachée sur la performance d'apprentissage du réseau de neurones : (a) chaque 5 neurones, (b) un neurone	84
Figure 3.12	Structure optimale du modèle de RNA	85
Figure 3.13	Partage de la base de données.	88

Figure 3.14	Schéma simplifié de l'architecture du RNA adopté	88
Figure 4.1	Histogramme de l'importance relative(IR)	96
Figure 4. 2	Courbe de régression des conductivités thermiques prédites en fonction des conductivités thermiques expérimentales pour les différents systèmes (a) Systèmes purs, (b) Systèmes binaires, (c) Systèmes ternaires, (d) Système global	99
Figure 4.3	Les différentes performances pour les trois systèmes (purs, binaires et ternaires) : (a) racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (RMSE), erreur absolue moyenne (AAD), et(b) erreur relative absolue moyenne (AARD%)	100
Figure 4.4	Comparaison entre les résultats expérimentaux réduits et calculés : (a), RN1 (nombre des neurones = 17), (b), RN2 (nombre des neurones =13) pour le système global	102
Figure 4.5	Performances des trois modèles (RN0, RN1, RN2): (a) racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (RMSE), erreur absolue moyenne (AAD), et (b) erreur relative absolue moyenne (AARD%)	103
Figure 4.6	Performance de réseau du modèle optimal	104
Figure 4. 7	Comparaison entre les valeurs de BD1et BD2 des systèmes (purs, binaires et ternaires) pour la prédiction: (a) RN0, (b) RN1, (c), RN2	107
Figure 4.8	Prédiction entre la BD2 et la BD1 dans l'intervalle $K= [0.01 \text{ à } 0.03] \text{ W. m}^{-1}.\text{K}^1$	107
Figure 4. 9	Résidus des valeurs calculées de la conductivité thermique en fonction des valeurs expérimentales de la BD2, $[Residus = K_{exp,i} - K_{cal,i}]$	108
Figure 4.10	Courbe de regression de la prédiction de la (BD2)	108
Figure 4.11	Présentation graphique des conductivités thermiques prédites en fonction des conductivités thermiques expérimentales (BD1+BD2)	110
Figure 4.12	Représentation graphique des résidus en fonction des conductivités thermiques expérimentales	111
Figure 4.13	Représentation schématique du RN2 optimal	112
Figure 4.14	Importance relative des variables d'entrées sur la prédiction de la densité volumique	113
Figure 4.15	Comparaison entre les valeurs expérimentales et prédites pour l'ensemble des données : (a) apprentissage, (b) validation, (c) test et (d) système global	116

Figure 4.16	Représentation schématique du RN optimal	117
Figure 4.17	Performance du réseau du modèle optimal	118
Figure 4.18	Les courbes de régression linéaire de modélisation de l'enthalpie et de l'entropie	119
Figure 4.19	Résumé des résultats obtenus pour les trois phases	119
Figure 4. 20	Résidus tracés pour les données	120
Figure 4. 21	Représentation schématique du RN optimal	121
Tableau 1.1	Les fluides frigorigènes	29
Tableau 1.2	Principaux halo carbures utilisés- Substances appauvrissant la couche d'Ozone (SACO)	31
Tableau 1.3	Classement de sécurité des fluides frigorigènes	33
Tableau 1.4	Principaux codes de sécurité (toxicité et inflammabilité)	33
Tableau 2.1	Analogie entre le neurone biologique et le neurone formel	52
Tableau 3.1	Propriétés critiques des fluides purs utilisées dans ce travail	62
Tableau 3.2	Source et le nombre des points des données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes purs (BD1)	63
Tableau 3.3	Source et le nombre des points des données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes binaires (BD1)	64
Tableau 3.4	Source et le nombre des points des données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes ternaires (BD1)	64
Tableau 3.5	Résumé expérimentale des paramètres d'entrés et de sortie utilisées (BD1)	65
Tableau 3.6	Analyse statistique des données d'entrée et de sortie	67
Tableau 3.7	Topologie du RNA optimal (BD1)	69
Tableau 3.8	Résumé des paramètres et les données réduites utilisées dans ce travail	72
Tableau 3.9	Source et le nombre des points de données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes purs (BD2)	71
Tableau 3.10	Source et le nombre des points de données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes binaires (BD2)	74
Tableau 3.11	Source et le nombre des points de données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes ternaires (BD2)	74
Tableau 3.12	Source et le nombre des points des données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes purs (BD1)	78

Tableau 3.13	Source et le nombre des points des données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes binaires (BD1)	78
Tableau 3.14	Source et le nombre des points des données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes ternaires (BD1)	78
Tableau 3.15	Analyse statistique des données d'entrée et de sortie	79
Tableau 3.16	Noms des codes des réseaux et les noms des algorithmes d'apprentissage utilisés lors de la phase de conception du modèle neuronal	82
Tableau 3.17	Différentes fonctions de normalisation utilisées	83
Tableau 3.18	Structure du réseau de neurone optimisé	86
Tableau 3.19	Analyse statistique des données des entrées et de sortie	87
Tableau 4.1	Valeurs de coefficients de déterminations R^2 , de RMSE et le nombre optimal des neurones avec différentes fonction de transfert	91
Tableau 4. 2	Poids et biais du RNA optimal pour les systèmes purs	92
Tableau 4. 3	Poids et biais du RNA optimal pour les systèmes binaires	93
Tableau 4. 4	Poids et biais du RNA optimal pour les systèmes ternaires	94
Tableau 4. 5	Poids et biais du RNA optimal pour le système global	95
Tableau 4. 6	Vecteurs de régression linéaire issue de l'équation linéaire : [équation linéaire : $y^{cal} = \alpha y^{exp} + \beta$, avec α = pente, β =y ordonnée à l'origine, R^2 =coefficient de détermination]	97
Tableau 4.7	Valeurs de l'erreur (RMSE), (MSE), (AAD), (AARD %) et le coefficient de détermination(R^2_{Cal})	101
Tableau 4.8	Structures des modèles optimisés par RNA	101
Tableau 4.9	Performances d'erreur et les vecteurs de régression linéaire entre les modèles obtenus par RN0, RN1, RN2	104
Tableau 4.10	Comparaison entre le modèle prédictif des différents résultats de la nouvelle base de données (BD2) obtenue par chaque modèle RN0, RN1, RN2	109
Tableau 4.11	Topologie du RNA optimale (BD1+BD2)	110
Tableau 4.12	Valeurs des paramètres statistiques pour les erreurs (RN3)	111
Tableau 4.13	Poids et biais du RNA optimal pour le système global	115
Tableau 4.14	Analyse statistique, vecteurs d'accords de validation et la performance du modèle RNA	117

INTRODUCTION

De nos jours, la demande en froid est trop forte à cause de ses multiples applications, telles que : le froid domestique, le froid commercial et le froid industriel. La production du froid est au cœur de deux principales menaces pour l'environnement : le phénomène d'appauvrissement de la couche d'ozone et le réchauffement climatique qui sont les deux problèmes très controversés de ces dernières années.

En effet, le domaine des fluides frigorigènes est un sujet d'actualité sur le plan environnemental, politique et industrielle; ces fluides représentent plus de 90% de l'ensemble des fluides utilisés, notamment les Chlorofluorocarbures (les CFCs : R11, R12, R22, etc.) qui sont apparus dans les années 1930 et ont été largement utilisés dans plusieurs industries comme des fluides frigorigènes pour la réfrigération, la production du froid, la fabrication de mousse, comme aérosols, etc.

Les contraintes environnementales énoncées lors du protocole de Montréal (protection de la couche d'ozone) et de Kyoto (protection du climat), nécessitent de trouver et d'exploiter de nouveaux fluides. Le fluide frigorigène idéal n'existe pas, néanmoins on s'oriente à l'utilisation de molécules à très faible durée atmosphérique (GWP (Global Warming Potential)) car elles ne sont pas toxiques et sont ininflammables. Pour suivre ces évolutions, les professionnels ont besoin de réajuster leurs repères et leurs connaissances.

Des nombreuses recherches sont menées pour trouver de nouveaux fluides écologiques, dont l'impact sur le réchauffement climatique et sur la couche d'ozone est faible. Lors de la conférence de Montréal en 1987 sur les implications de l'activité humaine sur l'environnement et la convention cadre des Nations Unies sur le changement climatique, parmi les recommandations retenues figure celle de fixer un calendrier d'arrêt de production et d'utilisation des fluides frigorigènes contenant des atomes de Chlore, notamment les Chlorofluorocarbures (CFCs) et les Hydrochlorofluorocarbures (HCFCs). Ces fluides frigorigènes sont désignés par l'ensemble de la communauté scientifique comme les principaux responsables de la

formation du trou dans la couche d'ozone stratosphérique, et par conséquent induisant des impacts néfastes pour la santé des populations, la faune et la flore.

De plus, même si les fluides de remplacement (les HFCs et les fluides naturels tels l'ammoniac), sont neutres vis-à-vis de la couche d'ozone, ils n'en demeurent pas moins dangereux pour notre milieu naturel, car les HFCs sont considérés comme des gaz à effet de serre. Cet effet lié aux fuites de fluides frigorigènes a été pointé du doigt par le protocole de Kyoto élaboré en 1997 et ratifié par l'Union Européenne en 2006. Parmi les recommandations adoptées, figure celle de limiter les émissions de ces fluides et ce pour ne pas engendrer d'effets cumulatifs sur l'environnement.

Cette nouvelle contrainte entraîne non seulement la mise en place de politiques de confinement et de récupération systématique des fluides frigorigènes, mais amène aussi à choisir et/ou à produire d'autres réfrigérants purs ou mélanges de fluides frigorigènes qui possèdent un ODP (Ozone Depletion Potential ou Potentiel d'Appauvrissement de l'Ozone (PAO)) nul, un GWP (Global Warming Potential ou du Potentiel de Réchauffement Global (PRG)) très faible ou nul également et avec un coefficient de performance (COP) acceptable, c'est-à-dire que le système doit atteindre son but primaire, qui est la production du froid d'une façon normale. Ces réfrigérants de remplacement étaient choisis principalement, car ils avaient des profils pression - température similaires à ceux qu'ils ont remplacé.

Il est à noter aussi qu'au cours du second workshop sur les réfrigérants qui s'est tenu à Paris (à l'école des mines) en avril 2001, il a été clairement mentionné que les industriels avaient besoin des données précises sur les propriétés thermodynamiques et physiques de ces nouveaux Fluor-alcanes (HFCs), mais malheureusement les propriétés de ces fluides purs ne sont pas identiques à celles des CFCs. Aussi, des mélanges de ses fluides frigorigènes incluant les HFCs sont nécessaires, car d'une part on a besoin de données thermodynamiques permettant de sélectionner les nouveaux corps, et d'autre part de caractériser et modéliser leurs propriétés fonctionnelles. Cela conduit à une véritable période de transition pour le secteur du froid étant donné la nécessité d'apporter de grandes modifications dans les référentiels de conception des circuits frigorifiques.

Il est important de souligner que la connaissance des propriétés physiques et thermodynamiques ainsi que le comportement de phase de nouveaux composés est d'une importance fondamentale et capitale pour la synthèse, l'analyse, l'optimisation, le contrôle et l'exploitation des procédés. Cette connaissance implique des mesures expérimentales des différentes propriétés physiques et des équilibres de phase, ainsi que l'élaboration de protocoles expérimentaux et des tests de conformité. Toutes ces procédures sont coûteuses, laborieuses et nécessitent généralement une expertise et des équipements pas toujours disponibles. C'est ainsi que la modélisation dans le but de corréler et/ou de prédire ces propriétés a été depuis longtemps et reste encore un sujet d'intérêt non seulement du point de vue purement académique mais aussi du point de vue économique et pratique.

La problématique d'un tel travail, du point de vue du spécialiste en génie des procédés, ne peut se situer que dans les différentes étapes de la compréhension phénoménologique et de souligner l'importance de l'apport de la modélisation dans le domaine de la pollution atmosphérique au niveau de l'aide à la décision, de faciliter la coexistence entre la rentabilité, la production du monde industriel et la sécurité des populations environnantes. La procédure de prévention est basée sur l'aspect réglementaire qui comporte à fixer les normes, l'aspect sanitaire qui consiste en un contrôle technique des installations et l'aspect technologique qui a pour but d'améliorer les procédés de traitement.

Les mesures expérimentales sont coûteuses et pas toujours réalisables. Jusqu'à présent, quelques travaux ont été faits pour prédire et/ou corréler les propriétés thermo-physicochimiques. Pour ces raisons, les chercheurs ont développé des méthodes théoriques qui permettent la prédiction numérique des propriétés thermo-physicochimiques de quelques gaz à pollution atmosphérique et leurs substituants non polluants en utilisant les nouvelles techniques et approches de simulation numériques les plus avancées.

Pour combler ses inconvénients, la révolution de l'informatique et le développement de nouvelles méthodes de calcul numérique basé sur l'intelligence artificielle et les sciences cognitives ont donné naissance durant les dernières décennies à de nouvelles méthodes de calcul et de modélisation telles que les réseaux de neurones artificiels (RNAs), les systèmes experts, les algorithmes génétiques, la

logique floue, les machines à vecteurs de support (Support Vector Machine, SVM), etc. Le livre d'Engelbrecht (2007) dans sa deuxième édition présente une excellente introduction de ces techniques sous l'égide de l'intelligence computationnelle. L'efficacité, la fiabilité et la robustesse de ces méthodes ont été démontrées par leurs nombreuses applications dans les différentes disciplines de sciences et d'ingénierie. Himmelblau (2008) a présenté dans un article de revue, un compte rendu sur les expériences de l'application des RNAs en génie chimique et de l'environnement.

Cependant, et bien que l'application potentielle des "RNAs" pour l'estimation des propriétés des fluides frigorigènes a été soulevée par d'autres auteurs, très peu de travaux ont été publiés sur leur application pour la corrélation et/ou la prédiction des propriétés physicochimiques des nouveaux fluides frigorigènes.

C'est dans ce contexte que s'inscrit notre travail qui est de formuler une stratégie adoptant les méthodes basées sur les "RNAs" pour une modélisation simple, fiable et précise pour corréler et/ou de prédire quelques propriétés physicochimiques des mélanges réfrigérants des Fluoro-alcanes (HFCs).

On s'intéresse dans ce travail, non pas à l'étude proprement dite des mélanges de fluides frigorigènes mais à l'élaboration d'un outil de calcul des propriétés physicochimiques des mélanges frigorigènes (purs, binaires et ternaires) de ces nouveaux Fluoro-alcanes (HFCs). Pour ce faire, la connaissance expérimentale des propriétés thermodynamiques et thermo-physiques de ces mélanges dans une large gamme de température et de pression est essentielle car elles constituent la base de données. Ensuite, il y'a lieu d'appliquer les modèles de l'intelligence artificielle (RNAs) disponibles qui permettent de reproduire le plus fidèlement possible les propriétés thermodynamiques des mélanges frigorigènes sélectionnés pour l'étude. Cependant, les propriétés de certains mélanges frigorigènes récemment découverts sont mal connues, ce qui pose un problème quant au choix des modèles permettant de reproduire toutes leurs propriétés. La méthode de RNA permet l'élaboration d'un modèle mathématique de prédiction. Par conséquent, elle peut donc accélérer le processus de conception et réduire considérablement son coût.

Le travail de recherche bibliographique mené a mis en exergue deux faits importants :

- Le fait que les Chlorofluorocarbures (CFCs) et les Hydrochlorofluorocarbures (HCFCs) représentent un véritable enjeu de santé publique et environnementale de par la formation du trou dans la couche d'ozone stratosphérique et comme gaz à effet de serre, mais aussi de par leurs incidences extrêmement élevée et de leurs fatalités;
- L'importance de la modélisation neuronale;

Aussi, cela nous a amené à recourir à l'utilisation d'une méthode neuronale avec une pré-normalisation (les propriétés pseudo-critiques et les trois fractions massiques dans la phase liquide et vapeur des trois systèmes purs, binaires et ternaires choisie pour l'étude). L'utilisation de la méthode neuronale "RNA" n'a cessé de progresser et est même devenue indispensable en génie des procédés. L'approche "RNA" rend la conception d'appareil de réfrigération plus rationnelle en minimisant le nombre d'expériences coûteuses.

Le **premier objectif** de ce travail est l'élaboration d'une base de données. Comme les modèles "RNA" sont dépendants des données expérimentales de référence, le choix de la base de données expérimentale est décisif. Elle doit être composée de données expérimentales consistantes, fiables et obtenues en suivant un protocole expérimental unique. Le choix des variables nécessaires à la description de la sortie (la conductivité thermique, la densité volumique, l'enthalpie et l'entropie) a été fait sur la base du concept qui stipule que le phénomène à modéliser est intimement lié à la phénoménologie de production du froid (transfert de chaleur, transfert de masse et transfert de quantité de mouvement). A cette fin, les paramètres de conditions opératoires représentant les entrées sont bien choisis. Ensuite, il y'a lieu de pré normalisation de la matrice de la base de données et ce par les valeurs réduites pour calculer les propriétés pseudo-critiques et les trois fractions massiques dans la phase liquide et vapeur des trois systèmes purs, binaires et ternaires choisies pour l'étude.

Le **second objectif** a trait à l'élaboration de modèles "RNA" fiables et robustes. Dans ce contexte, cet objectif a été scindé en deux contributions (modélisation de la conductivité thermique, de la densité volumique et de l'enthalpie et de l'entropie) qui ont porté à l'élaboration d'un outil de calcul de certains fluides frigorigènes (R32, R125, R134a, R152a, R143a), et de leurs mélanges (binaires et ternaires), utilisant la modélisation par réseaux de neurones artificiels les plus utilisés à l'heure actuelle dans

le domaine du froid et de la climatisation, pour un but de prédiction dans une large gamme de température et de pression.

A la lecture de la thèse, nous avons organisé ce document en quatre (04) chapitres:

Le premier chapitre relate une description sommaire sur l'impact des CFC et HCFC sur l'environnement et traite le critère du choix des fluides frigorigènes, leurs classifications, les anciennes et les nouvelles règles de sélection ainsi que celles de substitution et enfin réglementation et évolution.

Le deuxième chapitre comporte deux volets :

- Le premier volet est relatif à la revue critique de la littérature bibliographique sur l'état de l'art des travaux de la littérature réalisée sur l'expérimentation et la modélisation des propriétés thermo physico-chimiques des différents fluides frigorigènes en s'articulant spécifiquement sur la modélisation de la conductivité thermique, de la densité et de l'enthalpie et l'entropie. Ainsi, le peu de publications ayant traité la modélisation des propriétés des fluides frigorigènes par les (RNAs) nous a encouragés à investir ce créneau.
- Un second volet a été consacré aux notions de bases sur les réseaux de neurones artificiels (RNAs), comme étant une technique d'intelligence artificielle souvent utilisée dans la modélisation des processus du génie des procédés ces dernières années. Après un rappel succinct sur leurs utilités, leurs classifications et leurs validités, la méthodologie de mise en œuvre de cette approche et les outils nécessaires à leur élaboration (collecte de la base de données, utilisation de méthodes d'analyse de données, validation du modèle et domaine d'applicabilité) est fournie.

Le troisième chapitre comporte deux contributions, la première contribution est basée sur trois axes :

- Le premier axe est basé sur la modélisation de la conductivité thermique de certains fluides frigorigènes (R32, R125, R134a, R152a, R143a), et leurs mélanges (binaires et ternaires).
- Le deuxième axe a porté sur l'utilisation des nouvelles techniques (valeurs réduites) pour calculer les propriétés pseudo-critiques. La précision des modèles neuronaux obtenus est testée par la suite en effectuant une prédiction à travers un troisième axe.

- Le troisième axe est basé sur la collecte d'une nouvelle base de donnée (BD2), des réfrigérants nocifs (R22, R124, R142b), et leurs mélanges binaires et ternaires, et la comparaison de ces modèles entre eux.

La deuxième contribution consiste à la modélisation de la densité volumique, et de deux propriétés thermodynamiques (l'enthalpie et l'entropie) des fluides frigorigènes (R32, R125, R134a) et leurs mélanges binaires et ternaires. Les points expérimentaux ont été obtenus à partir de la littérature et sous des conditions expérimentales différentes utilisant le réseau de neurone artificiel.

Le quatrième chapitre expose les résultats, la discussion et l'interprétation afin de déterminer le modèle approprié de façon précise pour les différentes propriétés et les systèmes étudiés. Il retrace tout l'itinéraire accompli depuis la réduction de la base de données jusqu'au choix du modèle optimal et ce en mettant en exergue les résultats obtenus à chaque étape. Ensuite, il était question de la validation du modèle choisi. Les paramètres statistiques obtenus sont très satisfaisants.

Enfin, on termine ce travail par une conclusion générale qui récapitule l'essentiel des résultats obtenus et des perspectives qui peuvent être envisagées dans le futur.

CHAPITRE 1

L'OZONE ET LES FLUIDES FRIGORIGENES

1.1 Introduction

Certaines substances telles que les composés chlorofluorocarbones CFC et hydrochlorofluorocarbures HCFC utilisés comme fluides frigorigènes, ont un impact négatif sur la "Couche d'Ozone" qui nous protège des rayons ultraviolets.

Les CFC et HCFC sont des gaz contenant du Chlore. Au niveau de la stratosphère, soit à quelques 35 km au-dessus de la surface de notre globe, ce chlore détruit la couche d'ozone par une réaction chimique en chaîne. Les scientifiques ont constaté un appauvrissement sans précédent de cette couche dans l'hémisphère sud en 1998, de même que dans la région arctique au cours de plusieurs printemps.

Cet ozone stratosphérique qui nous protège ainsi que la faune et la flore des rayonnements solaires ne doit pas être confondu avec l'ozone troposphérique. Ce dernier se rencontre au niveau du sol à des concentrations parfois inquiétantes pour la santé humaine quand il fait très chaud en été. En outre, les CFC et HCFC appartiennent au groupe des gaz dits à effet de serre entraînant, à terme, un réchauffement à la surface de notre globe et de là, des inondations dans les régions côtières du monde et un déplacement de la ceinture céréalière.

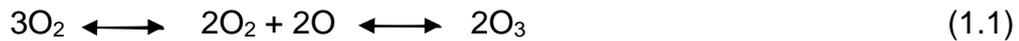
1.2 Position du problème

La nuisance atmosphérique engendrée par la climatisation ou la réfrigération en générale est directement liée au fluide frigorigène. On distingue deux types de phénomènes qui sont : la destruction de la couche d'ozone et la contribution à l'effet de serre.

1.2.1 Destruction de la couche d'ozone

1.2.1.1 L'ozone

L'ozone est un gaz composé de molécules contenant trois atomes d'oxygène (O_3). Les molécules d'oxygène (O_2) présentes dans l'air que nous respirons contiennent seulement deux atomes d'oxygène. Les molécules d'ozone se forment à la suite d'une réaction photochimique qui peut être décrite de façon simplifiée comme suit :



Les molécules d'oxygène réagissent pour former des molécules d'ozone, et en même temps, les molécules d'ozone réagissent pour former des molécules d'oxygène. Si le nombre de molécules d'ozone qui se forment est le même que le nombre de molécules d'ozone qui se décomposent, il s'agit d'une réaction en équilibre dynamique [1].

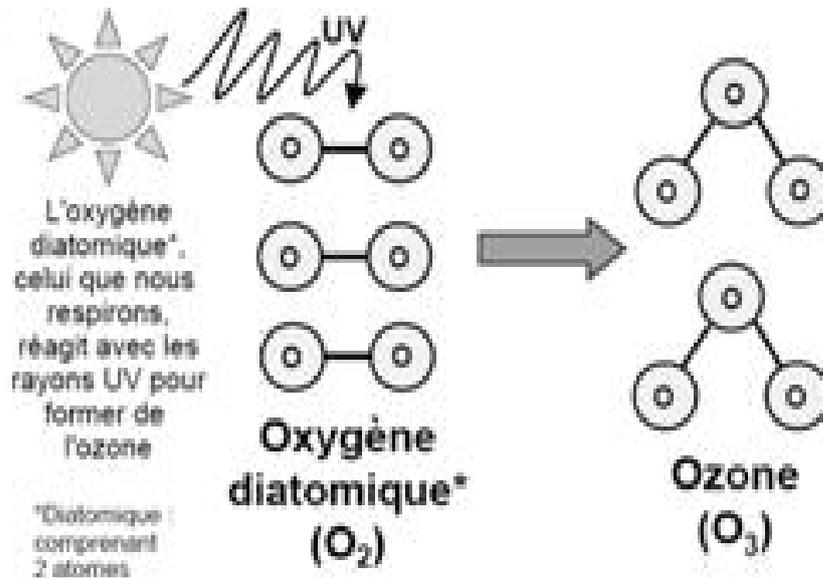


Figure 1 .1 : La formation des molécules d'ozone [2].

1.2.1.2 La couche d'ozone

La couche d'ozone est un terme utilisé pour décrire la présence de molécules d'ozone dans la stratosphère. Cette couche s'étend autour de tout le globe terrestre comme une bulle et agit comme un filtre qui protège contre le rayonnement ultraviolet (UV-B), qui est nocif. Le rayonnement UV-B est une lumière à haute énergie d'origine solaire qui a de graves effets sur la santé humaine et l'environnement. La stratosphère est la partie de l'atmosphère qui se trouve immédiatement au-dessus de la troposphère. Elle commence à une distance de 10 à 20 km de la surface terrestre et s'élève jusqu'à une altitude de 40 à 50 km. La Figure (1,2) indique les différentes couches de l'atmosphère terrestre [1,2].

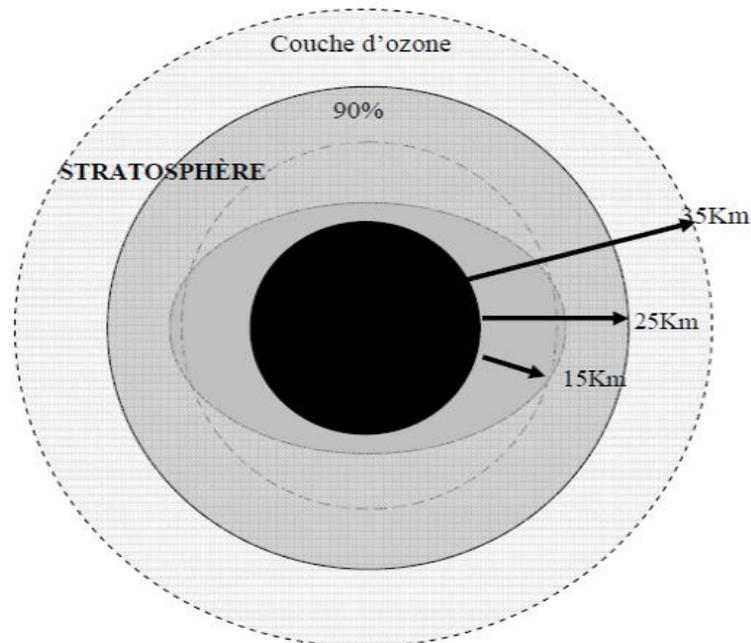


Figure 1.2 : L'ozone dans l'atmosphère [2].

1.2.1.3 Comment l'ozone est-il détruit ?

L'équilibre dynamique entre la formation et la décomposition des molécules d'ozone dépend de la température, de la pression, des conditions énergétiques et des concentrations de molécules. L'équilibre peut être perturbé, par exemple, par d'autres molécules (Cl, Br, F,...) qui réagissent avec l'ozone et le détruisent. Lorsque le processus de destruction est rapide et que la formation de nouvelles molécules d'ozone est trop lente pour remplacer les molécules détruites, l'équilibre est rompu, et la concentration de molécules d'ozone sera donc réduite [1].

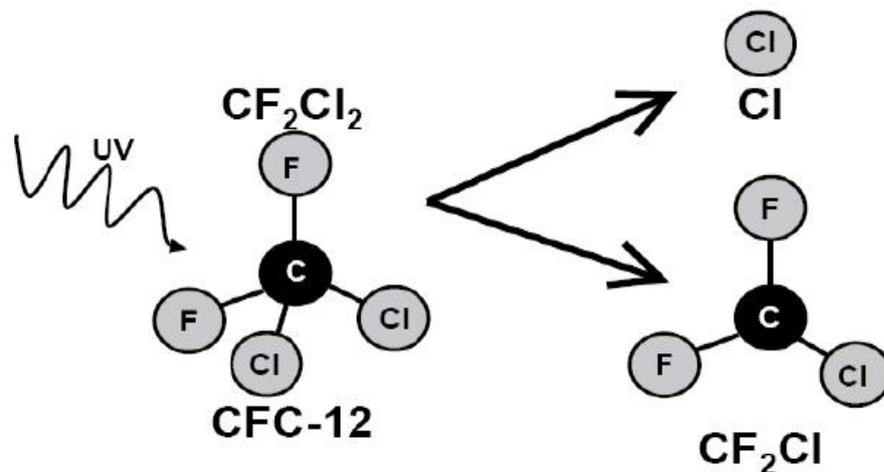


Figure 1.3 : Le rayonnement UV enlève le chlore des CFC [1].

1.2.1.4 Les substances appauvrissant la couche d'ozone

Les substances appauvrissant la couche d'ozone (SACO) sont des substances chimiques pouvant réagir avec les molécules d'ozone dans la stratosphère. Les SACO sont essentiellement des hydrocarbures chlorés, fluorés ou bromés [1].

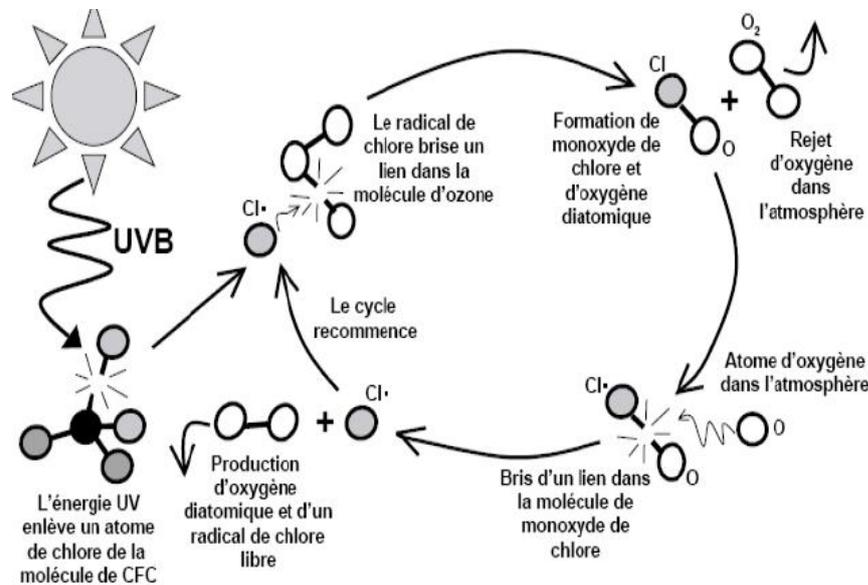


Figure 1.4 : Destruction de l'ozone par les CFC [1].

1.3 Contribution à l'effet de serre

La température de la terre est maintenue par un équilibre radiatif entre l'effet réchauffant provenant du rayonnement solaire, l'effet refroidissant des rayons infrarouges émis par la surface chaude de la terre et l'enveloppe atmosphérique (Figure 1.5). La terre est essentiellement chauffée par le rayonnement solaire (une puissance moyenne par an est de 342W/m^2 au sommet de l'atmosphère, le point (A) de la Figure 1.5). Une grande partie de cette énergie est absorbée par les différents composants de notre planète (sol, océans atmosphère) puis transformée en chaleur.

Cette chaleur permet à la terre d'émettre des infrarouges, interceptés à effet de serre. L'énergie interceptée va chauffer de nouveau l'atmosphère, réchauffement qui va engendrer des infrarouges qui vont de nouveau retourner au sol. Le sol reçoit donc par deux fois l'énergie : une fois par le rayonnement solaire et une fois par le rayonnement de l'atmosphère, d'où l'élévation de sa température. Sans cet effet de serre naturel, la température moyenne à la surface du globe terrestre serait (-18°C) contre $(+15^\circ\text{C})$ actuellement [3].

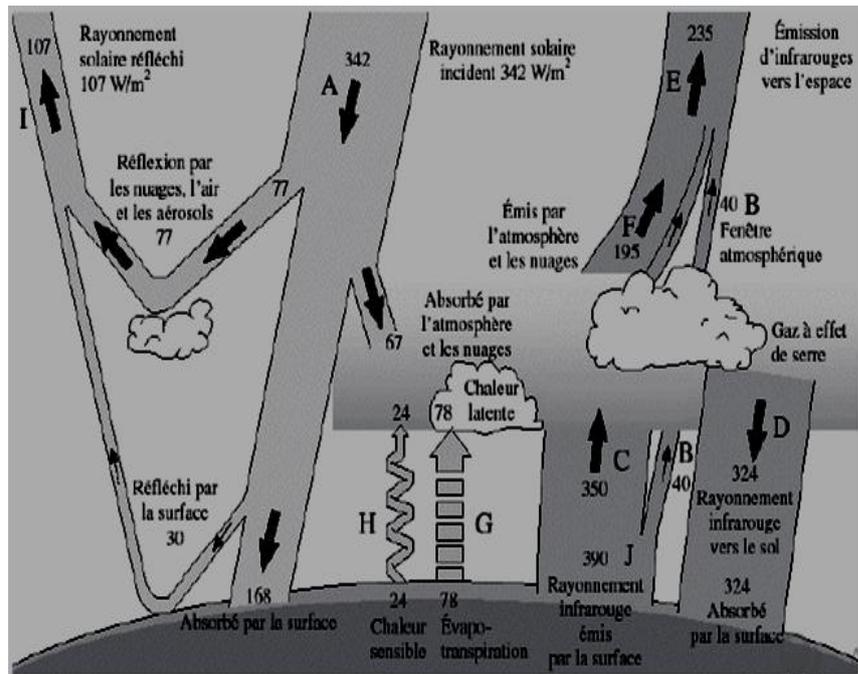


Figure 1.5: Représentation des phénomènes d'échanges radiatifs dans l'atmosphère [3].

1.4 Les fluides frigorigènes

La production du froid est nécessaire à l'élaboration et à la conservation de certains produits, notamment alimentaires, pharmaceutiques et chimiques. Les fluides frigorigènes sont des substances utilisées dans une installation frigorifique en vue d'absorber la chaleur du milieu à refroidir par l'intermédiaire d'un cycle thermodynamique.

Après le remplacement des CFC (ChloroFluoroCarbone), puis des HCFC (HydroChloroFluoroCarbone) par les HFC (HydroFluoroCarbone), ces derniers pourraient bien être remplacés par d'autres fluides frigorigènes dits "naturels" comme les HC (HydroCarbone), le CO₂ ou encore l'ammoniac. Ces derniers possèdent toute fois des propriétés particulières qui, pour le moment, freinent leur développement : les hydrocarbures sont inflammables, l'ammoniac est toxique et le CO₂ doit être comprimé à une pression très élevée.

a- Dates importantes

- En 1987, le protocole de MONTREAL limite la production des CFC : Ce protocole est régulièrement révisé. La production des CFC s'est terminée le 31 décembre 1994.

- En 1992, la conférence de COPENHAGUE limite la production des HCFC au niveau de 1989.

De nos jours, seuls les HFC sont habilités : ce sont les substituts des CFC et HCFC. En Europe, depuis Octobre de l'an 2000, la production et l'utilisation des CFC sont interdites. Pour les HCFC, elles sont interdites depuis Janvier 2015.

1.4.1 Définition des fluides frigorigènes

Un fluide frigorigène est une substance qui évolue dans le circuit d'une machine frigorifique et qui grâce à un phénomène endothermique consistant en un changement d'état faisant passer la substance de l'état liquide à l'état gazeux dans un évaporateur, permet de produire du froid par retrait de chaleur. Celle-ci est évacuée hors de la machine par un phénomène exothermique consistant en un changement d'état inverse du précédent, c'est-à-dire faisant passer la substance de l'état gazeux à l'état liquide. Certains de ces fluides peuvent être toxiques, inflammables, destructeurs de la couche d'ozone et participant à l'effet de serre [4,5].

1.4.2 Classification des fluides frigorigènes

La dénomination la plus classique des réfrigérants est celle de leur numéro de réfrigérant (R22, R134a). Ce type de dénomination, défini par l'ASHRAE (American Society of Heating Refrigerating and Air Conditioning Engineers) dans sa norme 34, et par la norme internationale ISO 817, est unique pour chaque réfrigérant reconnu internationalement. Cette nomenclature permet de déterminer le type de fluide, sa composition, en fonction du nombre repris dans la dénomination. Les fluides frigorigènes actuellement utilisés peuvent être subdivisés en deux catégories :

1.4.2.1 Les réfrigérants halogénés

a- Nomenclature particulière

- Pour caractériser un fluide frigorigène on utilise une notation du type RXYZ ou R désigne le terme "Réfrigérant", X, Y, Z sont les chiffres caractéristiques de la composition et en fonction de cette notation, on peut donner la classification suivante des principaux fluides frigorigènes. Les réfrigérants halogénés ont une nomenclature plus complexe, Ils sont désignés dans la profession par un numéro de code obtenu de la manière suivante [6]:
- Le chiffre des unités correspond au nombre d'atomes de fluor dans la molécule,

- Le chiffre des dizaines correspond au nombre d'atomes d'hydrogène plus un,
- Le chiffre des centaines correspond au nombre d'atomes de carbone moins un.

À titre d'exemple :

Le R22 désigne le Chlorodifluorométhane ou CHClF_2 .

Pour les Chlorofluoroéthanes, les isomères de position sont distingués par l'addition éventuelle, à droite du numéro, d'une lettre a, b, c, etc., dans l'ordre de dissymétrie croissante. Le critère de dissymétrie est la différence entre les sommes des masses atomiques des atomes portés par chacun des deux carbones de la molécule.

À titre d'exemple :

Le R134 désigne la molécule de CHF_2 ,

Le R134a désigne la molécule de $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{F}$.

Par extension, cette nomenclature est utilisée pour des produits où le brome remplace tout ou partie du chlore. Les mêmes règles de numérotation sont appliquées en ajoutant à droite du code la lettre B suivi du nombre d'atomes de brome présents.

À titre d'exemple :

Le R13B1 désigne la molécule de CF_3Br .

Par extension, cette nomenclature est utilisée pour des composés insaturés. Les mêmes règles sont appliquées en ajoutant à gauche du code un chiffre désignant le nombre de doubles liaisons.

À titre d'exemple

Le R1132a désigne la molécule $\text{CH}_2 = \text{CF}_2$.

Pour les composés cycliques, la lettre C est utilisée devant le numéro d'identification du fluide frigorigène.

À titre d'exemple :

Le RC318 (OctaFluoroCycloButane – C_4F_8).

Des règles particulières permettent de coder les propènes, les composés, les composés à 4 atomes de carbone ou plus, etc.

b- Mélanges des fluides frigorigènes

Les CFC, HCFC et HFC sont utilisés à l'état pur ou en mélange. Dans le cas des mélanges, nous avons les mélanges zéotropes et les mélanges azéotropes. Les mélanges sont définis par les numéros d'identification et la proportion en masse des fluides frigorigènes auxquels ils correspondent.

Un mélange zéotropique est un mélange de réfrigérant qui ne se comporte pas comme un fluide homogène lors de la condensation. Ces mélanges se voient attribuer un numéro d'identification de la série 400. Les numérotations sont chronologiques dans l'ordre d'acceptation du fluide frigorigène, R401A, R402A, R403B, R404A, R407C, R408A, R409A, R410A, etc.

Les numéros sont chronologiques dans l'ordre d'acceptation du fluide frigorigène par l'ASHRAE [6, 7,8].

Exemple : le R407A (R32/R125/R134a (20/40/40)), le R407B (R32/R125/R134a (10/70/20)), R407C (R32/R125/R134a (23/25/52)), R407D (R32/R125/R134a (15/15/70)), R407E (R32/R125/R134a (25/15/60)).

En cas de mélanges de corps purs identiques, mais dans des proportions différentes, on associe alors une lettre majuscule en fin de numérotation (A, B ou C).

- R407A : R32/R125/R134a 20/40/40 (%) de composition massique,
- R407B : R32/R125/R134a 10/70/20 (%) de composition massique,
- R407C : R32/R125/R134a 23/25 /52 (%) de composition massique.

Un mélange azéotropique est un mélange de réfrigérants qui se comporte comme un fluide homogène (corps pur), ces mélanges se voient attribuer un numéro d'identification de la série 500.

Exemple : le R507 (R125/R143a (50/50)) [7].

1.4.2.2 Les réfrigérants naturels

a- Composés organiques variés (Hydrocarbures)

Ce sont des composés qui contiennent du carbone et de l'hydrogène. Les plus utilisés en production du froid sont les hydrocarbures. Un numéro de la série 600 est attribué aux composés organiques; les numéros sont attribués de façon successive.

Exemple : le R600, butane et R600a, isobutane.

b- Composés inorganiques

Ce sont des substances trouvées dans la nature. Un numéro de la série 700 est attribué aux composés non organiques; les numéros d'identification sont formés en ajoutant la masse moléculaire relative des composants à la valeur 700.

Exemple :

- R717 ammoniac (NH₃) dont la masse molaire est de 17 g/mole,
- R718 l'eau (H₂O) dont la masse molaire est de 18 g/mole. [7].

Tableau 1.1 : Les fluides frigorigènes [9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19].

Réfrigérant	Formule	Masse molaire (g/mol)	T _b (°C)	T _c (°C)	P _c (Map)	ODP	GWP 100 ans
HFC-32	CH ₂ F ₂	52.02	-51.7	78.1	5.78	0	650
HFC-125	CHF ₂ CF ₃	120.02	-48.1	66.2	3.63	0	2800
HFC-134a	CH ₂ FCF ₃	102.03	-26.1	101.1	4.06	0	1300
HFC-143a	CH ₃ -CF ₃	84.04	-47.2	72.9	3.78	0	3800
HFC-152a	CH ₃ CHF ₂	66.05	-24.0	113.3	4.52	0	140
HCFC-123	CHCl ₂ CF ₃	152.93	/	183.8	3.66	0.014	90
HCFC-124	CHClFCF ₃	136.48	-12.0	122.3	3.62	0.03	470
Mélanges de HFC							
R-404A	R125/143a/134a(44/52/4)	97.60	-46.6	72.1	3.74	0	3260
R-407A	R32/125/134a/(20/40/40)	90.11	-45.2	81.9	4.49	0	1770
R-407B	R32/125/134a(10/70/20)	102.94	-46.8	74.4	4.08	0	2290
R-407C	R32/125/134a(23/25/52)	86.20	-43.8	87.3	4.63	0	1530
R-407D	R32/125/134a(15/15/70)	90.96	-39.4	91.6	4.48	0	1360
R-407E	R32/125/134a(25/15/60)	83.78	-42.8	88.8	4.73	0	1360
R-410A	R32/125(50/50)	72.58	-51.6	72.5	4.95	0	1730
R-507A	R125/143a(50/50)	98.86	-47.1	70.9	3.79	0	3300
Hydrocarbures							
R-270	CH ₂ CH ₂ CH ₂	42.08	-33.5	125.2	5.58	0	/
R-290	CH ₃ CH ₂ CH ₃	44.10	-42.1	96.7	4.25	0	~20
R-600	CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₃	58.12	-0.5	152	3.80	0	~20
R-600a	CH-(CH ₃) ₂ -CH ₃	30.07	-11.6	134.7	3.64	0	~20
R-170	CH ₃ CH ₃	42.08	-88.6	32.2	4.87	0	~20
R-1270	CH ₃ CH=CH ₂	/	-47.7	92.4	4.67	0	/
Fluides inorganiques							
R-718	HO ₂ (eau)	18.02	100.0	374.2	22.10	0	<1
R-744	CO ₂ (Dioxyde de Carbone)	44.01	-78.4	31.1	7.38	0	1
R-717	NH ₂ (Ammoniac)	17.03	-33.3	132.3	11.3	0	<1

Dans le Tableau 1.1 nous avons rassemblé les fluides frigorigènes (les plus couramment utilisés dans des installations neuves ou anciennes, soit ceux en études de développement) la température d'ébullition, la température, la pression critique ainsi que les valeurs de l'ODP et du GWP.

1.5 Les règles de la sélection des réfrigérants

Les fluides frigorigènes ont pour rôle d'assurer les transferts thermiques entre l'évaporateur et le condenseur. Les contraintes d'environnement ont conduit à des changements importants pour la sélection des fluides frigorigènes. Les critères permettant la sélection des fluides frigorigènes sont basés sur quatre points essentiels:

- Les critères écologiques,
- Les critères de sécurité (toxicité et inflammabilité),
- Les critères économiques,
- Les critères thermodynamiques.

1.5.1 Les critères écologiques (ODP, GWP)

Deux contraintes d'environnement sont venues conditionner l'utilisation des fluides frigorigènes. La première concerne la couche d'ozone (ODP), et la deuxième concerne le réchauffement de la planète (GWP).

a. ODP (Ozone Depletion Potential)

ODP ou PACO (Pouvoir d'Appauvrissement de la Couche d'Ozone) : c'est le pouvoir que possède une molécule de réfrigérant à détruire la couche d'ozone. Le potentiel d'appauvrissement de la couche d'ozone d'un réfrigérant est représenté par sa valeur ODP. Cette valeur est définie par rapport à l'impact du R11, qui sert, par convention, de fluide de référence (ODP R11=1). Plus la valeur d'un fluide est réduite, moins son potentiel d'appauvrissement est grand. Cette valeur est dépendante de certains facteurs, comme la durée de vie atmosphérique et le nombre de Chlore ou de Brome dans la molécule. Elle est constamment adaptée en fonction des nouvelles observations réalisées [1].

Tableau 1.2 : Principaux halo carbures utilisés –Substances appauvrissant la couche d’Ozone (SACO) [20].

CFC/HCFC/halons	Potentiel d'appauvrissement de l'ozone (ODP)	Potentiel de réchauffement global (GWP100ans)
CFC-11	1.000	4000
CFC-12	1.000	8500
CFC-115	0.600	9300
CFC-503	0.600	11860
HCFC-22	0.055	1700
HCFC-123	0.02	93.00
HCFC-142b	0.065	2000
Substances de remplacement des SACO		
R32	0	550
R125	0	3400
R-134a	0	1300
R-290	0	20
R-600a	0	20

b.GWP (Global Warming Potential)

GWP ou PRG : (Pouvoir de Réchauffement Global) Mesure l'effet de serre de l'unité de masse d'une substance émise aujourd'hui par rapport au CO₂ et sur une durée de 100 ans. Différentes analyses déjà effectuées sur les équipements frigorifiques montrent que deux contributions sont essentielles : les émissions de CO₂ associées à la consommation d'énergie et les émissions directes du fluide frigorigène à l'atmosphère.

Le concept de TEWI (Total Equivalent Warming Impact ou Effet de serre équivalent total) a été introduit pour prendre ces éléments en compte. La formule (1.2) permet de calculer les différentes contributions. Selon les applications, la contribution provenant de la consommation d'énergie peut être prépondérante ou au contraire, la contribution provenant des émissions de fluide frigorigène est équivalente [1,20].

$$TEWI = (GWP \cdot mi \cdot (1 - dr)) + [GWP \cdot mi \cdot de + (E \cdot bt \cdot tt)] \cdot nt \quad (1.2)$$

Avec :

TEWI : Total Equivalent Warming Impact (Effet de serre équivalent total),

TEWI: kg de CO₂ produit pendant la durée de vie de l'équipement,

mi: charge initiale de fluide frigorigène (kg),

dr: efficacité de récupération lors de la mise au rebut (kg de fluide récupéré/charge Initiale) de : taux d'émission annuel (kg de fluide émis/kg de charge initiale),

GWP: Global Warming Potential,

de: taux d'émission annuel (kg de fluide émis/kg de charge initiale),

E: consommation journalière d'électricité (kWh / 24 h),

bt: émission de CO₂ par kWh d'énergie électrique produite (kg CO₂/kWh),

tt: nombre de jours de fonctionnement annuel (jours/an),

nt: durée de vie de l'installation (an).

1.5.2 Les critères de sécurité (toxicité et inflammabilité)

Le fabricant du matériel frigorifique et de climatisation, assume la responsabilité technique de la conception de l'équipement mais aussi la responsabilité juridique en cas d'accident, lorsque cet accident indique que les choix initiaux, comme celui du fluide frigorigène, sont impliqués.

Ce rappel est fait pour aider à différencier les conclusions provenant d'experts, de laboratoires ou d'organisations environnementalistes qui n'ont aucune responsabilité directe sur les conséquences de la conception, de l'exploitation, de la maintenance, ni de la mise au rebut des équipements. Les processus d'évaluation des risques et de fixation des limites d'utilisation de fluides frigorigènes toxiques ou inflammables doivent être connus. Les règles d'élaboration des groupes de normalisation doivent être décrites pour comprendre la nature des conclusions provenant de la mise à jour des normes de sécurité. De nombreuses études poussées sont en cours sur les aspects :

- Toxicité (par inhalation),
- Action biologique (cancers, malformations des nouveaux-nés),
- Action sur les denrées entreposées en chambre froide,
- Inflammabilité.

Certains critères sont facilement quantifiables :

- Par la concentration limite d'exposition (exprimée en ppm),

- Par la limite inférieure d'inflammabilité (concentration, en volume, dans l'air sous la pression atmosphérique).

Tableau 1.3: Classement de sécurité des fluides frigorigènes [21].

	Faible toxicité	Haute toxicité	
Inflammable	A3	B3	Limite inférieure d'inflammabilité $\leq 0,10 \text{ kg/m}^3$ ou chaleur de combustion $\geq 19000 \text{ kJ/kg}$
Faiblement inflammable	A2	B2	Limite inférieure d'inflammabilité $> 0,10 \text{ kg/m}^3$ et chaleur de combustion $< 19000 \text{ kJ/kg}$
Non inflammable	A1	B1	Aucune limite inférieure d'inflammabilité
	Aucune toxicité connue pour des concentrations $\leq 400 \text{ ppm}$	Toxique pour des concentrations $> 400 \text{ ppm}$	

Tableau 1.4 : Principaux codes de sécurité (toxicité et inflammabilité) [22].

	NH3	R134a	R22	Propane	Butane	R407C	R404A	R410A
Concentration limite d'exposition (ppm)	25	1000	1000	2500	800	1000	1000	1000
limite inférieure d'inflammabilité (%)	14.8	/	/	2.3	1.9	/	/	/
Code sécurité	B2	A1	A1	A3	A3	A1	A1	A1

Cette classification est identique dans son principe pour les différentes normes (ISO 5149, PR-EN378, NFE35-400, ASHRAE 15 et 34). La mise sur le marché de nouveaux fluides suppose que les études de toxicité (ammoniac) et d'inflammabilité (Hydrocarbures) soient préalablement effectuées et entraînent des mesures de sécurité toutes particulières pour leur usage [22].

Même si une nouvelle norme 34-1997 de l'ASHRAE intitulée "Number Désignation and Safety Classification of Refrigerants" classe les frigorigènes

couramment utilisés en fonction de leur toxicité et de leur inflammabilité, il existe six groupes de sécurité définis en fonction de l'inflammabilité et de la toxicité d'un frigorigène : A1, A2, A3, B1, B2 et B3. La lettre A indique une toxicité plus faible et la lettre B, une toxicité plus élevée. Le chiffre 1 indique que la flamme ne se propage pas, 2 que l'inflammabilité est faible, et 3, que l'inflammabilité est élevée.

Cas des mélanges

Pour les mélanges, non azéotropiques ou azéotropiques, dont les caractéristiques d'inflammabilité et/ou de toxicité peuvent varier si la composition change, on utilise la classification dans le pire des cas de fractionnement.

Exemple : le R404A est classé A1 [23].

a- Toxicité

Une classification des fluides suivant leur toxicité existe:

- groupe A, peu toxiques : fluides dont la concentration moyenne dans le temps, n'a pas d'effet adverse sur presque tous les travailleurs qui peut être exposés jour après jour et dont la valeur est égale ou inférieure à $400 \text{ ml} / \text{m}^3$,
- groupe B, fortement toxiques : fluides dont la concentration moyenne dans le temps n'a pas d'effet adverse sur presque tous les travailleurs qui peuvent être exposés jour après jour et dont la valeur est supérieure à $400 \text{ ml} / \text{m}^3$. Les valeurs de ces proportions acceptables peuvent fortement différer réglementairement d'un pays à un autre.

L'usage de frigorigènes présentant, comme l'ammoniac, un certain degré de toxicité, ne doit pas être considéré comme impossible à la condition de prendre des mesures convenables de surveillance et de protection, et lorsque les locaux hébergent du public, de faire usage de fluides frigoporteurs pour transporter le froid de la machine frigorifique (placée alors dans des conditions de sécurité suffisante) vers les systèmes ou les locaux publics à refroidir.

Une action sur les denrées et produits entreposés dans les chambres froides; les produits entreposés en chambres froides (produits périssables ou autres) sont généralement coûteux. Aussi convient-il de se poser des questions sur les conséquences économiques de la présence de ces produits dans une atmosphère chargée de frigorigène.

b-Inflammabilité

Des substances susceptibles de faire d'excellents frigorigènes, comme les hydrocarbures, ont été rejetés en raison de leur caractère combustible. Parmi les dérivés halogénés des hydrocarbures, ceux qui renferment encore suffisamment d'atomes d'hydrogène dans leur molécule, en générale deux ou plus, sont combustibles : Le R32, la famille des R140, des R150, etc. On évite donc l'utilisation de ces fluides purs, mais on les rencontre presque toujours dans des mélanges frigorigènes où, dilués avec des fluides incombustibles, ils ne posent aucun problème. L'ammoniac lui aussi est combustible.

1.5.3 Les critères économiques

L'économique est parmi les facteurs impliqués dans le choix des fluides frigorigènes. Le prix au kg du frigorigène est très différent selon qu'il s'agit d'un fluide simple, comme l'ammoniac, ou d'un fluide plus récent et plus complexe comme un mélange de HFC.

Mais le coût du fluide frigorigène rapporté à celui de l'installation se situe entre 1 et 3%, ce qui reste faible. Et les coûts indirects liés au choix du fluide (dispositifs de sécurité, équipements électriques antidéflagrant, conception étanche du local technique, etc.) seront sans doute plus déterminants.

- Prix du frigorigène et des lubrifiants associés : C'est un critère considérablement fluctuant. Son impact sur le choix du fluide, longtemps considéré comme mineur, voit actuellement son importance croître. L'ammoniac, beaucoup moins dense et beaucoup moins cher que les frigorigènes halogénés, est particulièrement économique. Le prix des lubrifiants associés aux frigorigènes est aussi à considérer. Les huiles polyol esters, imposées par les frigorigènes HFC et leurs mélanges, sont beaucoup plus chères que les huiles minérales acceptables avec les anciens frigorigènes.
- Incidence du frigorigène sur le prix de l'installation.
- Disponibilité du frigorigène elle doit être suffisante pour couvrir les besoins des installateurs et des agents de maintenance des installations et cela sans délai.

1.5.4 Les critères thermodynamiques

- Le coefficient de performance : Un aperçu de la variation de l'efficacité énergétique du système due à la substitution du fluide peut être obtenu en comparant le coefficient de performance théorique des deux fluides. Cependant, il est important de noter que cette méthode ne tient pas compte de toutes les propriétés du réfrigérant ou de l'installation. Elle ne peut donc servir qu'en première approximation pour la comparaison entre différents fluides.
- La température critique du fluide doit être compatible avec les besoins en froid.
- La conductivité thermique du fluide, importante pour le transfert de chaleur lors de la condensation et de l'évaporation, joue particulièrement un rôle dans le cas de l'utilisation de réfrigérants zéotropes [9, 12, 13,14, 15, 16, 17, 18, 19].

1.6 La substitution de réfrigérants

L'abandon des CFC et HCFC touche de nombreuses applications parmi lesquelles on peut citer la réfrigération, le froid domestique, la climatisation, les matériels de lutte contre l'incendie, les aérosols et implique ainsi le remplacement, sous une forme ou une autre, du système frigorifique.

Ce remplacement peut prendre la forme soit :

- De l'entièreté de l'installation, ce qui représente une solution simple, mais généralement coûteuse,
- Du réfrigérant par un autre neutre vis-à-vis de la couche d'ozone, une solution selon le cas difficile à réaliser et pouvant avoir certaines conséquences sur la production frigorifique.

Pour les installations en fin de vie ou ayant des problèmes techniques (inétanchéité, pannes, mauvaise efficacité énergétique etc.), le remplacement total de l'installation s'avère plus intéressant que la simple substitution du réfrigérant. D'un autre côté, le remplacement du fluide frigorifique peut être réalisé, dans les limites du techniquement possible, sur des installations relativement neuves ou étant encore en bon état de fonctionnement. Les critères de choix entre ces deux solutions sont multiples et doivent entre autres tenir compte des aspects suivants :

- Faisabilité technique,
- Coûts financiers.

Afin de remplacer les CFC et HCFC, l'industrie chimique a proposé les Hydrofluorocarbures (HFC). Ces fluides et leurs mélanges sont aujourd'hui les substituts privilégiés à tous les fluides contenant du chlore.

Cependant, bien que les HFC présentent des caractéristiques très similaires aux CFC et aux HCFC, la substitution d'un fluide par un autre ne peut être réalisée directement : les niveaux de pression, les systèmes de compression, les échangeurs de chaleur présents dans les installations frigorifiques doivent être adaptés à ce type de fluide.

Enfin, les seuls fluides de substitution purs sans inconvénient vis-à-vis de la couche d'ozone et de l'effet de serre sont les fluides non halogénés comme l'ammoniac (R717), le propane (R290), l'isobutane (R600a), le gaz carbonique (R744) et l'eau (R818).

L'ammoniac, le butane et le propane ayant de très bonnes caractéristiques thermodynamiques, ils constituent cependant des alternatives très sérieuses, et leur usage s'est sensiblement développé au cours des dernières années. Malgré ses performances relativement faibles et les hautes pressions qu'il demande, le gaz carbonique est étudié comme fluide pour les installations de climatisation automobile, où les risques de fuite sont élevés et remettent en cause l'utilisation du R134a à fort GWP.

1.7 Les fluides de substitution

Les fabricants de fluides frigorigènes considèrent en effet qu'à l'exception du R 134a, il est maintenant peu probable de trouver des fluides purs qui possèdent des propriétés thermodynamiques leur permettant d'être de parfaits substituts aux anciens fluides. En revanche, en mélangeant des fluides purs dans des proportions bien choisies, il est possible d'obtenir des caractéristiques mieux adaptées, ce qui explique l'intérêt que suscitent les mélanges. D'ailleurs, beaucoup de travaux ont concerné les performances des mélanges de fluides frigorigènes utilisés pour remplacer ceux qui doivent disparaître [24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31].

Nous avons vu plus haut que les fluides remis en cause par le Protocole de Montréal et ses amendements représentaient 90 % des applications. Il s'agit essentiellement de deux CFC, le R11 et le R12, bannis à partir de 1994, et de deux

HCFC, le R22 et le R502 (un mélange), bannis à partir de 2014. Leurs principales applications étaient les suivantes :

- R11 : groupes refroidisseurs d'eau,
- R12 : froid domestique, climatisation automobile,
- R22 (le plus vendu) : froid alimentaire, industriel, transports frigorifiques,
- R502 (mélange 48,8 % R22, 51,2 % R115, utilisé comme substitut du R22 pour des taux de compression élevés) : réfrigération supermarchés, transports frigorifiques. Les fluides de remplacement possibles sont aujourd'hui les suivants [9, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19] :
- Le R134a (HFC) pour le R 12 (froid domestique et commercial),
- Le R404A (mélange HFC 44 % R143a, 52 % R125, 4 % R134a) pour le R22 (froid commercial, transports frigorifiques),
- Le R407C (mélange HFC 23 % R32, 25 % R125, 52 % R134a) pour le R22 (conditionnement d'air de petite et moyenne puissance),
- Le R410A (mélange HFC 50 % R32, 50 % R125) candidat possible pour remplacer le R22 (climatisation air-air, transports frigorifiques).

1.8 Réglementation et évolution

Entré en vigueur le 1^{er} Janvier 1989, le Protocole de Montréal a eu pour objectif de réduire de 50% à l'horizon 1999 la production et la consommation des cinq CFC les plus utilisés (R11, R12, R113, principalement) et de trois composés bromés (halons) par rapport au niveau de 1986. Cet accord constituait le premier accord de coopération internationale en matière de protection de l'environnement.

Les mesures préconisées par cet accord s'étant avérées insuffisantes, le Protocole de Montréal fut ajusté et amendé par les réunions de Londres (1990), Copenhague (1992) et Vienne (1995). Sur le plan de la communauté Européenne, des textes réglementaires relatifs à la production et aux utilisations des CFC et HCFC sont promulgués en 2000. (Règlement n° 2037/2000 du Parlement Européen et du Conseil du 29 juin 2000, modifié par les règlements n° 2038/2000 et 2039/2000 du 28 septembre 2000. Le règlement communautaire n° 2037/2000 concernant les CFC utilisés comme fluides frigorigènes a fixé :

- Au 1^{er} Octobre 2000, l'interdiction de production, de mise sur le marché et d'utilisation (sauf à des fins de maintenance), d'importation et de mise sur le

marché d'équipements, d'exportation d'équipements contenant des CFC, ainsi que l'obligation de récupérer et de détruire les CFC contenus dans tout équipement de réfrigération, climatisation et pompes à chaleurs (sauf ménagers).

- Au 1^{er} Janvier 2001, l'interdiction d'utilisation des CFC aux fins de maintenance et d'entretien (réfrigération et conditionnement d'air).
- Au 1^{er} Janvier 2002, l'obligation de récupérer et de détruire les CFC contenus dans les réfrigérateurs et congélateurs ménagers.

Le règlement n°2037/2000 a également fixé le devenir des HCFC. A titre d'information, citons quelques dates limites prévues, concernant :

- Leur production (gel basé sur la production de 1997 au 1^{er} Janvier 2000, arrêt total au 1^{er} Janvier 2026).
- Leur mise sur le marché par les producteurs et importateurs (gel sur la base de 1989 depuis 1995; interdiction de mise sur le marché.
- Leur utilisation comme fluide frigorigènes (interdiction d'utilisation de HCFC dans les équipements de froid et de conditionnement d'air fabriqués après 1996 et récupération obligatoire des HCFC dans ces équipements au 1^{er} Janvier 2000; interdiction d'utilisation de HCFC pour la production de tout équipement de froid ou de conditionnement d'air au 1^{er} Janvier 2004; enfin interdiction d'utilisation de HCFC vierges pour la maintenance et l'entretien de tout équipement au 1^{er} Janvier 2010.
- Leur utilisation comme solvants (interdiction d'utilisation des HCFC pour la production de toutes les mousses au 1^{er} Janvier 2004).
- Leur utilisation comme solvants (interdiction d'utilisation des HCFC dans tous les usages de solvants sauf les applications aérospatiales et aéronautiques au 1^{er} Janvier 2002, interdiction dans tous les usages de solvants au 1^{er} Janvier 2009).

Toutes ces mesures réglementaires ont entraîné une diminution drastique de la production des CFC, au profit à court des termes des HCFC, et à long terme des HFC [32].

1.9 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons présenté un bref aperçu sur les méthodes de réfrigérations et on a essayé de montrer la possibilité du choix du fluide frigorigène (pur ou mélange) pour optimiser les performances en termes d'efficacité et d'impact sur l'environnement, mais aussi de sécurité et de coût. Les propriétés thermodynamiques des quelques fluides frigorigènes sont des facteurs clés dans la sélection du réfrigérant, car elles déterminent les performances du système. L'étude critique dans ce sens va être abordée dans le prochain chapitre.

CHAPITRE 2

L'ETAT DE L'ART ET GENERALITES SUR LES RESEAUX DE NEURONES ARTIFICIELS

2.1 Introduction

Ce chapitre s'articule sur deux parties :

Dans la première partie, une recherche bibliographique relative aux propriétés thermodynamiques des réfrigérants et leurs mélanges a été effectuée. Comme souligné dans l'introduction générale, les principales propriétés auxquelles nous nous sommes intéressés sont : La conductivité thermique, la densité volumique, l'enthalpie et l'entropie qui montrent l'intérêt de plus en plus croissant accordé aux procédés en termes de mesures et méthodes expérimentales aux systèmes étudiés et aux méthodes de modélisation dans le but de corrélation et de prédiction.

Dans la deuxième partie, nous nous intéressons à l'application des réseaux de neurones. Dans un premier temps, nous rappelons les définitions et notations de bases relatives aux réseaux de neurones, après un historique sur l'apparition des RN et la présentation du modèle biologique et mathématique du neurone. Nous poursuivons en exposant les types et la méthodologie d'apprentissage. Nous présentons aussi, d'une manière générale, les étapes de conception d'un réseau de neurone : le choix des entrées et des sorties, l'élaboration de la base de données et de la structure du réseau, etc. Les réseaux de neurones sont susceptibles d'apporter des solutions efficaces.

2.2 L'état de l'art et revue critique de la littérature

2.2.1 Travaux expérimentaux réalisés dans le domaine de la réfrigération

Le contexte de ce travail s'intéresse à la connaissance des différents réfrigérants et leurs mélanges, l'étude de ces divers systèmes dans le domaine de la réfrigération concerne d'une part l'aspect expérimental (technique et mesures) et l'aspect modélisation des données obtenues. Les produits étudiés sont des mélanges (purs, binaires et ternaires) des composés R32, R125, R134a, R152a, R143a (qui sont des HFC) d'intérêt très actuel pour les industries de la climatisation et de la réfrigération. Sur l'aspect modélisation, plusieurs approches ont été abordées également.

Dans la littérature, beaucoup de travaux relatifs à l'expérimentation des différents réfrigérants qui regroupent plusieurs propriétés ont été publiés par plusieurs auteurs. De plus, un nombre important d'études montre comment calculer expérimentalement certaines propriétés (la conductivité thermique, Perkins et Huber, [33, 34], et Alam et al. [35]) la densité, la diffusivité thermique, la vitesse de son, l'enthalpie, etc.), assez importantes. Quelques travaux expérimentaux sur la conductivité thermique et la densité volumique seront reportés dans le troisième chapitre (03) qui englobe tous les fluides frigorigènes R32, R125, R134a, R152a, R143a et leurs mélanges binaires et ternaires. Cette étude a été effectuée à des divers intervalles de températures et de pressions.

2.2.2 Travaux réalisés sur la modélisation dans le domaine de la réfrigération

Dans la littérature, de nombreux travaux ont été réalisés sur la modélisation des diverses propriétés thermo-physicochimiques, plusieurs auteurs ont utilisé diverses équations et méthodes pour prédire et reproduire les propriétés thermodynamiques des systèmes frigorifiques, la plupart de ces tentatives ont été contrôlées à des systèmes limités et au mieux, aucun travail systématique n'a été consacré à tester la capacité de ces méthodes à prédire les propriétés thermodynamiques de différentes catégories de systèmes. Certaines théories disponibles fournissent des corrélations incluent des calculs théoriques, Huber et al. [36] pour décrire la viscosité et la conductivité thermique.

Yata et al. [37] ont proposé une nouvelle équation décrivant la conductivité thermique des R32, R125, R134a et R143a pour une utilisation pratique, applicable sur une large plage de température et de pression. Shi et al. [38], Focke et al. [93] ont effectué une étude d'approches semi-empiriques pour la corrélation des données de conductivité thermique des mélanges liquides multicomposants.

He et al. [40] et Assael et al. [41] ont utilisé une méthode d'estimation de la conductivité thermique et de la viscosité similaire aux équations cubiques d'état des hydrocarbures halogénés de substances pures dans les régions de vapeur et de liquide. Dans leur étude, Scalabrin et al. [42] ont modélisé la conductivité thermique des mélanges de réfrigérants dans un format à trois paramètres correspondant.

Il y a nombreuses études publiées dans la littérature sur la conductivité thermique des frigorigènes mélangés (Huber et al. [43], et Sami et al. [44]) qui ont

suggéré une corrélation pour calculer la conductivité thermique et la viscosité de certains mélanges de frigorigènes alternatifs tels que R507, R404A, R407C et R410A. Husseinnejad et Behnejad [45] ont estimé la conductivité thermique d'un certain nombre de réfrigérants à l'aide de paramètres d'échelonnement potentiel de Bich et Vogel. En 2014, Geller et al. [46] ont calculé la viscosité et la conductivité thermique de mélanges de réfrigérants à l'aide d'un ensemble de modèles. Ils ont utilisé une méthode d'état correspondante pour anticiper la conductivité thermique dans des mélanges de réfrigérants.

En 2016, Huber et Assael. [47] ont utilisé la méthode Chapman-Enskog pour prédire les propriétés de transport de (R1234yf) et de (R1234ze) en tant que produits de remplacement de réfrigérant. Perkins et al. [48] représentaient la conductivité thermique de (R245fa) comme une somme de trois contributions dans une plage de températures et de pressions.

La détermination des propriétés thermo-physiques dans le cas des réfrigérants a été réalisée par Sencan et al. [49], en utilisant les RNA. Le R413a, le R417a, le R422a, le R422d et le R423a ont été pris en compte. Les propriétés thermo physiques des liquides et de la vapeur des réfrigérants étaient aussi obtenues par RNA. Les analyses thermodynamiques de R12, R22 et R502 à l'aide de RNA ont été effectuées par Arcaklioglu et al. [50].

Dans certaines études, le RNA a été utilisé pour prédire la viscosité des fluides frigorigènes (Cristofoli et al. [51] et Ghaderi et al. [52]). Les propriétés thermodynamiques telles que l'enthalpie, l'entropie et le volume spécifique de R413a, R417a, R422d et R423a ont été prédites à l'aide du RNA et de l'approche d'interface neuro-floue adaptative (Sahin et al. [53]).

De plus, certaines méthodes non linéaires ont été présentées pour classifier et prédire le comportement des systèmes non linéaires. La méthode de prévision RNA est utilisée dans de nombreux domaines de réfrigération pour prédire de propriétés thermodynamiques et thermophysiques des réfrigérants mixtes (R508b, R407c et R404a) sous forme d'équations numériques (Sozen et al. [54, 55,56]. Sencan et al. [57] et Morar et al. [58] leurs études ont porté sur la prédiction des propriétés thermodynamiques des autres réfrigérants (R12, R22, R209, R717, R134a, R410a) de la densité liquide, l'enthalpie et l'entropie dans la phase liquide et vapeur.

Mohibbi et al. [59] dans leur étude une nouvelle approche proposée d'un réseau neuronal basé sur l'algorithme génétique a été utilisé pour prédire la densité de liquide saturé pour (19) réfrigérants purs et (06) mixtes réfrigérants, les résultats du modèle sont comparés avec les résultats expérimentaux. Moosavi et al [60] dans leur travail ont étudié la masse volumique du liquide de cinq classes (HCFC, HFC, HFE, PFA et PFAA) de 48 systèmes de réfrigérants utilisant la méthode de contribution par groupe de réseaux neuronaux artificiels.

Une autre étude sur la prédiction de la viscosité de six frigorigènes purs (R1234ze(E), R1234yf, R32, R152a, R161, R245fa), avec un faible PRG sont prédites à l'aide de trois réseaux neuronaux artificiels (BPNN), réseau de neurones artificiel à propagation arrière, (RBFNN), réseau de neurones à fonction de polarisation radiale et (ANFIS), système d'interface neuro-floue adaptatif les résultats calculés présentaient et comparés entre eux (Zhi, et al. [61]).

Un réseau de neurone a été utilisé pour prédire la conductivité thermique, et la performance du RNA a été comparée à celle de plusieurs modèles couramment utilisés (Pierantozzi, et Petrucci. [62] et Mylona et al. [63]). Les résultats ont montré que les corrélations de conductivité régulière couramment utilisées sont utilisées pour une gamme limitée de températures et de composants, alors que la méthode du réseau peut couvrir une large gamme de températures et de substances.

2.2.3 Etat statistique des références bibliographiques

Plusieurs articles ont été publiés dans le domaine de la modélisation des fluides frigorigènes (purs et leurs mélanges binaires et ternaires) dans différentes revues. Pour la Figure 2.1, et 2.2, on constate que le nombre des articles publiés importants dans le domaine de modélisation cela reflète l'importance et l'actualité de l'opportunité de la modélisation, néanmoins une légère baisse dans le nombre des publications à partir de l'année 2020 a été observée et en tenant compte que l'année 2020 n'a pas été encore achevée.

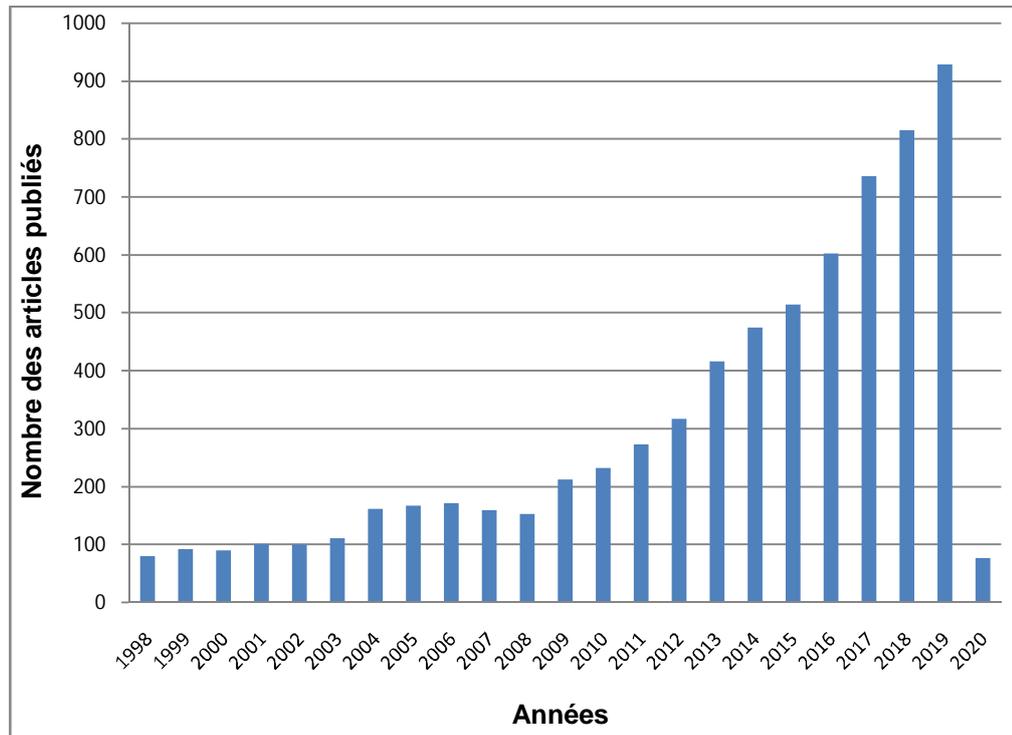


Figure 2.1: Nombre des articles publiés dans toutes les revues scientifiques pour la modélisation de la conductivité thermique.

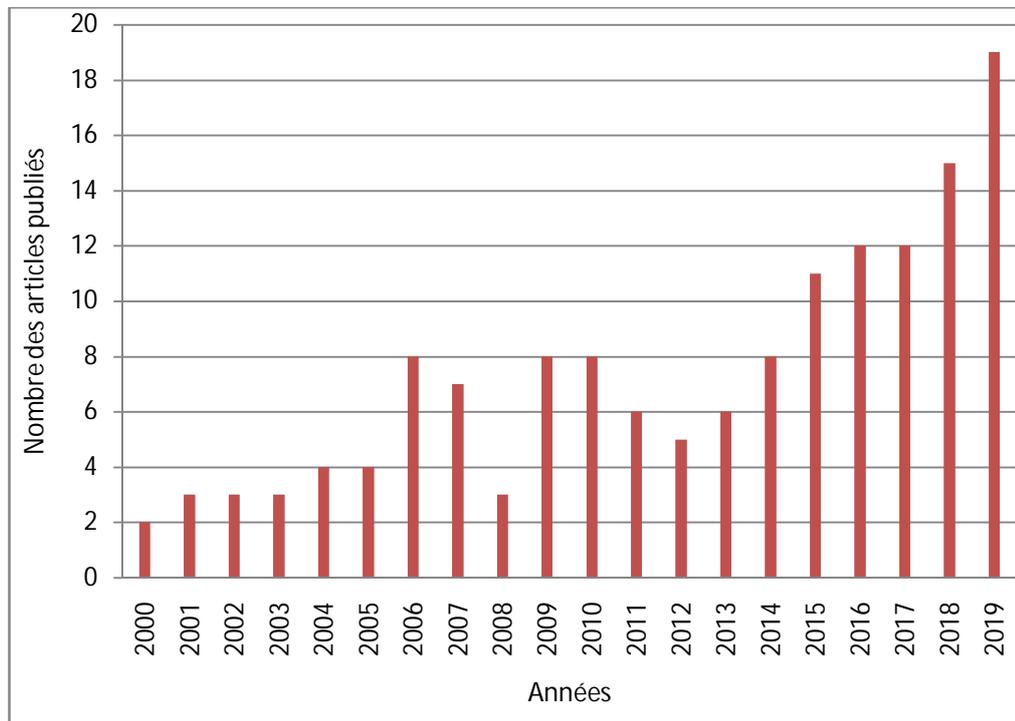


Figure 2.2 : Nombre des articles publiés pour la modélisation de la conductivité thermique utilisant le RNA.

Ces statistiques ont été relevées du Système National de Documentation en Ligne (SNDL) prouvent l'actualité et l'importance de la modélisation dans le domaine de réfrigération.

2.2.4 Les mélanges de réfrigérants

Il est peu probable qu'un corps pur, répondant à une certaine formule chimique, puisse satisfaire tous les critères d'un fluide frigorigène parfait à la fois. L'utilisation de mélanges de composés acceptables vis-à-vis de l'ozone donne un degré de liberté supplémentaire pour la recherche de substituts. Ainsi il y a des possibilités d'adapter les propriétés des fluides choisis pour chaque application particulière, sans remplacer l'équipement existant. Par exemple la combinaison d'un corps non-inflammable et d'un inflammable produit un mélange non inflammable dans un certain domaine de compositions. Il faut toutefois que ce mélange ait un comportement au changement de phases voisin de celui du corps pur. Les mélanges azéotropiques et ceux dits "quasi azéotropiques", présentant une courbe de bulle proche de la courbe de rosée, peuvent être utilisés directement sans nécessiter une quelconque modification des équipements existants.

Les propriétés thermodynamiques déterminent l'efficacité et la capacité du cycle de compression. Ces données sont de première importance lors de la conception de l'équipement de réfrigération et pour le choix du fluide de réfrigération. Les propriétés de transport ont un impact majeur sur le dimensionnement de l'équipement et en particulier sur celui du condenseur et de l'évaporateur.

En résumé, la sélection des réfrigérants et le dimensionnement des équipements de réfrigération requièrent la connaissance de presque toutes les propriétés thermodynamiques et de transport : point d'ébullition, structure moléculaire, point critique, densité à saturation liquide, pression de vapeur, PVT de la phase vapeur et de la phase liquide, viscosité et conductivité thermique des liquides et vapeurs saturés et hors saturation, tension de surface, force diélectrique, capacité calorifique du liquide, moment dipolaire, etc.

Les difficultés rencontrées lors de l'expérimentation pour obtenir les données expérimentales pour calculer les différentes propriétés thermo-physicochimiques afin de comprendre les comportements des procédés industriels telles que la consommation du temps, les difficultés de contrôler les paramètres opératoires, le coût

des produits chimiques et de matériaux, conduisent les chercheurs à aborder l'approche de la modélisation et de développer différents modèles qui ont pour objectif de décrire de façon précise le processus de calcul tout en évitant les problèmes cités auparavant.

L'application de la modélisation neuronale par les scientifiques pour traiter les différentes propriétés des fluides frigorigènes est très populaire à cause de sa facilité de fonctionnement et de son faible coût. Ceci représente un outil très puissant à la modélisation paramétrique due à leurs approximateurs universels. D'après l'étude bibliographique, on remarque qu'il y a peu de travaux qui s'intéressent à la modélisation neuronale d'un système complexe (les réfrigérants purs et leurs mélanges binaires et ternaires) contenant plusieurs sous-systèmes sous des conditions opératoires différentes. La méthode neuronale appliquée pour la prédiction et la simulation est efficace. Les différents tests effectués sur les modèles neuronaux ont permis de calculer un coefficient de corrélation (R) proche de 1 et une erreur quadratique moyenne très petite tendant vers 0.

2.3 Généralités sur les réseaux de neurones artificiels

Il existe plusieurs modèles mathématiques dans la littérature qui décrivent les différents modèles thermodynamiques. Cependant, ces modèles sont des approches assez anciennes et ne peuvent pas être appliquées dans certains cas, en raison de leurs non linéarité inhérente au système, du manque d'information expérimentale et de l'inexactitude des données expérimentales ou des écarts de ses données par rapport aux meilleures conditions.

Cette partie s'articule sur les réseaux de neurones artificiels comme étant des modèles d'intelligence très utilisés pour prédire le comportement d'un processus donné. Le nom de cette technique d'intelligence est inspiré de neurones du cerveau humain.

L'utilisation des réseaux neuronaux artificiels (RNA) comme des approches intelligentes pour la prévision de la performance et la simulation d'un système complexe est de plus en plus populaire ces dernières années. Ils ont une option attrayante en raison de leur haut parallélisme, leur robustesse, et de leur capacité inhérente à extraire des données expérimentales, les associations hautement non

linéaires et complexes entre les variables du problème sans aucune connaissance exhaustive du système.

Les réseaux de neurones artificiels fabriqués de structures cellulaires artificielles, constituent une approche permettant d'aborder sous des angles nouveaux les problèmes de perception, de mémoire, d'apprentissage et de raisonnement. Ils s'avèrent aussi comme alternatives très prometteuses pour contourner certaines des limitations des ordinateurs classiques, De par leur robustesse, leur flexibilité et leur grande capacité de généralisation, les réseaux de neurones ont su s'imposer comme l'un des modèles majeurs en apprentissage machine [64].

Ces dernières années, l'utilisation des réseaux de neurones artificiels s'est développée dans de nombreuses disciplines (sciences économiques, environnement, biologie et médecine, etc.), Ils sont notamment appliqués pour résoudre des problèmes de classification, de prédiction, de catégorisation, d'optimisation et de reconnaissance des formes. Les réseaux de neurones constituent en fait un courant bien précis de l'intelligence artificielle, dont le modèle de développement est basé sur l'idée de calculer des algorithmes d'apprentissage sur un modèle simplifié du cerveau, [65].

Nous aborderons dans cette présente partie les notions de base et les principales architectures de réseaux de neurones 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 quand les utiliser, [64].

2.3.1 Historique

Le champ des réseaux neuronaux va démarrer par la présentation en 1943 par Warren Mc Culloch et Walter Pitts du neurone formel (artificiel) qui est une abstraction du neurone biologique. Le retentissement était énorme. Par cette présentation, ils veulent démontrer que le cerveau est équivalent à une machine de Turing, la pensée devient alors purement un ensemble de mécanismes matériels et logiques [65].

- **1949** : Donald Hebb présente dans son ouvrage "The Organization of Behavior" une règle d'apprentissage. De nombreux modèles de réseaux aujourd'hui s'inspirent encore de la règle de Hebb.

- **1958** : Gerald Frank Rosenblatt développe le modèle du perceptron. C'est un réseau de neurone inspiré du système visuel. Il possède deux couches de neurones : une couche de perception et une couche liée à la prise de décision. C'est le premier système artificiel capable d'apprendre par expérience. Dans la même période, Le modèle de l'adaline (Adaptive Linar Element) a été présenté par Bernard Widrow et Hoff. Ce modèle sera par la suite le modèle de base des réseaux multicouches.
- **1969** : Marvin Minsky et Seymour Papert publient une critique des propriétés du perceptron. Cela va avoir une grande incidence sur la recherche dans ce domaine. Elle va fortement diminuer jusqu'en 1972, où Teuvo Kohonen présente ses travaux sur les mémoires associatives et propose des applications à la reconnaissance de formes.
- **1982** : Etude d'un réseau complètement rebouclé par John Joseph Hopfield.

2.3.2. Le neurone biologique

La connaissance de la structure interne du cerveau biologique et la compréhension de son fonctionnement a été d'une extrême importance pour l'émergence des réseaux de neurones artificiels. Nous présentons dans ce qui suit un bref aperçu sur le neurone biologique et son fonctionnement [66].

Le neurone biologique est une cellule vivante spécialisée dans le traitement des signaux électriques. Dans le cerveau humain, l'apprentissage se fait à travers des neurones qui sont connectés par l'axone, les synapses et les dendrites [67]. Les neurones sont reliés entre eux par des liaisons appelées axones. Ces axones vont eux même jouer un rôle important dans le comportement logique de l'ensemble. Ces axones conduisent les signaux électriques de la sortie d'un neurone vers l'entrée (synapse) d'un autre neurone.

Les neurones font une sommation des signaux reçus en entrée et en fonction du résultat obtenu, vont fournir un courant en sortie. La structure d'un neurone se compose de trois parties (voir la Figure 2.3):

- *Le noyau* : ou cellule d'activation nerveuse, au centre du neurone.
- *L'axone* : attaché au noyau qui est électriquement actif, ce dernier conduit l'impulsion générée par le neurone.

- *Dendrites* : électriquement passives, elles reçoivent les impulsions d'autres neurones.

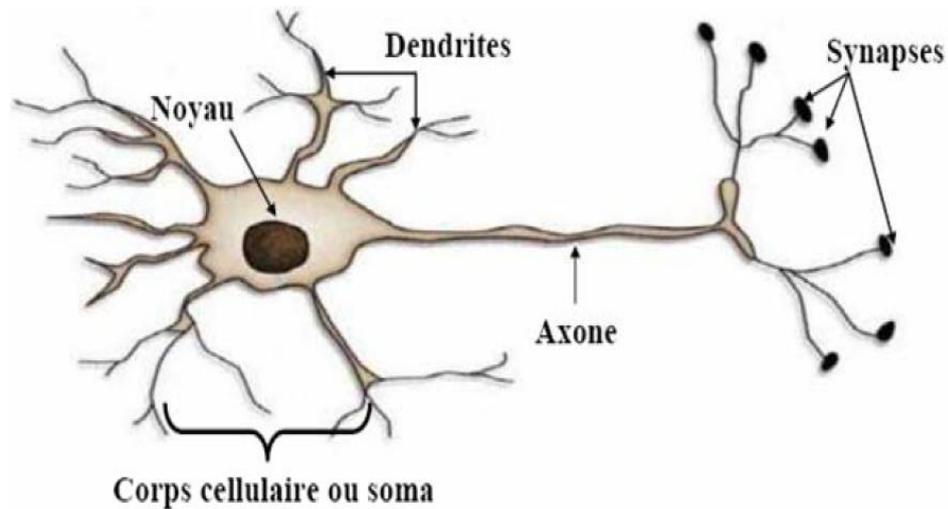


Figure 2.3 : Structure d'un neurone biologique [68].

2.3.2.1 Définition d'un réseau de neurones artificiel (RNA)

Il existe plusieurs définitions du réseau de neurone artificiel. Haykin, en 1994 a donné la définition suivante : Un réseau de neurones est un processus distribué de manière massivement parallèle, qui a une propension naturelle à mémoriser des connaissances de façon expérimentale et de les rendre disponibles pour utilisation. Il ressemble au cerveau en deux points :

- La connaissance est acquise à travers d'un processus d'apprentissage.
- Les poids des connexions entre les neurones sont utilisés pour mémoriser la connaissance [69].

2.3.2.2 Principe du neurone artificiel

Le réseau de neurones artificiel est considéré comme étant un processeur élémentaire. Il reçoit un nombre de variables d'entrées. Chaque entrée possède un poids qui représente la force de la connexion. Chaque neurone est composé d'une sortie, qui se ramifie pour alimenter un nombre variable de neurones [70]. Le neurone effectue trois opérations suivantes :

- Pondération: il multiplie chaque entrée par un paramètre dit poids de connexion.
- Sommation : il fait la sommation des entrées pondérées.
- Activation : c'est le passage de cette somme à travers une fonction d'activation.

La valeur obtenue est la sortie prédite par le réseau de neurone et qui sera transmise aux neurones suivants. Le réseau de neurone artificiel (Figure 2.4) accueille les entrées qui sont similaires aux impulsions électrochimiques. Chaque neurone fait une somme pondérée de ses entrées. Le résultat obtenu est analysé et comparé à un seuil. Si ce seuil est dépassé le neurone devient excité.

Les poids représentent les informations contenues dans le cerveau et données aux entrées de chaque neurone. Le système possède une caractérisation de tolérance aux fautes due au grand nombre de neurones. La défectuosité d'un élément n'entraîne pas une perte réelle d'information, néanmoins elle entraîne une faible dégradation en qualité dans le système. La sortie obtenue à partir du calcul de la sommation des entrées est pondérée par des coefficients (poids synapses). Le calcul est fait utilisant une fonction non linéaire qui est généralement une fonction sigmoïde ou un échelon [68,71]

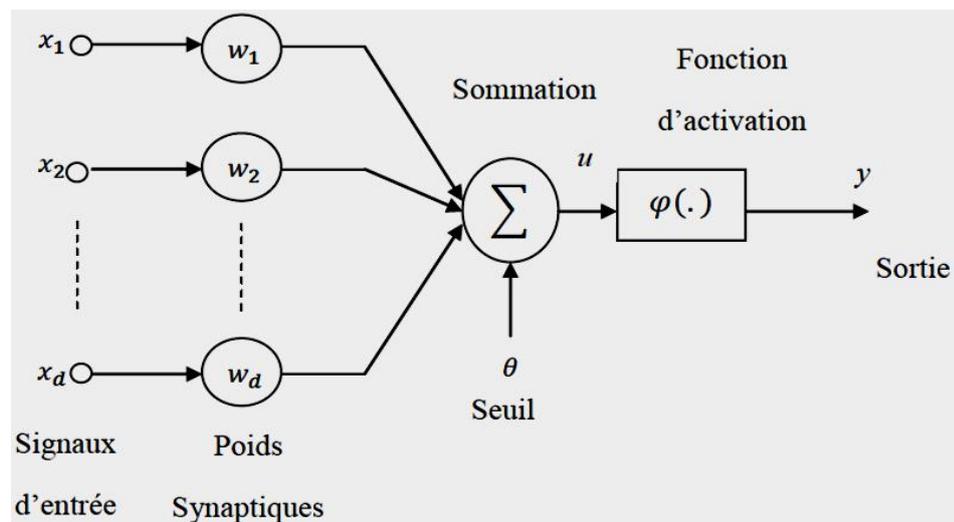


Figure 2.4 : Réseau de neurones artificiel [71].

La modélisation consiste à mettre en œuvre un système de réseau neuronal sous un aspect non pas biologique mais artificiel, cela suppose d'après le principe biologique, qu'on aura une correspondance pour chaque élément composant le neurone biologique, donc une modélisation pour chacun d'entre eux.

On pourra résumer cette modélisation par le Tableau 2.1, qui nous permettra de voir clairement la transition entre le neurone biologique et le neurone formel.

Tableau 2.1 : Analogie entre le neurone biologique et le neurone formel [72].

Neurone biologique	Neurone artificiel
synapses	Poids de connexions
Axones	Signal de sortie
Dendrites	Signal d'entrée
Noyau	Fonction d'activation

La comparaison entre le neurone artificiel et le neurone biologique est montrée sur la Figure 2.5, chaque élément de neurone artificiel à son inspiration dans le neurone biologique.

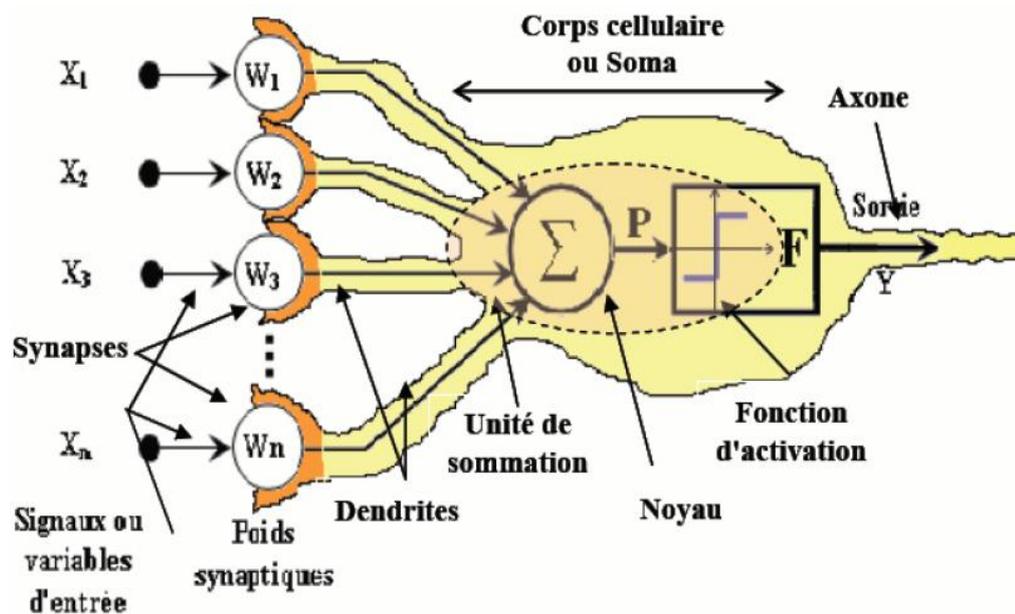


Figure 2.5 : Comparaison entre le neurone biologique et artificiel [73].

2.3.3 Modèles neuronaux

L'objectif de cette partie est de donner un aperçu sur les réseaux de neurones artificiels (RNA). En effet, ces réseaux nécessitent la sélection des variables d'entrée x_i (par exemple les propriétés critiques des réfrigérants purs, binaires et ternaires, et les conditions opératoires par exemple) ayant une influence sur la donnée "y" à modéliser (une propriété thermique par exemple).

Un réseau de neurone est un cadre de calcul qui est inspiré par les systèmes neuronaux biologiques. Il se compose d'un certain nombre d'unités de traitement simple interconnectés appelés neurones artificiels. L'un des paradigmes les plus

populaires des réseaux de neurones appliqués à la modélisation d'un large éventail de systèmes non linéaires, en particulier des processus d'ingénierie chimique et biologique, est le réseau de neurones de type Feed-forward (RNFF) [74,75], qui est utilisé dans la présente partie.

Les neurones artificiels sont arrangés en couches (Figure 2.6), où la couche d'entrée reçoit des signaux d'entrée (u_i) du monde réel et chaque couche successive reçoit les sorties pondérées (w_{ij}, u_i) de la couche précédente comme son entrée résultant ainsi en un RNA de type Feed-forward dans lequel chaque sortie d'une couche est alimentée en avant à la couche qui lui succède où elle est traitée [73]. Les sorties de la dernière couche constituent les sorties au monde réel.

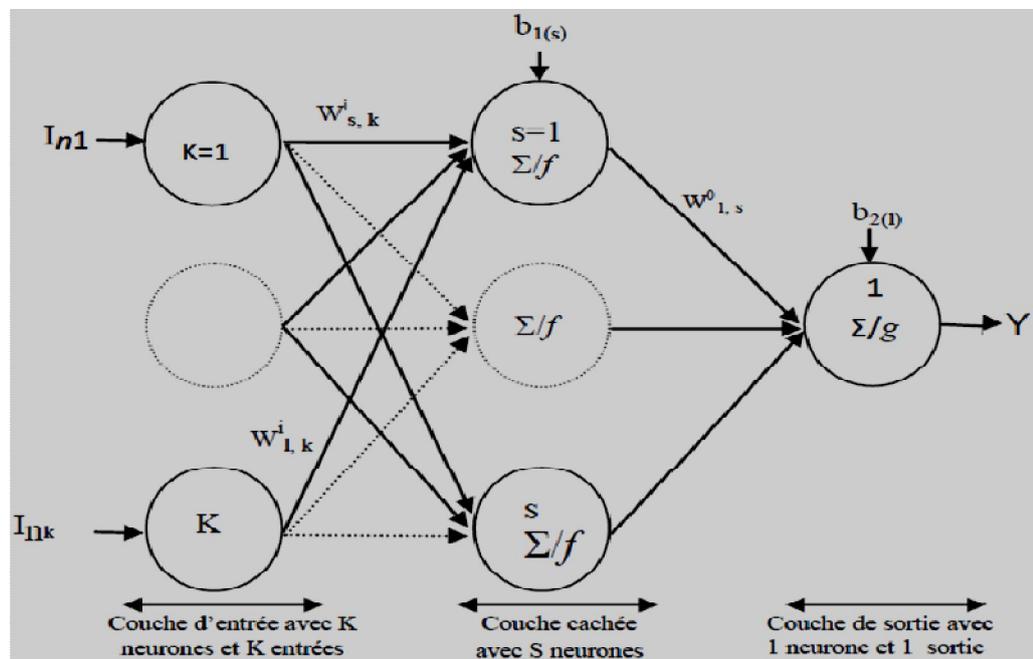


Figure 2.6: Réseau de neurones artificiels de type Feed-forward [76].

Dans un tel RNA de type Feed-forward un neurone, dans une couche cachée ou une couche de sortie, a deux tâches :

- Il additionne le biais aux entrées pondérées de plusieurs connexions et applique ensuite une fonction d'activation (dite aussi fonction de transfert ou encore fonction de seuillage) à cette somme comme donnée par l'équation 2.1 (pour le neurone j de la couche cachée de la Figure 2.6):

$$z_j = f_h\left(\sum_{i=1}^n w_{ji}^l E_i + b_{hj}\right); j=1, 2, \dots, m \quad (2.1)$$

- Il propage la valeur résultante par les connexions partantes aux neurones de la couche suivante où elle subit le même processus, les sorties de la couche cachée alimentée au neurone k de la couche de sortie donnent la sortie (V_k) :

$$V_k = f_0 \left(\sum_{j=1}^m w_{kj}^h z_j + b_{0k} \right); k=1, 2, \dots, l \quad (2.2)$$

En combinant des équations 2.1 et 2.2, on obtient la relation entre la sortie V_k et les entrées u_i du RN:

$$V_k = f_0 \left(\sum_{j=1}^m w_{kj}^h f_h \left(\sum_{i=1}^n w_{ji}^l u_i + b_{hj} \right) + b_{0k} \right); k=1, 2, \dots, l \quad (2.3)$$

2.3.4 Fonctions d'activations

La fonction d'activation calcule la valeur de l'état du neurone qui est transmise aux neurones en aval. Les fonctions d'activations linéaires facilitent l'apprentissage et réduisent la robustesse, tandis que les fonctions d'activations non linéaires augmentent la robustesse mais la tendance des réseaux à apprendre les fonctions est plus ou moins difficile [77].

La plupart des fonctions de transfert sont continues, offrant une infinité de valeurs possibles comprises dans l'intervalle $[0, +1]$ ou $[-1, +1]$. Il existe de nombreuses formes possibles pour la fonction de transfert. Les formes possibles pour la fonction de transfert sont [78] :

- Fonction d'activation hyperbolique tangente sigmoïde (*Tansig*) :

$$f(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (2.4)$$

- Fonction d'activation logarithmique sigmoïde (*Logsig*) :

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (2.5)$$

- Fonction d'activation linéaire (*Purelin*) :

$$f(x) = x \quad (2.6)$$

Le nombre de neurones dans la couche d'entrée et la couche de sortie est fixé par le nombre des variables indépendantes et dépendantes respectivement. Le modélisateur définit le nombre de couches cachées et le nombre de neurones dans chaque couche cachée. Le développement du modèle est réalisé par un processus

d'apprentissage dans laquelle un ensemble de données expérimentales des variables indépendantes est présentée à la couche d'entrée du réseau.

Les sorties de la couche de sortie comprennent une prédiction des variables dépendantes. Le réseau apprend les relations entre les variables indépendantes et dépendantes par la comparaison itérative des sorties calculées et des sorties expérimentales et l'ajustement postérieur de la matrice de poids et le vecteur des biais de chaque couche par un algorithme d'apprentissage de rétro propagation du gradient de l'erreur. Ainsi le réseau développe un modèle neuronal capable de prédire avec une précision acceptable, les variables de sortie comprises dans le domaine des données d'apprentissage.

Par conséquent, l'objectif de la modélisation neuronale est de réduire au minimum les erreurs de prédiction de l'ensemble des données de validation présentées au réseau à la fin de l'étape d'apprentissage [73]. Les performances du réseau neuronal ont été mesurées en termes de la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (RMSE) et du coefficient de détermination (R^2) dont les expressions sont données par les relations suivantes [79] :

$$RMSE = \sqrt{\left(\frac{1}{N}\right) \sum_{i=1}^N (K_{cal,i} - K_{exp,i})^2} \quad (2.7)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (K_{cal,i} - K_{exp,i})^2}{\sum_{i=1}^N (K_{exp,i} - K_{moy})^2} \quad (2.8)$$

2.4 Conclusion

Dans ce chapitre plusieurs travaux ont été effectués sur l'aspect expérimental des propriétés thermo physicochimique des fluides frigorigènes. D'après l'étude bibliographique, on remarque qu'il y'a peu de travaux qui s'intéressent à la modélisation neuronale de ces propriétés thermo physicochimique pour les différents types des composés R32, R125, R134a, R152a, R143a et leurs mélanges (purs, binaires et ternaires).

Nous avons parlé aussi de la modélisation des propriétés thermo physicochimiques utilisant une approche d'intelligence artificielle comme les réseaux

de neurones artificiels (RNA) pour la prédiction de performance des systèmes (purs, binaire et ternaires) à cause de leurs robustesses.

Nous avons donné des informations fondamentales sur les réseaux de neurones artificiels en basant sur les réseaux de type Feed-forward (l'algorithme Levenberg-Marquardt) qui sont les plus utilisés pour modéliser les processus dues à leur propriété d'approximation universelle. On a présenté les critères de choix afin obtenir une structure optimale d'un réseau. Peu de travaux ont été réalisés sur la modélisation des propriétés notamment par les réseaux de neurones artificiels.

CHAPITRE 3

MATERIELS ET METHODES

3.1 Introduction

Récemment, la technique RNA a reçu beaucoup d'attention comme approche de calcul fournissant une façon alternative et complémentaire qui devient de plus en plus importante et précise en raison de sa capacité à faire face aux problèmes complexes et mal définis dans de nombreux domaines scientifiques. Dans le domaine de la réfrigération, la modélisation des propriétés thermo physico-chimique par les modèles RNA connaît un développement très prometteur, ce qui a amélioré la performance des approches statistiques existantes (modèles empiriques, modèles mathématique).

Ce chapitre traite l'application de cette stratégie, qui a été décrite dans le deuxième chapitre, pour la modélisation neuronale des propriétés thermo physico-chimique. Pour ce faire, on commencera par la partie intitulée "Matériels et méthodes». Cette dernière comportera deux contributions :

La **première contribution** concernera les diverses étapes de l'élaboration d'une base de données qui regroupe (R134a, R125, R32, R152a, R143a), et leurs mélanges binaires et ternaires. Nous examinons la base de données collectées puis nous présentons la procédure de modélisation suivie selon trois axes :

Le premier axe est consacré au développement d'un réseau de neurone artificiel (RNA) pour décrire la conductivité thermique des différents systèmes (purs, binaires et ternaires). Les données expérimentales ont été obtenues à partir de la littérature sous des conditions opératoires différentes. Les calculs du coefficient de détermination(R^2), de la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (RMSE) et l'erreur quadratique moyenne (MSE) ont été utilisés afin de déterminer la structure optimale du RNA donnant une meilleure corrélation entre les données expérimentales et celles prédites.

Le deuxième axe portera sur le RNA développé et optimisé auparavant, lequel est exploité sur l'utilisation des nouvelles techniques les plus courantes pour établir les valeurs réduites pour calculer les propriétés pseudo-critiques de la conductivité

thermique, La précision du modèle neuronal obtenu est testée par la suite en réalisant une prédiction.

Le troisième axe est basé sur la collecte d'une nouvelle base de données. On utilisera un ensemble de réfrigérants nocifs qui n'ont pas été inclus dans la base de données précédente ayant servi à l'apprentissage et à la validation, qui regroupe (R22, R124, R142b) et leurs mélanges binaires et ternaires. Les données expérimentales ont été obtenues à partir de la littérature sous conditions opératoires différentes de température et de pression. En premier lieu, on s'intéresse à obtenir la structure optimale du RNA qui donne une meilleure corrélation entre les données expérimentales et celles prédites en calculant les coefficients de déterminations (R^2) et les racines carrées des erreurs quadratiques moyennes (RMSE) et d'autres.

Par la suite, nous présenterons les différentes architectures optimales des modèles neuronaux optimaux obtenus et on fera une comparaison entre les modèles entre eux en calculant les différents types d'erreurs pour déterminer le modèle le plus approprié, capable de décrire de façon précise le procédé du calcul de la conductivité thermique

La **deuxième contribution** porte en premier lieu sur la modélisation d'une autre propriété qui est : la densité volumique, mais la base des données construite dans ce cas-là est une base dimensionnelle. Les résultats expérimentaux ont été retirés de la littérature. La structure optimale du RNA qui donne une meilleure corrélation entre les données expérimentales et celles prédites par le RNA est déterminée en calculant les coefficients de déterminations (R^2) et la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (RMSE) et d'autres erreurs. En second lieu, il s'agit de décrire un modèle qui développe des données nécessaires au traitement du problème de la prédiction de certaines propriétés thermodynamiques (l'enthalpie et l'entropie), basée sur presque tous les aspects de la modélisation du RNA tels que la fonction d'activation, les algorithmes d'apprentissage, le nombre de couches cachées, etc. Au lieu de cela, les avantages de la modélisation neuronale cités auparavant sont une alternative qui peut être explorée pour fournir une estimation des valeurs thermodynamiques à un endroit donné avec une précision raisonnable.

3. 2 Modélisation de la conductivité thermique utilisant les réseaux de neurones artificiels

Les réseaux de neurones artificiels sont développés pour prédire les valeurs de la conductivité thermique de différents systèmes (purs, binaires et ternaires) de fluides frigorigènes. La modélisation en utilisant le RNA a pour but d'étudier un modèle qui est capable d'estimer et de prédire la conductivité thermique de n'importe quel système et sous des conditions opératoires différentes.

La procédure de développement de RNA s'articule sur un développement d'un programme utilisant un programme de langage de calcul scientifique comme un outil de conception. Le logiciel de MATLAB a été utilisé tout au long de ce travail (MATLAB Neural Network Toolbox). Le programme algorithmique comprend : les fonctions d'activations, le nombre de couches cachées, le nombre de neurone dans chaque couche cachée, l'algorithme d'apprentissage et les contraintes en terme d'une racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (RMSE), les erreurs quadratiques moyennes (MSE), erreur absolue moyenne (AAD) et erreur relative absolue moyenne (AARD), et coefficient de détermination (R^2). Comparativement, le modèle neuronal développé permet de prédire et d'estimer les données expérimentales obtenues de la littérature avec une précision.

3.2.1 Procédure de développement du RNA

Les réseaux de neurones artificiels (RNA) sont considérés comme des modèles de boîtes noires car ils représentent une relation empirique entre les variables d'entrées et de sorties. La première étape de la modélisation neuronale sert à sélectionner et traiter les points expérimentaux des paramètres d'entrées et de sorties. La deuxième étape est l'optimisation proprement dite où les paramètres caractéristiques du réseau de neurone vont être choisis afin d'obtenir la structure optimale. La troisième étape est celle de l'apprentissage, du test et de la validation du réseau choisi. En dernier lieu, les performances du réseau obtenu vont être analysées et comparées.

Les étapes de la méthodologie utilisée pour faire la modélisation neuronale de la conductivité thermique sont résumées sur la Figure 3.1. Comme le montre la Figure 3.2, la procédure de développement du réseau neuronal a été élaborée en développant un programme utilisant le Matlab Neural Network Toolbox version 8.1 (The Math works R2013a). Le programme permet de prédire les comportements

complexes des processus et d'établir une comparaison entre les paramètres de sorties prédits et expérimentaux.

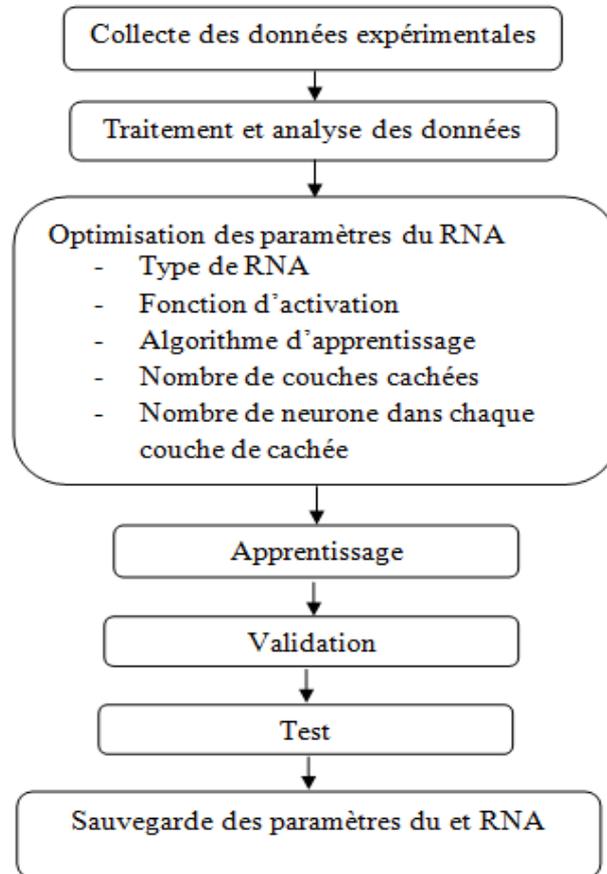


Figure 3.1: Procédure de développement d'un RNA.

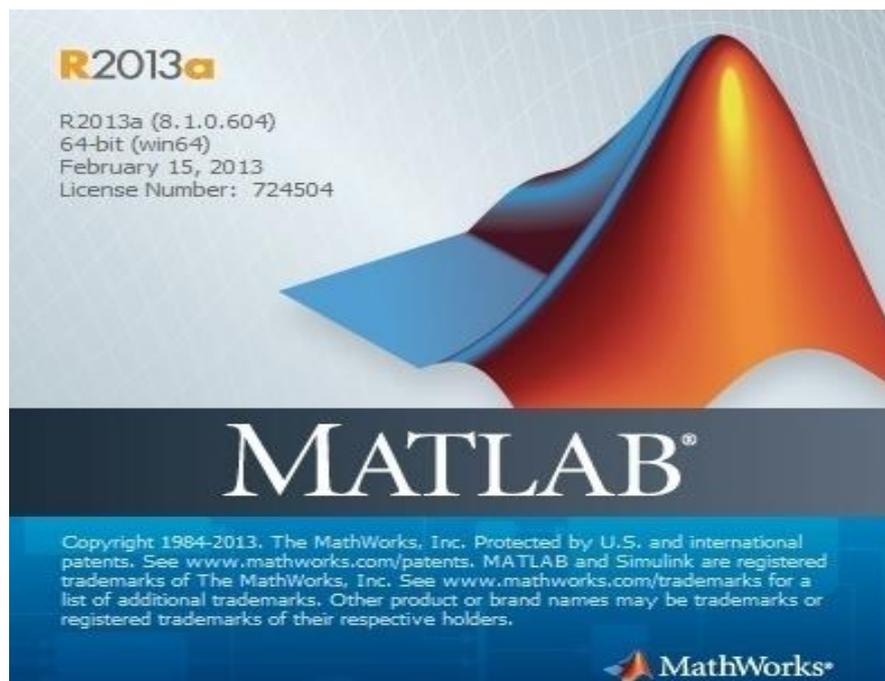


Figure 3.2 : Capture d'écran du logiciel MATLAB.

3.2.2 Modélisation neuronale des différents systèmes des fluides frigorigènes

Cette étape consiste à développer un réseau de neurone artificiel (RNA) pour décrire et modéliser la conductivité thermique des fluides frigorigènes qui rassemble trois catégories. Ces dernières regroupent 11 systèmes divisés en cinq systèmes purs (R134a, R125, R32, R152a, R143a), quatre systèmes binaires (R32+R125, R32+R134a, R125+ R134a, R125+R143a), et deux systèmes ternaires (R32+R125+ R134a, R125+ R134a+ R143a). Chaque catégorie regroupe respectivement 1817, 794 et 616 points (la base de données totale contient 3227 points expérimentaux), dont les données expérimentales ont été obtenues à partir de la littérature et sous des conditions opératoires différentes. En premier lieu, on s'intéresse à l'obtention de la structure optimale du RNA qui donnera une meilleure corrélation entre les données expérimentales et celles prédites et ce à travers le coefficient de corrélation (R) et les différentes erreurs calculées.

3.2.2.1 Collection des données

La conductivité thermique est l'une des principales propriétés thermo-physiques. Définie par l'équation de Fourier, c'est la capacité d'un matériau à transmettre de la chaleur par conduction. La conductivité thermique, K ($W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$) est essentielle pour la connaissance du transfert de chaleur, en particulier pour les réfrigérants.

Pour pouvoir représenter les 11 systèmes mentionnés en haut (cinq purs, quatre binaires et deux ternaires), on a besoin de choisir d'autres variables pour différencier entre les mêmes valeurs des données. Cette étape a pour but d'effectuer une analyse des données pour déterminer les caractéristiques discriminantes et pour faire la différenciation de ces données. L'analyse des données influe directement sur la taille de la base, sur les performances du système et par conséquent sur le temps d'apprentissage.

Du moment que les propriétés critiques et la masse moléculaire sont des propriétés spécifiques disponibles, notre choix s'est donc porté sur la température critique, la pression critique, le volume critique et la masse moléculaire. Ces données sont regroupées dans le Tableau 3.1.

Tableau 3.1: Propriétés critiques des fluides purs utilisés dans ce travail.

Composé	Masse moléculaire (g/mol)	T _C (K)	P _C (MPa)	D _C (kg/m ³)	Réf
R32	50.020	351.55	5.83000	430.0	[80]
R125	120.02	339.45	3.59000	571.0	[80]
R134a	102.00	374.18	4.05629	508.0	[81]
R152a	66.050	386.44	4.52000	365.0	[82]
R143a	84.040	346.25	3.81100	434.0	[82]
R22*	86.470	369.35	4.99000	513.0	[80]
R124*	136.48	395.65	3.63400	560.0	[82]
R142b*	100.50	410.25	4.24600	459.0	[82]
R152a*	66.050	386.44	4.52000	365.0	[82]

Une base de données (BD1) a été recueillie en utilisant les données disponibles dans la littérature. Les mesures expérimentales de la conductivité thermique des systèmes étudiés ont été rapportées de la littérature et sont indiquées dans le Tableau 3.2 pour les systèmes purs (R134a, R125, R32, R152a, R143a), le Tableau 3.3 pour les systèmes binaires (R32+R125, R32+R134a, R125+R134a, R125+R143a), le Tableau 3.4 pour les systèmes ternaires (R32+R125+ R134a, R125+ R134a+ R143a). Le Tableau 3.5 résume quant à lui, les conditions opératoires des trois systèmes précédents.

Tableau 3.2 : Source et nombre des points des données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes purs (BD1).

Systèmes purs	T (K)	P (Mpa)	X _i	K (W. m. ⁻¹ K ⁻¹)	N	Ref
R134a	293.15-353.15	0.10-2.540	1	0.0123-0.0256	32	[83]
	272.46-400.47	0.1005-8.9437	1	0.1165-0.0948	34	[84]
	202.83-303.05	1.2919-5.1772	1	0.08445-0.127	28	[85]
	253.25-363.15	0.096-6.097	1	0.0120-0.1060	76	[86]
	203.00-393.00	0.09-68.201	1	0.0103-0.1449	207	[87]
	273.15-363.15	0.10-2.8	1	0.0109-0.0203	38	[88]
	252.97-333.20	1.71-22.43	1	0.0707-0.1113	32	[89]
	169.87-290.06	10.00	1	0.0862-0.1430	19	[82]
	303.00-463.00	0.10	1	0.01376-0.027	05	[90]
	223.15-323.15	2-25	1	0.0745-0.1208	24	[91]
	213.01-292.88	1.00-21.34	1	0.0879-0.1304	51	[92]
	232.75-323.25	2.00-20.00	1	0.0751-0.1184	23	[93]
	295.85-532.94	0.1.0-50.00	1	0.0127-0.1049	521	[81]
295.85-354.95	1.379-4.147	1	0.05715-0.084	102	[94]	
R125	172.74-290.02	10.00	1	0.0679-0.1116	16	[82]
	283.15-333.15	0.100-2.010	1	0.0123-0.0177	51	[95]
	253.04-313.46	1.24-16.03	1	0.0578-0.0793	19	[96]
	187.43-413.61	0.18-6.040	1	0.011-0.1075	28	[97]
	254.45-354.35	0.104-7.033	1	0.0121-0.0843	93	[98]
	231.25-324.05	2.00 -20.00	1	0.0524-0.0984	24	[99]
	231.25-324.05	2.00 -20.00	1	0.0524-0.0984	24	[93]
R32	283.15-333.15	0.10 -3.00	1	0.0108-0.0202	51	[95]
	252.67-312.83	3.68-17.63	1	0.1148-0.1704	21	[96]
	223.15-323.15	2.00-20.00	1	0.1103-0.1984	22	[91]
	233.45-334.95	0.098-6.194	1	0.0108-0.1776	55	[100]
	232.55-322.95	2.00-20.00	1	0.1141-0.1927	22	[99]
R152a	263.15-363.15	0.082-6.22	1	0.0121-0.1263	67	[86]
	223.15-323.15	2.1-20.1	1	0.0928-0.145	25	[101]
	303-423	0.1	1	0.0149-0.026	4	[90]
	189.61-299.33	7.71-8.55	1	0.1076-0.159	11	[102]
	211.69-294.29	0.79-18.5	1	0.1026-0.1475	38	[103]
R143a	293.15-353.15	0.1-3.98	1	0.0126-0.0375	29	[83]
	298-383	0.1	1	0.0123-0.0187	4	[90]
	233.15-323.45	2-20	1	0.0576-0.1121	21	[104]

Tableau 3.3 : Source et nombre des points des données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes binaires (BD1).

Systèmes binaires	T (K)	P(Mpa)	$X_i+X_j=1$	$K(W. m^{-1}K^{-1})$	N	Réf
R32+R125 R410A	283.15-298.15	0.10-1.20	0.187-0.822	0.018-0.015	69	[95]
	232.65-323.95	2.00-20.0	0.252-0.759	0.064-0.166	120	[99]
	213.00-293.00	2.00-30.0	0.249-0.750	0.081-0.178	60	[105]
	255.04-409.80	0.10-3.69	0.5+0.5=1.0	0.023-0.009	50	[106]
R32+R134a	223.15-323.15	2.00-25	0.306-0.749	0.0816-0.1788	72	[91]
	193.20-316.10	2.00-30	0.249-0.750	0.0846-0.1953	84	[105]
R125+R134a	232.75-323.55	2.0-20.0	0.191-0.785	0.0597-0.1143	98	[93]
R 507A	254.71-372.17	0.10-2.64	0.5+0.5=1	0.01007-0.02	34	[106]
	297.95-332.55	1.46-3.77		0.050-0.0637	128	[107]
	312.59-424.24	0.10-1.90		0.01468-0.02	79	[108]

Tableau 3.4 : Source et nombre des points des données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes ternaires (BD1).

Systèmes ternaires	T (K)	P(Mpa)	$X_i+X_j+X_k=1$	$K(W. m^{-1}K^{-1})$	N	Réf
R32+R125 +R134a 407C 407C	193.10-293.00	2.00-30.00	0.19-0.23	0.079-0.144	44	[109]
	232.55-324.15	2.00-20.00	0.18-0.61	0.064-0.150	168	[110]
	253.27-389.83	0.101-2.44	0.23+0.25+0.52=1	0.009-0.020	38	[106]
	303.9-424.250	0.105-2.04	0.23+0.25+0.52=1	0.013-0.024	97	[111]
404A	252.8-393.090	0.101-2.76	0.44+0.04+0.52=1	0.010-0.022	46	[106]
	233.55-322.95	2.00-20.00	0.44+0.04+0.52=1	0.056-0.105	24	[104]
	311.32-428.94	0.130-1.84	0.44+0.04+0.52=1	0.026-0.014	91	[112]
	297.85-332.65	1.277-3.83	0.44+0.04+0.52=1	0.051-0.060	108	[113]

R410A (R32, R125: 50%, 50%), **R507A** (R125, R143a: 50%, 50%), **407C** (R32, R125, R134a: 23%, 25%, 52%), **404A** (R125, R134, R143: 44%, 4%, 52%).

Dans cette partie, nous listons toutes les étapes importantes qui nous ont conduites à l'optimisation des réseaux de neurones. Les paramètres suivants sont examinés et optimisés au cours de l'élaboration du meilleur réseau pour la prédiction de la conductivité thermique : la sélection des données d'entrée et de sortie, les fonctions de transfert possibles, le mode d'apprentissage, les critères d'arrêt,

l'algorithme d'apprentissage, la technique de normalisation, le nombre de couches cachées, le nombre de nœuds cachés et les mesures d'évaluation de la performance.

Tableau 3.5 : Résumé expérimental des paramètres d'entrées et de sortie utilisés (BD1).

	Systèmes purs (Min-Max)	Systèmes binaires (Min-Max)	Systèmes ternaires (Min-Max)	Système global (Min-Max)
T (K)	169.87-532.9	193.2-424.2	193.1-428.9	169.87-532.9
P (Mpa)	0.082-68.20	0.10 - 30	0.101-30	0.082-68.2
X_i	1.00	0.8222-0.187	0.18-0.61	1.00-0.18
X_j	0.00	0.178-0.812	0.04-0.612	0.00-0.8124
X_k	0.00	0.00	0.188-0.586	0.00-0.586
$K(W. m.^{-1}K^{-1})$	0.0103-0.198	0.00998-0.1953	0.00968-0.1505	0.0097-0.1984
N	1817	794	616	3227

3.2.2.2 Sélection des paramètres d'entrées et de sorties du RNA

La performance du modèle dépend fortement des variables d'entrées utilisées pour élaborer ce modèle. La sélection des variables d'entrées appropriées est une étape essentielle et indispensable pour être en mesure de modéliser le système considéré de manière fiable et améliorer l'efficacité du calcul.

Cependant, la sélection des entrées est une tâche difficile, car les systèmes réels sont généralement complexes et souvent associés à des processus non linéaires. Par conséquent, les dépendances entre les variables d'entrées et de sorties, ainsi que les dépendances conditionnelles entre les variables, sont difficiles à mesurer. Les paramètres d'entrées sont généralement mesurables et se trouvent en commun dans les articles sélectionnés, tandis que les paramètres de sortie sont parfois difficiles à mesurer. Les données de sortie sont issues de la littérature et sont utilisées pour la modélisation et la prédiction.

Les données dont nous disposons (présence d'une énorme base de données avec une variété d'entrées et de sorties) ont été sélectionnées en fonction des propriétés, des caractéristiques et des conditions opératoires des fluides proposés. Nous avons opté pour 09 entrées (09 inputs) qui ont une influence sur la sortie (01 output) : la température (T), la pression (P) qui sont deux entrées macroscopiques qui caractérisent les conditions physiques du système, la masse moléculaire (M), la température critique

(T_c), la pression critique (P_c), la densité critique (D_c) et la fraction massique dans la phase liquide et vapeur (X). Ces variables sont utilisées pour simuler la conductivité thermique (K) qui a été choisie comme paramètre de sortie. Les entrées sélectionnées ont été spécifiées comme propriétés pseudo-critiques pour les systèmes binaires et ternaires.

La corrélation disponible pour la prédiction peut être décrite comme suit:

$$K = f(T, P, M, T_c, P_c, D_c, X_i, X_j, X_k) \quad (3.1)$$

3.2.2.3 Calcule des propriétés pseudo-critiques

Les différentes équations d'état ont été développées à partir de la connaissance des propriétés P , V , T des substances pures. Dans le cas de mélanges de composition connue, il est nécessaire d'utiliser des règles de mélange pour calculer les propriétés moyennes du mélange. Les propriétés pseudo - critiques des mélanges sont obtenues généralement à partir de la règle de Kays (1936) :

$$T_{PC} = \sum_{i=0}^n X_i \cdot T_{Ci} \quad (3.2)$$

$$P_{PC} = \sum_{i=0}^n X_i \cdot P_{Ci} \quad (3.3)$$

$$D_{PC} = \sum_{i=0}^n X_i \cdot D_{Ci} \quad (3.4)$$

$$M_{PC} = \sum_{i=0}^n X_i \cdot M_{Ci} \quad (3.5)$$

Donc: la corrélation disponible pour la prédiction peut être décrite comme suit:

$$K = f(T, P, M_{PC}, T_{PC}, P_{PC}, D_{PC}, X_i, X_j, X_k) \quad (3.6)$$

$n=1$ pour les systèmes purs, $X_i = 1, X_j = 0, X_k = 0$, $n=1, 2$, pour les systèmes binaires $X_i+X_j=1, X_k = 0$ et $n=1, 2, 3$, pour les systèmes ternaires, $X_i+X_j + X_k = 1$.

L'architecture du RNA est donnée sur la Figure 3.3. Les valeurs minimales (Min), moyennes (Mean), maximales (Max), et écarts-types (STD) pour les données d'entrées et de sortie sont présentées dans le Tableau 3.6.

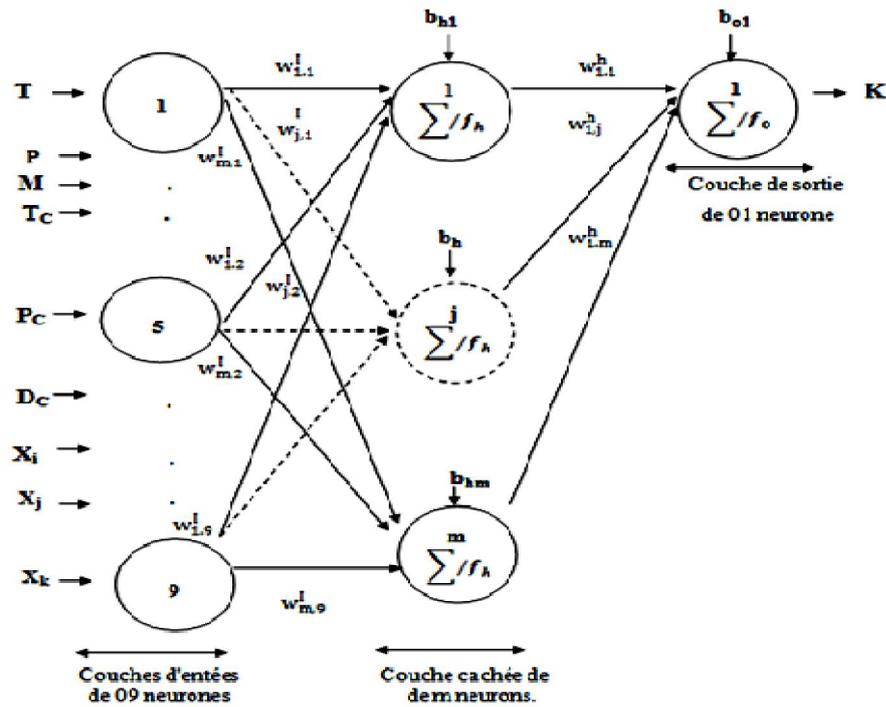


Figure 3.3 : Architecture du réseau de neurone artificiel.

Tableau 3.6 : Analyse statistique des données d'entrée et de sortie.

	Min	Mean	Max	STD
Température (K)	169.87	318.52	533.02	65.05
Pression (Mpa)	0.047	9.078	68.20	11.12
Masse moléculaire (g/mol)	50.02	95.05	120.02	16.80
Température critique (K)	339.45	360.01	386.44	14.62
Pression critique (Mpa)	3.59	4.212	5.83	0.557
Densité critique (Kg/m ³)	365	497.80	571	41.972
Fraction massique (X _i)	0.180	0.753	1.00	0.30
Fraction massique (X _j)	0	0.1577	0.8124	0.232
Fraction massique (X _k)	0	0.089	0.5860	0.191
Conductivité thermique (W/m.K)	0.00968	0.067	0.1984	0.043

3.2.2.4 Préparation et division des données

La division de la base de données est une étape nécessaire pour développer un réseau de neurone artificiel. Elle est scindée parfois en deux ou en trois sous bases. La base de données expérimentale retirée à partir des références choisies a été divisée en deux ensembles différents :

- Ensemble d'apprentissage et validation : Cet ensemble de données constitue la majeure partie des données, car à partir de cet ensemble de données, les poids

des connexions des neurones sont ajustés au cours de l'apprentissage afin d'acquérir les connaissances du réseau. D'autre part, l'ensemble de validation est utilisé pour la vérification de la capacité de généralisation du réseau. L'ensemble d'apprentissage et validation couvre 50% et 25% respectivement de la base de données.

- Ensemble de test : cet ensemble de données est utilisé pour évaluer la performance du RNA dans des situations réelles. Cet ensemble de données est formé par les restes de la base de données, soit 25%. La Figure 3.4 illustre le pourcentage de partage de la phase d'apprentissage, de validation et de test.

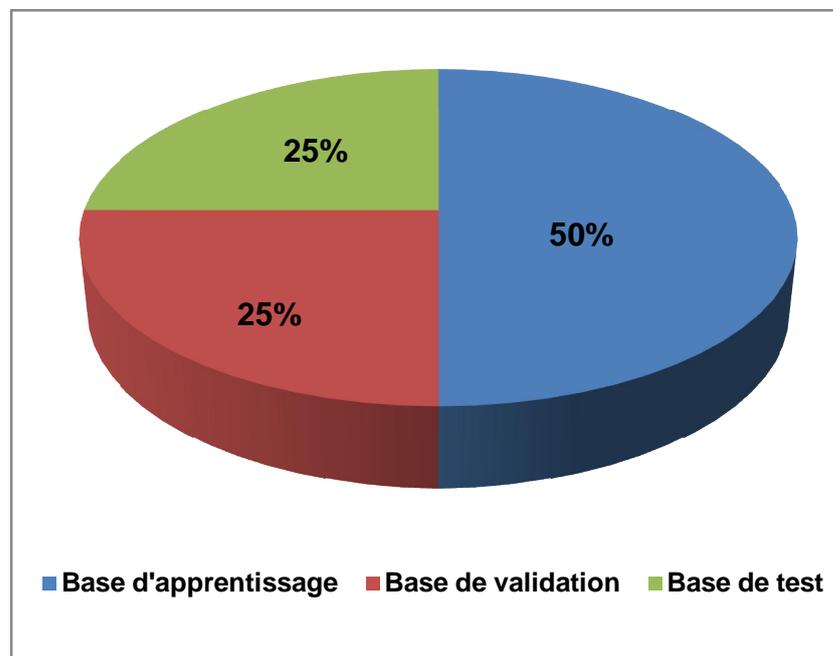


Figure 3.4 : Partage de la base de données.

3.2.2.5 Normalisation des données

La normalisation est une étape importante dans le processus de l'élaboration des données. Elle devient dans la plupart 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. Les points des données expérimentales sont normalisés dans un intervalle $[-1, +1]$ pour éviter le risque de la saturation. La normalisation est faite utilisant la fonction "*Preminmx*" dont l'expression est donnée par la relation suivante :

$$X_{norm} = 2 \left(\frac{(X_i - X_{Min})}{(X_{Max} - X_{Min})} \right) - 1 \quad (3.7)$$

Où, X est la variable d'entrée ou de sortie, X_{Min} et X_{Max} sont les valeurs maximales et minimales de la variable X .

La fonction inverse de dénormalisation est réalisée par la fonction "*Postmnmx*". Pour obtenir un réseau de neurone optimal donnant des résultats approximatifs aux données expérimentales, une couche cachée a été utilisée en changeant le nombre de neurones de 1 à 25. L'apprentissage du modèle est effectué, chaque topologie a été répétée trois fois afin d'obtenir la structure optimale.

3.2.2.6 Apprentissage et structure du réseau adopté

Nous avons choisi une structure de base d'un RNA multicouche (03 couches) : une couche d'entrée, une couche de cachée et une de sortie. Le nombre de neurones utilisés dans la couche d'entrée est 09 (ceci correspond aux neuf paramètres d'entrés). Pour la couche de sortie, le nombre de neurone est 01 (correspond à la conductivité thermique des divers réfrigérants et leurs mélange binaires et ternaires). L'algorithme d'apprentissage utilisé est celui de Levenberg- Marquardt. Les fonctions de transferts utilisées sont la tangente hyperbolique *Tangsig* pour la couche cachée et la fonction hyperbolique *Tangsig* pour la couche de sortie et ce pour les trois systèmes (purs, binaires et ternaires). La structure optimale du RNA est résumée dans le Tableau 3.7.

Tableau 3.7: Topologie du RN0 optimale (BD1).

Type du réseau	FFNN-BP	
Couches	Nombre de neurones	Fonction d'activation
Couche d'entrée	9	----
Couche cachée	13	<i>Tangsig</i>
Couche de sortie	1	<i>Tangsig</i>
Algorithme d'apprentissage	FFNN-BP utilisant l'optimisation de Levenberg-Marquardt. (Fonction <i>Trainlm</i> de MATLAB)	

3.2.2.7 Analyse de sensibilité

Cette méthode proposée d'abord par Garson [114] et reprise par Goh [115], donne une quantification de l'importance relative (IR) des différentes entrées sur la sortie du RN [116]. Elle se base sur le partitionnement des poids de connexions en :

- Poids de connexions entrée-cachée (w_{ji}^I),
- Poids de connexions cachée-sortie (w_{1j}^H).

Le processus de calcul, qui se compose de quatre étapes, est schématisé sur l'organigramme de la Figure 3.5.

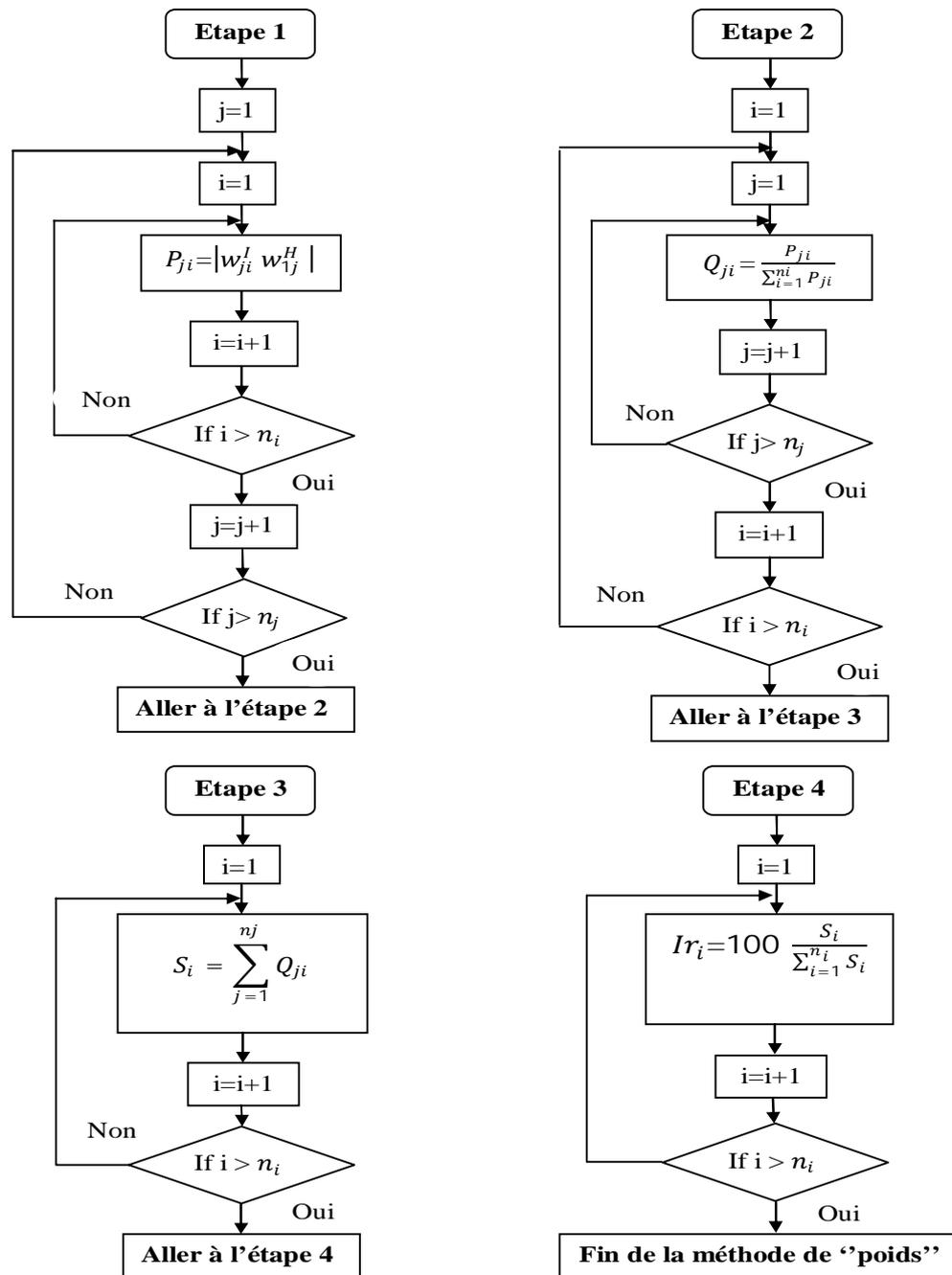


Figure 3.5 : Organigramme de la méthode de "poids" [117].

Afin d'étudier les effets des paramètres d'entrées sélectionnés sur les sorties prévues, une étude de sensibilité est effectuée, où le modèle a été choisi pour être un exemple d'application de l'étude. La contribution des variables d'entrées (la

température, la pression, la masse moléculaire, la température critique, la pression critique, la densité critique et la fraction massique) sur la sortie a été déterminée par une analyse de sensibilité en utilisant la méthode de poids (en anglais "weight" method) pour le réseau neuronal choisi (RN0).

Les performances du réseau obtenu sont déterminées en calculant le coefficient de détermination (R^2), l'erreur quadratique moyenne (MSE), la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (RMSE), l'erreur absolue moyenne (AAD) et l'erreur relative absolue moyenne (AARD) [76] donnés par les relations suivantes :

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (K_{cal,i} - K_{exp,i})^2}{\sum_{i=1}^N (K_{exp,i} - k_{moy})^2} \quad (3.8)$$

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (K_{exp,i} - K_{cal,i})^2 \quad (3.9)$$

$$RMSE = \sqrt{1/N \sum_{i=1}^N (K_{cal,i} - K_{exp,i})^2} \quad (3.10)$$

$$AAD (EAM) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |K_{exp,i} - K_{cal,i}| \quad (3.11)$$

$$AARD\% (ERAM) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{K_{exp,i} - K_{cal,i}}{K_{exp,i}} \right| \quad (3.12)$$

3.2.3 Technique de la réduction

Cette étape consiste à développer le modèle du réseau de neurone artificiel (RN0) pour décrire et améliorer la modélisation de la conductivité thermique des différents systèmes cités auparavant. On tend à obtenir la structure optimale du RN2 qui donne une meilleure corrélation entre les données expérimentales et celles prédites par le RNA, à travers les calculs de coefficients de déterminations (R^2) et des différents types d'erreurs.

Les données réduites se réfèrent à l'analyse et à la transformation des variables d'entrées et de sortie ayant des unités physiques différentes avec des valeurs différentes afin de minimiser les paramètres d'entrés (09 entrées à 07 entrées) et d'améliorer la rapidité d'apprentissage. La présente étude utilise cette méthode pour calculer le minimum et le maximum de chaque variable vectorielle (chaque colonne) et mettre à l'échelle les données en respectant les limites supérieures.

A la fin, les valeurs des sorties du réseau neuronal réduites sont en cours de conversion avant d'être présentées. Pour réduire les données, les équations suivantes sont considérées :

$$G_r = \frac{G - G_{Min}}{G_{Max} - G_{Min}} \quad (3.13)$$

$$X_{i,nor} = X_i + 1 \quad (3.14)$$

$$T_r = \frac{T}{T_C} \quad (3.15)$$

$$P_r = \frac{P}{P_C} \quad (3.16)$$

Pour convertir (en valeur réelle) des données estimées par ANN :

$$G = G_r (G_{Max} - G_{Min}) + G_{Min} \quad (3.17)$$

$$K = f(T_r, P_r, M_r, D_r, X_i, X_j, X_k) \quad (3.18)$$

Où G , est la valeur de donnée d'origine, G_r est la variable réduite correspondante, $X_{i,nor}$ est la valeur normalisée et Min, Max sont respectivement les valeurs minimale et maximale de chaque vecteur.

Le Tableau 3. 8, résume l'intervalle global des points de données expérimentaux utilisant la méthode de réduction (une base de données adimensionnelle). On donne les valeurs minimales et maximales de tous les paramètres d'entrées et de sortie.

Tableau 3.8 :Résumé des paramètres et les données réduites utilisées dans ce travail.

	Systèmes purs (Min-Max)	Systèmes binaires (Min-Max)	Systèmes ternaires (Min-Max)	Système global (Min-Max)
T_r	0.45-1.424	0.524-1.237	0.535-1.245	0.454-1.424
P_r	0.017-16.81	0.018-7.239	0.023-7.16	0.017 -16.81
X_i	0 2.00	1.19-1.82	1.18-1.61	1.18-2.00
X_j	01.00	1.177-1.812	1.04-1.61	1.00-1.812
X_k	01.00	01.00	1.19-1.58	1.00-1.58
K_r	0.0036-01.00	0.0011-0.983	0.00-0.746	0.00-1.00
N	1817	794	616	3227

3.2.4 Prédiction de la conductivité thermique utilisant le réseau de neurone artificiel

3.2.4.1 Elaboration et collection d'une nouvelle base de données

Cette étape a pour objectif de collecter de nouvelles données expérimentales pour la prédiction utilisant l'approche du RNA. Pour cela, une nouvelle base de données expérimentale (BD2) comprenant six cent soixante valeurs (660) a été rassemblée à partir des articles cités dans la littérature. La récolte de nouveaux points expérimentaux, correspond aux réfrigérants nocifs sous conditions opératoire de température de (164.77K- 463K) et de pression de (0.059 Mpa- 69.58 MPa). Ces points collectés ont été répartis en 363 points de données pour trois systèmes purs (R22, R124, R142b), 240 points de données pour deux systèmes binaires (R22 + R142b, R22 + R152a) et 57 points de données pour un système ternaire (R142b + R124 + R22). Dans cette partie, la gamme des paramètres de données expérimentales et le nombre de points de données accompagnés de leurs références sont mentionnés dans les Tableaux 3.9 et 10, et 11 pour les différents systèmes (pur, binaire, ternaire), respectivement.

Tableau 3.9 : Source et nombre des points de données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes purs (BD2).

Systèmes purs	T (K)	P(Mpa)	$X_i = 1$	$K(W. m^{-1}K^{-1})$	N	Réf
R22	298.15-393.15	0.1-5.76	1	0.0106-0.0682	130	[118]
	252.48-333.32	0.1-26.58	1	0.0667-0.1141	37	[89]
	223.15-323.15	2.1-20.10	1	0.0713-0.1262	50	[101]
	303.00-463.00	0.100	1	0.0109-0.0206	05	[90]
	208.56-289.60	0.900	1	0.0875-0.1222	16	[102]
R142b	293.15-353.15	0.100-1.35	1	0.0109-0.0165	21	[83]
	302.20-304.35	1.64-69.58	1	0.0806-0.1116	32	[85]
	223.15-323.15	2.10-20.1	1	0.0734-0.1183	25	[101]
	298.00-418.00	0.100	1	0.0125-0.0210	05	[90]
	210.40-289.55	4.31-7.59	1	0.0870-0.1160	07	[102]
R124	252.4-333.1	0.62-18.67	1	0.0584-0.0909	35	[96]

Tableau 3.10 : Source et nombre des points de données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes binaires (BD2).

Systèmes binaires	T (K)	P(Mpa)	$X_i+X_j=1$	$K(W.m.^{-1}K^{-1})$	N	Ref
R22+R142b	223.15-323.15 164.77-295.76	2.1-20.1 2.7-8.14	0.2796-0.73 0.377-0.765	0.01664-0.1207 0.0854-0.1422	75 16	[101] [102]
R22+R152a	223.15-323.15	2.1-20.1	0.249-0.75	0.0759-0.1391	75	[101]
R22+R152a	176.6-297.450	2.44-8.02	0.269-0.765	0.0916-0.1512	13	[102]
R415	308.22-415.55	0.12-1.68	0.5+0.5=1	0.0139-0.0225	61	[119]

Tableau 3.11 : Source et nombre des points de données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes ternaires (BD2).

Systèmes ternaires	T (K)	P(Mpa)	$X_i+X_j+X_k=1$	$K(W. m.^{-1}K^{-1})$	N	Ref
R409	305.67-427.13	0.059-1.364	0.15+0.25+0.6=1	0.012-0.019	57	[120]

R415 (R22, R152a: 50%, 50%), **R409** (R142b, R124, R22: 15%, 25%, 60%).

L'analyse des résultats de la prédiction par le réseau de neurone artificiel de la conductivité thermique par le RNA optimisé (RN1) est réalisée à travers le calcul des déviations communément utilisées suivantes : les racines carrées des erreurs quadratiques moyennes (RMSE), les erreurs quadratiques moyennes (MSE), les erreurs absolues moyennes (AAD), les erreurs relatives absolues moyennes (AARD) et les coefficients de déterminations (R^2).

3.2.5 Modélisation neuronale (BD1+BD2)

Tous les points de données expérimentaux (BD1 +BD2), à savoir les 3887 points de données entier sont été divisés en trois sous-ensembles différents : huit systèmes purs (R32, R125, R134a, R152a, R143a, R22, R124, R142b), six systèmes binaires (R32+R125, R32+R134a, R125+R134a, R125+R143a, R22+R142b, R22+R152a) et trois système ternaires (R32+R125+R134a, R125+R134a+R143a, R142b+R124+R22), à savoir 2180, 1034, 673 points de données respectivement. Pour évaluer la performance des résultats obtenus avec le modèle RN3 développé, il a été comparé aux modèles précédents (RN0, RN1, RN2), les mêmes entrées ayant pour objectif de déterminer la conductivité thermique de tous les systèmes (dix-sept systèmes) en phase liquide et vapeur.

3.3 Propriétés thermodynamiques

Le but de la thermodynamique (description quantitative des échanges de l'énergie entre travail et chaleur) est l'étude des propriétés des systèmes et leurs évolutions en fonction des échanges d'énergie avec le milieu extérieur. Un système peut échanger de la masse et de l'énergie avec le milieu extérieur, alors son état thermodynamique change par gain ou par perte de masse ou d'énergie.

3.3.1 Energie interne

L'énergie interne (U) est une grandeur d'état qui va nous permettre de retrouver la variation d'énergie mises en jeu au cours d'une transformation. Cette grandeur est définie à partir de l'énoncé du premier principe de la thermodynamique elle est exprimée en (J/mol). L'énergie interne d'un système peut varier suite à des échanges d'énergie avec le milieu extérieur. Les énergies sont principalement échangées sous forme de chaleur(Q) et de travail(W), on peut montrer que la somme (Q + W) ne dépend que de l'état initial et de l'état final du système [121,122]:

$$U = Q + W \quad (3.19)$$

3.3.2 Enthalpie

La fonction enthalpie désignée par la lettre (H) correspond à l'énergie totale d'un système thermodynamique. Elle comprend l'énergie interne (U) du système, à laquelle est additionné le travail que ce système doit exercer contre la pression (P) extérieure pour occuper son volume (V). Il s'agit d'une fonction d'état qui est une grandeur extensive. Elle est exprimée en Joule par mol (J/mol), l'enthalpie est définie par la relation suivante:

$$H = U + P.V \quad (3.20)$$

3.3.3 Entropie

Le premier principe qui stipule la conservation de l'énergie n'explique pas l'irréversibilité de certaines transformations spontanées ou naturelles. Il faut donc introduire un second principe (Le désordre est plus probable que l'ordre) qui permettra de prévoir les évolutions des systèmes et qui permet donc de préciser la nature d'une transformation à travers une nouvelle fonction d'état extensive dite entropie (S) qui est liée au désordre moléculaire. Dans le système international, elle se mesure

en joule par kelvin (J/K), comme le quotient de la variation de la quantité de chaleur transférée à un système par la température absolue de celui-ci:

$$dS = dQ/T \quad (3.21)$$

3.3.4 Energie libre

L'énergie libre ou l'enthalpie libre notée (G) représente la quantité d'énergie contenue dans une molécule susceptible d'être libérée au cours d'une réaction chimique c'est une fonction indispensable pour l'étude des réactions chimiques; elle permet de prévoir si une réaction chimique effectuée à T et P est théoriquement possible et dans quel sens elle évolue, elle est exprimée en (J/mol) ou (Cal/mol), l'énergie libre est reliée à l'enthalpie (H) et l'entropie (S) du système par la relation suivante [121,122]:

$$G = H - TS \quad (3.22)$$

3.4 Modélisation de quelques propriétés thermodynamiques (la densité volumique, l'enthalpie et de l'entropie) utilisant le RNA

La mesure directe des propriétés thermo physico-chimiques des fluides frigorigènes (tel que la viscosité, la densité, l'enthalpie, l'entropie et l'énergie interne, la capacité calorifique, la vitesse du son et la diffusivité thermique, etc.) s'avère très difficile et coûteuse. Aussi, les scientifiques proposent l'application de méthodes numériques développées qui sont très fiables dans la résolution de nombreux problèmes dans des conditions de température et de pression. Le choix de la méthode appropriée pour estimer les différentes propriétés est l'une des étapes les plus importantes qui guide la simulation.

3.4.1 Modélisation de la densité volumique utilisant le réseau de neurones artificiel

L'étude effectuée au cours de cette partie a pour but de proposer une méthode qui permettra la prédiction avec la plus grande précision possible de cette propriété. Un modèle adéquat doit être choisi, surtout que certaines données expérimentales ne sont pas toujours disponibles, ce qui permet de simplifier aussi les calculs mathématiques et thermodynamiques pour les fluides frigorigènes purs, leurs mélanges binaires et ternaires.

Cette deuxième contribution consiste à la collecte d'une base de données qui comportera l'ensemble des fluides suivants (R32, R125, 134a), leurs mélanges binaires (R32+R125, R32+R134a) et ternaires (R32+R125+R134a). Nous examinerons la base de données collectée puis on développera un réseau de neurone artificiel (RNA) pour décrire la densité volumique sous des conditions opératoires différentes. Afin de déterminer la structure optimale du RNA donnant une meilleure corrélation entre les données expérimentales et celles prédites, on calculera le coefficient de détermination (R^2), la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (RMSE) et l'erreur quadratique moyenne (MSE).

3.4.1.1 Elaboration et collection des données

Cette étape a pour objectif de collecter les données expérimentales pour construire un RNA. Pour cela, une base de données expérimentale (BD3) comprenant sept cent soixante-dix-sept (777) points a été rassemblée à partir des articles cités dans la littérature. L'analyse des données est effectuée de la même façon qu'auparavant.

3.4.1.2 Sélection des entrées du modèle neuronal

La sélection des entrées consiste à déterminer les variables pertinentes par rapport à la grandeur à modéliser. Elle vise deux points essentiels [123] :

- Réduction de la dimension de l'espace de représentation des variables du modèle;
- Elimination des entrées qui n'ont pas ou qui ont 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. La raison pour laquelle, la représentation des entrées doit contenir tous les facteurs pertinents par rapport à la grandeur à modéliser, mais seulement ceux-ci.

Entrées :

- La température (T),
- La pression (P),
- La masse moléculaire (M),
- La température critique (T_c),
- La pression critique (P_c),
- La densité critique (D_c),
- La fraction massique (X1, X2, X3).

Sortie :

- La densité volumique (ρ).

La base de données a été arrangée sous forme d'une matrice de dimension (777 ; 10), présentée comme suit : (777; 9) pour la matrice d'entrée et (777; 1) pour la matrice de sortie. Les paramètres d'entrées et de sortie des différents systèmes (purs, binaires et ternaires) étudiés dans ce travail, ont été retirés à partir des références sélectionnées et présentées dans le Tableau 3.12, 3.13, et 3.14.

Tableau 3.12 : Source et nombre des points de données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes purs (BD1).

Systèmes purs	T (K)	P(Mpa)	$X_i = 1$	$\rho(\text{Kg. m}^{-3})$	N	Réf
R32	252.60-312.83	0.63-17.63	1	900-1161	26	[96]
R125	313.46-253.04	1.24-16.03	1	1134-1412	19	[96]
R134a	299.18-533.02	0.10-50.00	1	2.31-1353	511	[81]
	252.97-333.3	0.64-22.43	1	1056-1409	36	[89]

Tableau 3.13 : Source et nombre des points des données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes binaires (BD1).

Systèmes binaires	T (K)	P(Mpa)	$X_i+X_j = 1$	$\rho(\text{Kg. m}^{-3})$	N	Réf
R32+R125	213-293	2-30	0.25-0.75	1038-1522	59	[105]
R32+R134a	193.2-314.8	2-30	0.25-0.75	935.9-1500	83	[105]

Tableau 3.14 : Source et nombre des points des données expérimentales utilisés dans ce travail pour les systèmes ternaires (BD1).

Systèmes ternaires	T (K)	P(Mpa)	$X_i+X_j+X_k = 1$	$\rho(\text{Kg. m}^{-3})$	N	Réf
R32+R125+R134a	193.1-293	2-30	0.19+0.44+0.38	1170-1530	43	[109]

Afin de modéliser la densité volumique avec un modèle élaboré par l'utilisation d'un réseau de neurone, (09) variables ont été sélectionnées comme entrées : la température, la pression, la masse moléculaire, la température critique, la pression critique, la densité critique et la fraction massique. Ces paramètres sont utilisés pour modéliser une seule sortie qui est la densité volumique. Les entrées sélectionnées ont été spécifiées comme propriétés pseudo-critiques pour les mélanges. L'architecture optimale du réseau de neurone à une seule couche cachée est présentée sur la Figure 3.6.

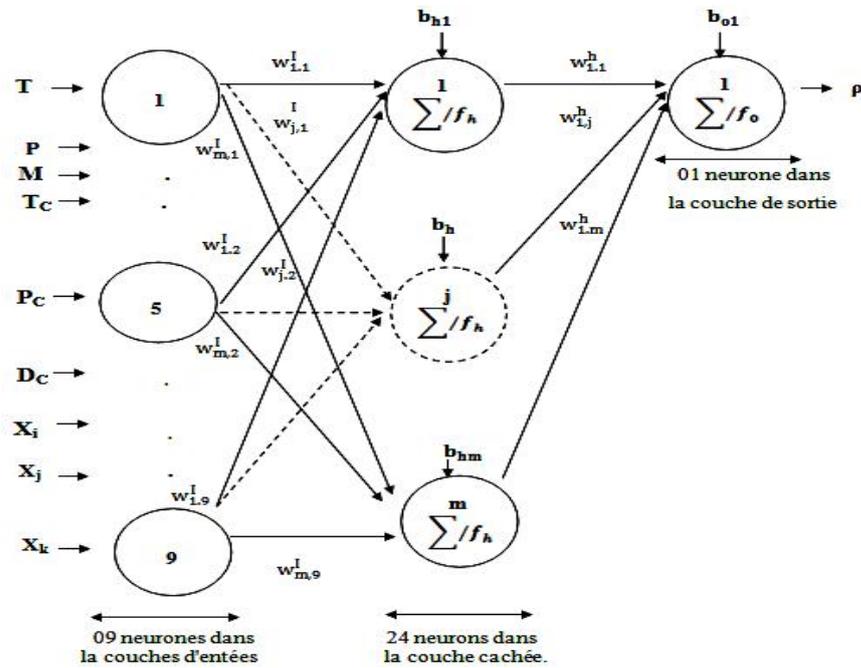


Figure 3.6 : Structure du réseau de neurones adopté.

Les valeurs Minimums (Min), Moyennes (Mean) et Maximums (Max), et les écarts-types (STD) pour la base de données des entrées et de sortie sont présentées dans le Tableau 3.15.

Tableau 3.15 : Analyse statistique des données d'entrée et de sortie.

	Min	Mean	Max	STD
Température (K)	193.1	358.98	533.02	98.25
Pression(Mpa)	0.1	20.21	50	12.03
Masse moléculaire (g/mol)	50.02	96.33	120.02	13.85
Température critique (K)	339.45	368.19	374.18	10.36
Pression critique (Mpa)	3.59	4.26	5.83	0.47
Densité critique (Kg/m ³)	430	502.46	571	23.23
Fraction massique (X _i)	0.19	0.86	1.00	0.26
Fraction massique (X _j)	0	0.11	0.751	0.22
Fraction massique (X _k)	0	0.025	0.52	0.10
Densité volumique (Kg. m ⁻³)	2.31	1059.02	1530	324.77

3.4.1.3 Préparation et partage de la base de données (BD3)

Afin de développer une application à base de réseau de neurones, il est nécessaire de disposer de trois bases de données distinctes : une base pour effectuer l'apprentissage, une base pour tester le réseau obtenu et déterminer ses performances et une autre dite de "validation". Cette dernière est utilisée pendant l'apprentissage afin d'examiner le comportement du réseau pour des données qui lui sont inconnues. Ainsi,

l'apprentissage est arrêté lorsque l'erreur atteint un minimum. La Figure 3.7, illustre le partage de la phase d'apprentissage, de validation et de test.

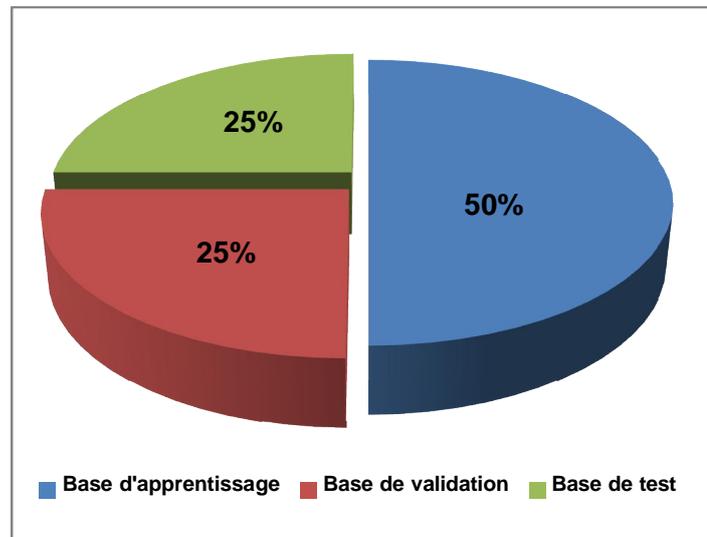


Figure 3.7: Partage de la base de données.

3.4.1.4 Normalisation des données

Dans ce présent travail, la précision du modèle RNA proposé a été évaluée à l'aide d'un ensemble de données de test non utilisé dans la phase d'apprentissage. Une échelle linéaire dans l'intervalle de $[-1, +1]$ a été utilisée dans la présente étude en calculant le minimum et le maximum de chaque variable vectorielle. On a effectué une normalisation des données par rapport à ces limites. La normalisation par la fonction '*Premnmx*', en langage MATLAB qui effectue une normalisation par ligne de la matrice des inputs chaque paramètre des entrées et de sortie et la fonction inverse de dénormalisation est réalisée par la fonction "*Postmnmx*".

3.4.1.5 Conception du modèle neuronal

L'objectif principal de ce travail est décrit dans cette partie. La question qu'on peut se poser est la suivante : quelles sont la combinaison et l'architecture du modèle neuronal qui peut nous donner de meilleurs résultats ? Pour répondre à cette question, la conception et l'optimisation du modèle neuronal est basée sur trois étapes principales.

La première étape consiste en la détermination des paramètres fondamentaux du modèle neuronal, comme la fonction d'activation et l'algorithme d'apprentissage. La deuxième étape est relative au prétraitement des données (normalisation des données)

et la troisième et dernière étape est dédiée à la détermination du nombre de couches cachées et du nombre de neurones dans chaque couche cachée. L'organigramme de la méthodologie de calcul du réseau de neurone optimale est illustré par la Figure 3.8.

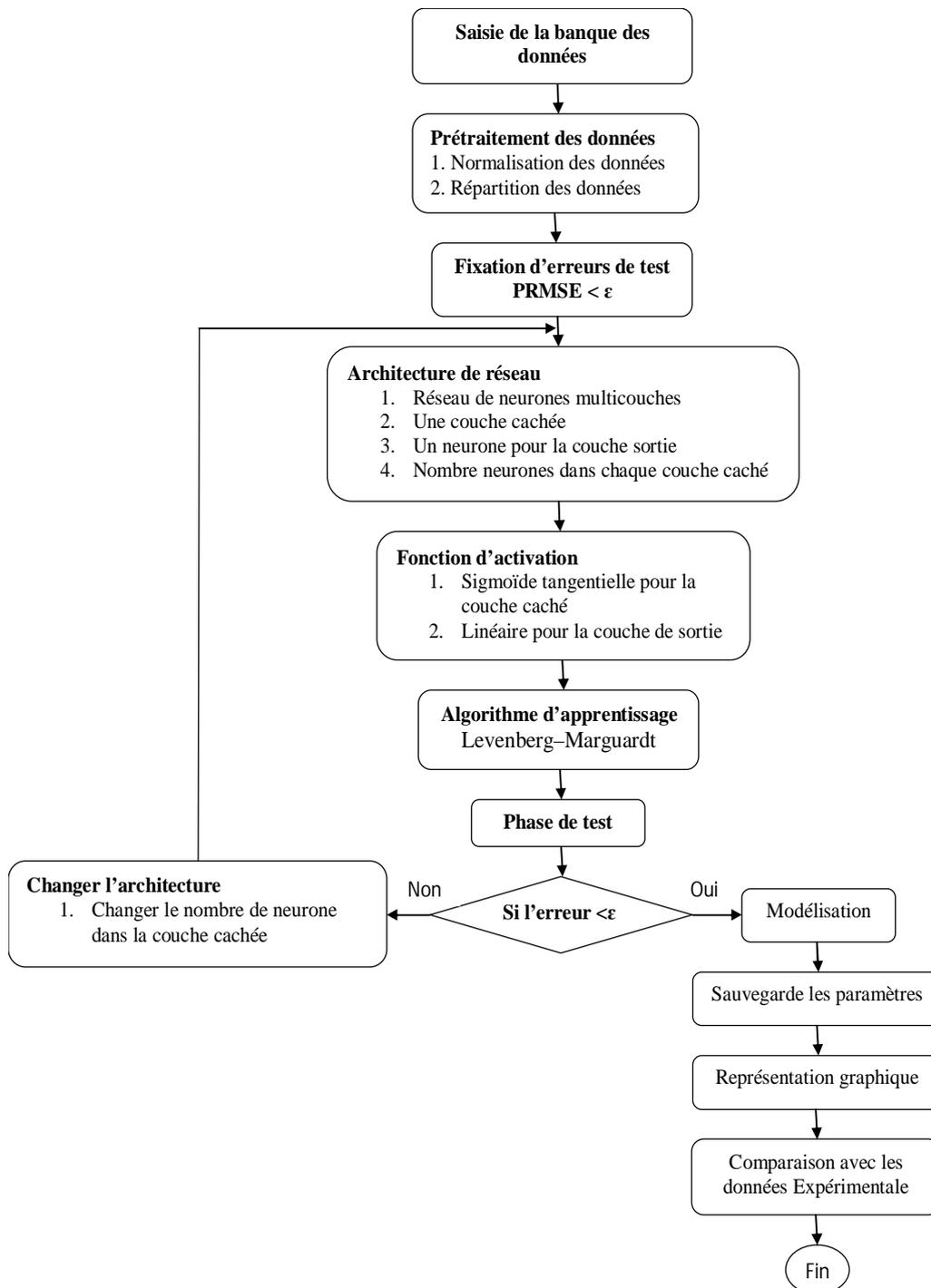


Figure 3.8 : Organigramme de la méthodologie de calcul du RNA.

La sélection de l'algorithme d'apprentissage est plus compliquée que la sélection des fonctions d'activation parce qu'il y'a un nombre important d'algorithmes

d'apprentissage qui peuvent produire un modèle neuronal exact, rapide et fiable. Trois algorithmes d'apprentissage ont été appliqués (Tableau 3.16) pour avoir un seul algorithme qui puisse donner une erreur quadratique moyenne (MSE) minimale.

Tableau 3.16: Noms des codes des réseaux et noms des algorithmes d'apprentissage Utilisés lors de la phase de conception du modèle neuronal.

Algorithme d'apprentissage	Code Matlab
Régularisation bayésienne	Trainbr
Levenberg–Marquardt	Trainlm
BFGS Quasi-Newton	Trainbfg

La Figure 3.9, présente la variation de la MSE de la densité volumique des trois réseaux de neurones avec différents algorithmes d'apprentissage en fonction du nombre d'itérations. D'après les résultats trouvés, l'algorithme d'apprentissage choisi est celui désigné sous le nom d'algorithme de Levenberg–Marquardt (Trainlm) qui présente une erreur quadratique moyenne (MSE) minimale.

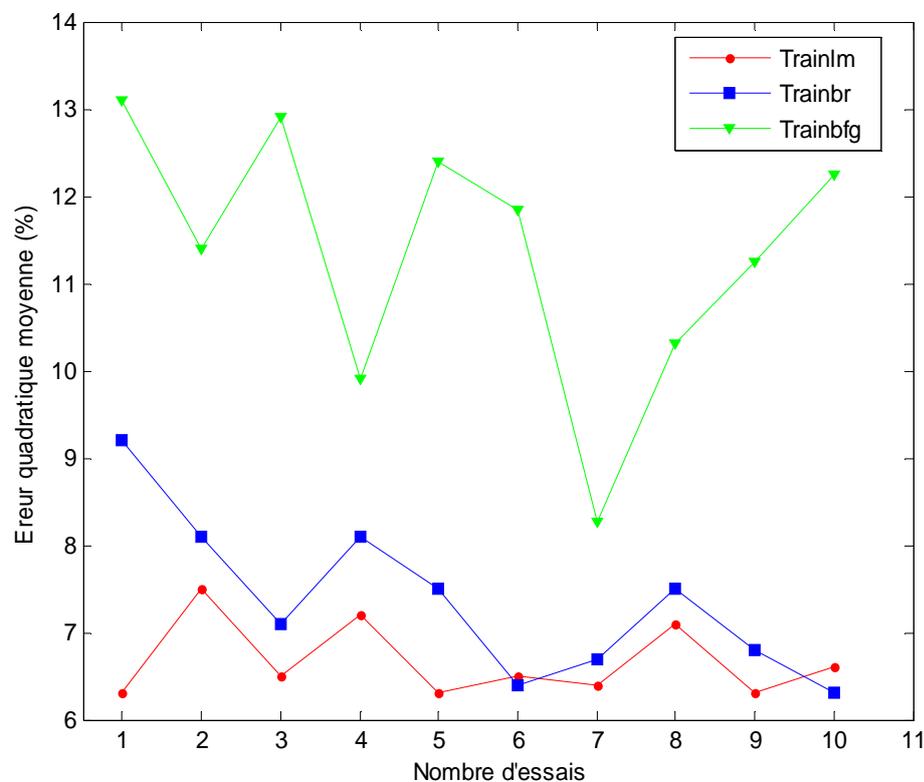


Figure 3.9 : Effet de l'algorithme d'apprentissage sur la performance des réseaux de neurones en termes d'erreur quadratique moyenne.

Le Tableau 3.17, présente les différentes fonctions de normalisation utilisées dans cette partie afin d'avoir une fonction qui donne de meilleurs résultats. Une étude sur l'effet de normalisation sur la performance du modèle neuronal est représentée. Nous avons appliqué la normalisation des entrées par deux techniques les plus utilisées (la méthode du minimum et maximum et la méthode de moyenne et l'écart type) à travers des fonctions existantes dans MATLAB. Deux fonctions sont testées (*Premnmx*, *Prested*), puis le système a été testé sans normalisation.

Tableau 3.17 : Différentes fonctions de normalisation utilisées.

Méthodes de prétraitement	Code MATLAB
Méthode de MMM (Min-Max Méthode)	Premnmx
Méthode de MSDM (Mean and standard deviation methode)	Prested
Sans normalisation primaire	-----

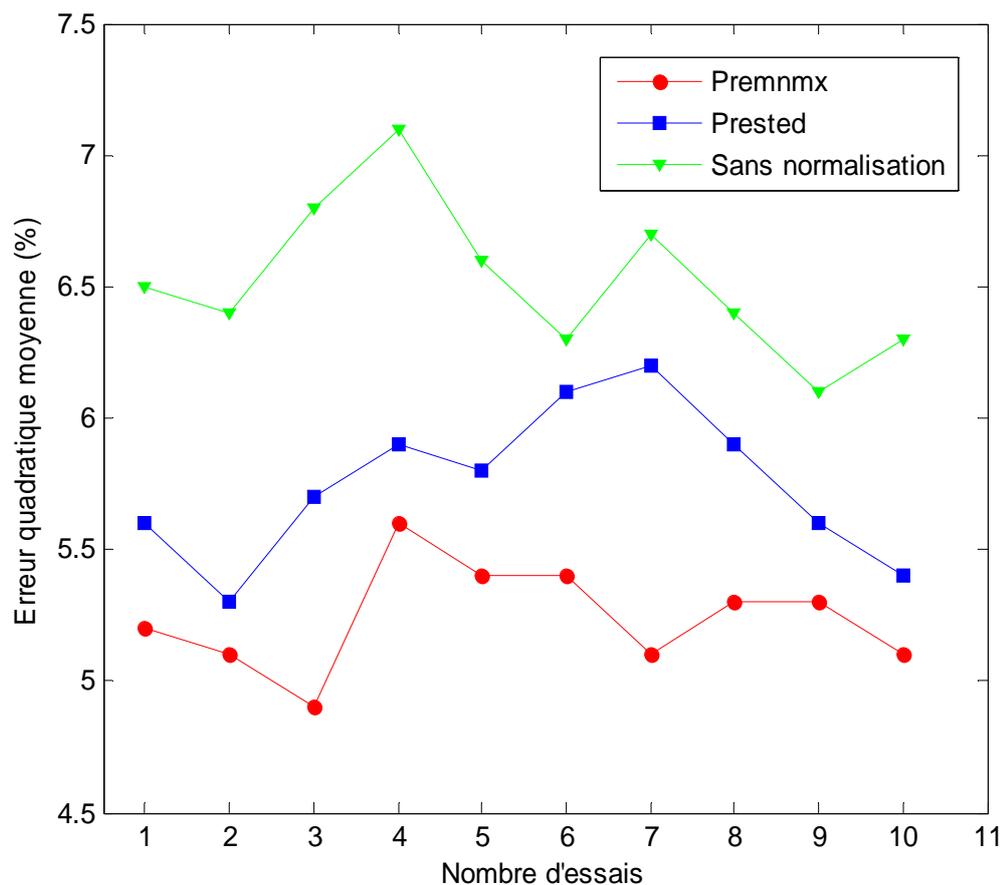
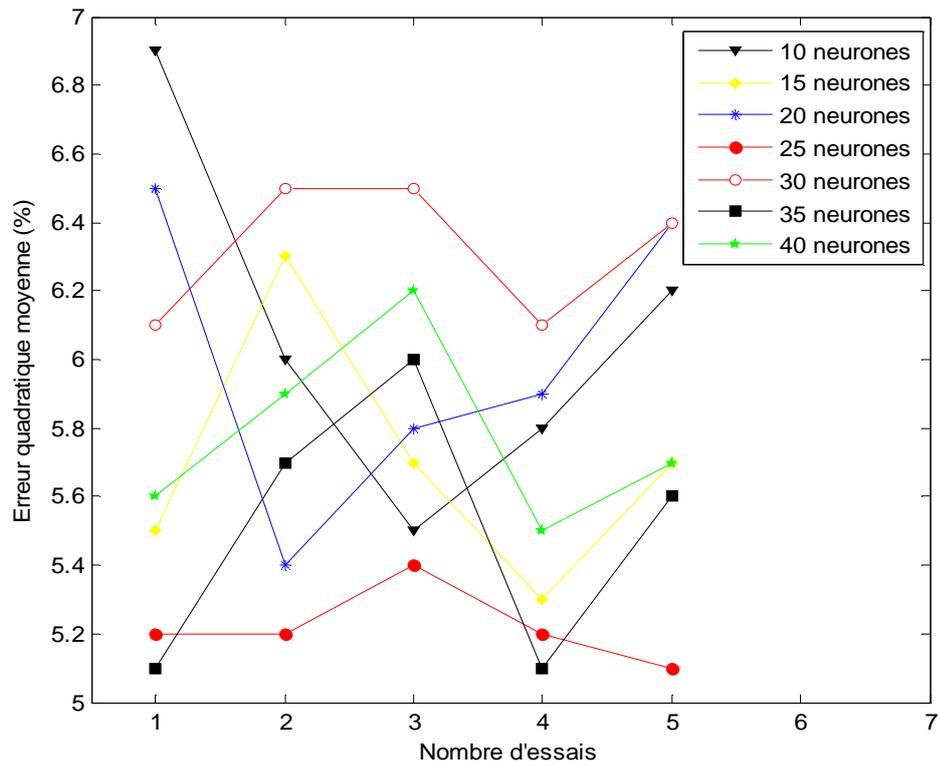
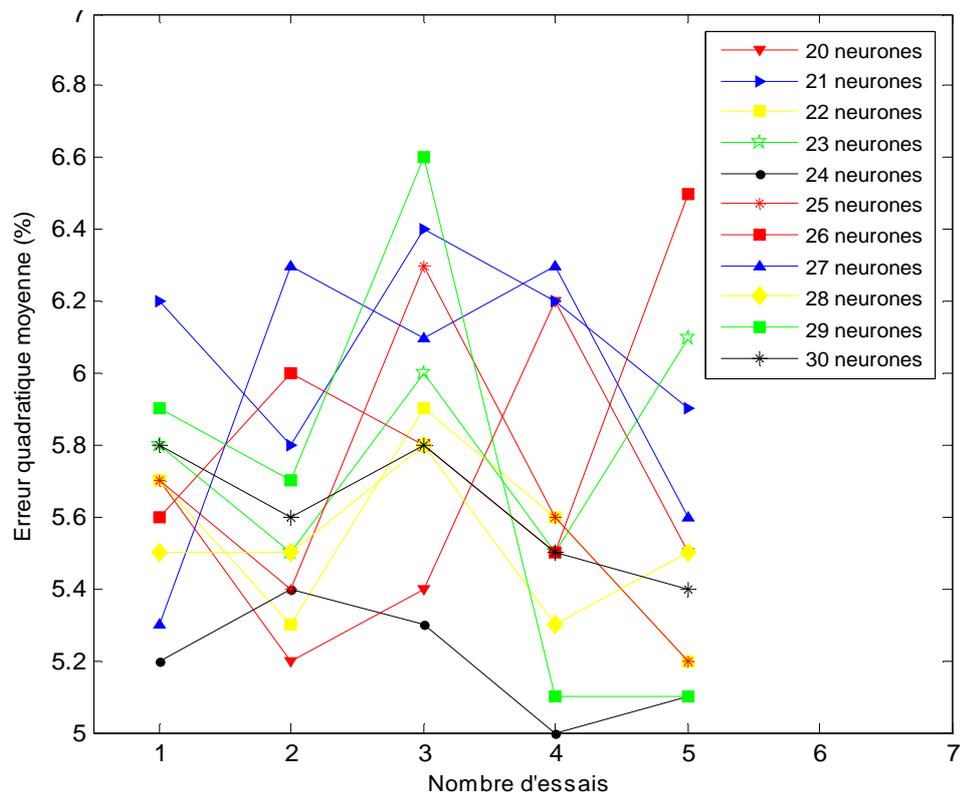


Figure 3.10 : Effet de la fonction de normalisation sur la performance d'apprentissage du réseau de neurones.



(a)



(b)

Figure 3.11 : Effet du nombre de neurones de la couche cachée sur la performance d'apprentissage du réseau de neurones : (a) chaque 5 neurones, (b) un neurone.

La Figure 3. 10, montre l'influence de la normalisation sur la performance du modèle. On remarque que l'apprentissage sans normalisation a une faible influence sur le modèle et les résultats obtenus montrent que les techniques de normalisation rendent les réseaux plus stables et avec une erreur minimum par rapport à celles sans normalisation. En outre, la performance des réseaux utilisant (MMM) comme une technique de prétraitement, est meilleure que les autres en termes de cohérence, le MSE est plus bas, alors que la fonction ($Premnmx$) est celle qui présente un bon résultat.

La troisième étape a été consacrée au test des différentes architectures en modifiant le nombre de neurones (de 1 à 40) dans une couche cachée. D'après la Figure 3.11, on remarque que lorsque le nombre de neurones augmente, l'erreur diminue jusqu'à un nombre de neurones égal à vingt quatre, cette diminution est due à l'augmentation de nombre de connexion du modèle neuronal.

3.4.1.6 RNA développé

Le type du réseau de neurones utilisé est le Feed-forward avec l'algorithme d'apprentissage Levenberg-Marquardt back propagation. Une couche cachée a été choisie parce qu'elle convient à modéliser la relation entre les données d'entrée et la variable de sortie. La structure résultante du RNA optimisé est représentée sur la Figure 3. 12.

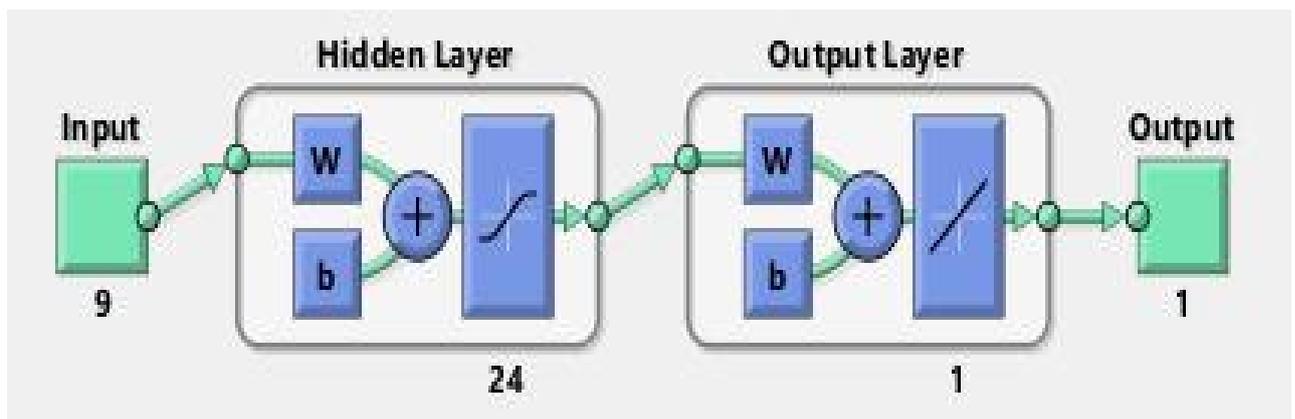


Figure 3.12 : Structure optimale du modèle de RNA.

Dans cette partie, le nombre de neurones dans la couche cachée varie de 1 à 24. En premier, on a utilisé la fonction Tangente sigmoïde comme fonction de transfert de la couche d'entrée vers la couche cachée, alors qu'une fonction linéaire (identité) l'a été entre la couche cachée et la couche de sortie. Le réseau a été formé en utilisant trois algorithmes d'apprentissage, Il a été prouvé que l'algorithme d'apprentissage

(FFBP) utilisant l'optimisation de Levenberg-Marquardt est le mieux adapté d'après le test des différents algorithmes d'apprentissage. Le Tableau 3. 18, récapitule les différents éléments structurels du réseau de neurones utilisé dans la modélisation de la densité volumique. Dans cette étude nous avons testé toutes ces étapes pour obtenir le réseau neuronal optimal illustré.

Tableau 3.18 : Structure du réseau de neurones optimisé.

Type du réseau	FFNN-BP	
Couche	Nombre de neurones	Fonction d'activation
Couche Entrée	9	----
Couche Cachée	24	<i>Tangsig</i>
Couche Sortie	1	<i>Purelin (linéaire)</i>
Algorithme d'apprentissage	FFNN-BP utilisant l'optimisation de Levenberg-Marquardt (Fonction <i>Trainlm</i> de MATLAB)	

3.4.2 Modélisation de l'enthalpie et de l'entropie utilisant le réseau de neurone artificiel

3.4.2.1 Collecte des données

Cette étape a pour objectif de collecter des données (BD4) pour construire un RNA. Pour cela une base de données comprenant sept mille six cent quarante-six valeurs (7646), obtenues à partir des données disponibles citées dans la littérature (DuPont Suva®134a, DuPont Suva®410A, DuPont Suva®407C), ont été exploitées et arrangées sous forme d'une matrice correspondant aux neuf paramètres d'entrées relatives aux propriétés thermodynamiques des quelques fluides frigorigènes. Le Tableau 3.19, résume les paramètres d'entrées et de sortie et l'analyse statistique qui sont présentés.

Tableau 3.19 : Analyse statistique des données d'entrée et de sortie.

	Paramètres	Symbole	Unité	Min	Max	Mean
Entrées	Température	T	K	130	513.33	327.6
	Pression	P	MPa	0.0068	27.6	0.62
	Masse moléculaire	M	g/mol	72.6	102	86.2
	Température critique	T _c	K	374.18	345.5	360
	Pression critique	P _c	MPa	4.05	4.61	4.92
	Densité critique	D _c	Kg.m ⁻³	488.9	527.3	508
	Fraction massique	X1	/	0.23	1	0.5
	Fraction massique	X2	/	0	0.5	0.25
	Fraction massique	X3	/	0	0.52	0
Sorties	Enthalpie	H	Kj/Kg	273.01	1196.1	588.1
	Entropie	S	Kj/Kg.K	0.859	9.01	1.33

3.4.2.2 Mise en forme des données et structure du réseau adopté

Dans cette étape, les données sont subdivisées en trois sous-ensembles : un ensemble pour l'apprentissage (70%), un ensemble pour la phase de validation (15%) et (15%) pour l'ensemble du test (Figure 3.13). L'algorithme d'apprentissage utilisé dans ce travail est celui de Levenberg–Marquardt. Nous avons choisi une structure de base d'un RNA à trois (03) couches : une couche d'entrée, une couche de cachée et une de sortie. Neuf (09) neurones correspondant aux neuf (09) paramètres d'entrées ont été utilisés dans la couche d'entrée, 13 neurones ont été pour la couche cachée alors que l'enthalpie et l'entropie ont été représentées par 2 neurones dans la couche de sortie. Les fonctions de transferts utilisées sont la tangente hyperbolique (*Tangsig*) pour la couche cachée et la fonction linéaire (*Purelin*) pour la couche de sortie. Pour obtenir un réseau de neurone optimal donnant des résultats approximatifs aux données générées, le nombre de neurones de la couche cachée varie de 1 à 30. Les calculs ont été répétés trois fois afin d'obtenir la structure optimale. L'architecture de RNA est montrée sur la Figure 3.14.

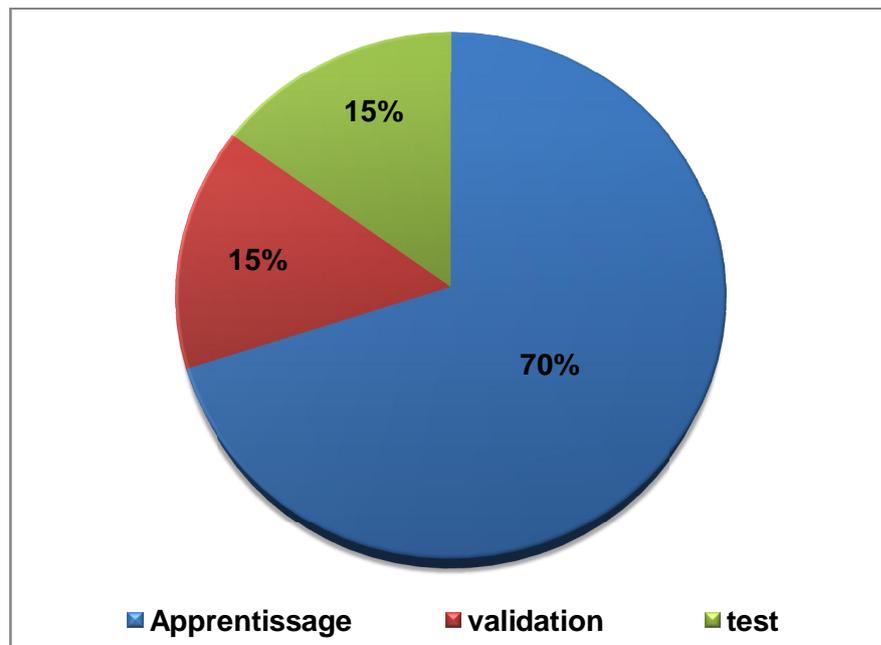


Figure 3.13 : Partage de la base de données.

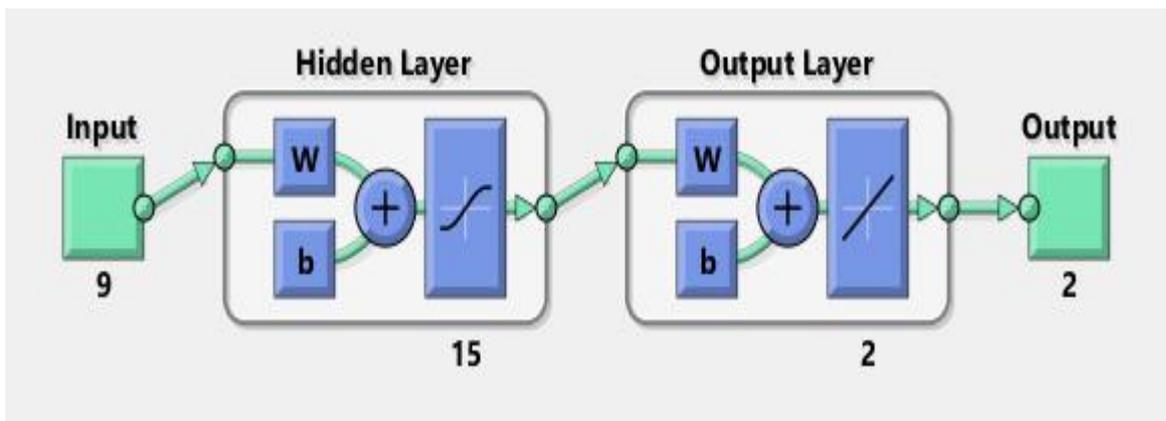


Figure 3.14 : Schéma simplifié de l'architecture du RNA adopté.

3.5 Conclusion

Dans la première contribution, une méthodologie pour choisir un modèle de RNA pour prédire la conductivité thermique (paramètre énergétique dans le domaine de la réfrigération) des différents systèmes des fluides frigorigènes a été élaborée. La base de données comptait onze systèmes (frigorigènes purs, leurs mélanges binaires et ternaires) différents (R32, R125, R134a, R152a, R143a). La méthodologie commence par une recherche approfondie afin de sélectionner le modèle avec une complexité minimale, une performance optimale et un choix des paramètres respectifs (les entrées et les sorties, les fonctions d'activation, l'algorithme d'apprentissage, la technique de normalisation, les couches cachées, etc.). Une technique de réduction pour améliorer

la performance du modèle optimal nous a permis de déduire un modèle approprié capable de décrire avec une grande précision la prédiction d'une nouvelle base de données des réfrigérants nocifs.

Dans la deuxième contribution, nous avons décrit en détail une procédure pour la modélisation neuronale de la densité volumique et de deux propriétés thermodynamiques (l'enthalpie et l'entropie) des fluides frigorigènes purs (R32, R125, R134a), de leurs mélanges binaires et ternaires. La méthodologie commence par une recherche bibliographique afin de sélectionner les paramètres d'entrées et de sortie. Plusieurs configurations de réseaux neuronaux ont été testées, en observant l'effet de chacun d'eux sur la performance du réseau. Par conséquent, nous avons essayé d'améliorer leur performance en utilisant les techniques de normalisation. Parmi les réseaux de prédiction obtenus, nous en avons sélectionné le meilleur. Le but de la présente contribution était de développer deux modèles de réseaux neuronaux de type Feed-forward capable de résumer l'architecture du RN optimal pour chaque propriété (la densité volumique et l'enthalpie et l'entropie).

CHAPITRE 4

RESULTATS ET DISCUSSIONS

4.1 Introduction

Ce chapitre est organisé en deux parties :

La première partie est consacrée à la présentation des résultats de la modélisation des différentes propriétés thermo physico-chimiques des fluides frigorigènes (corps purs, leurs mélanges binaires et ternaires) qui regroupent l'ensemble des systèmes étudiés. Nous avons développé les modèles neuronaux de type Feed-forward (FFBP). Ces modèles peuvent expliquer la relation entre les différentes propriétés (les sorties) et les entrées choisies. Par conséquent, la comparaison entre les trois modèles neuronaux (RN0, RN1 et RN2), en termes d'erreurs et en termes des coefficients de déterminations est aussi présentée. La précision du réseau est testée en exploitant une prédiction à travers une nouvelle base de données collectée des réfrigérants nocifs. Les performances de la prédiction ont été déterminées afin de tester l'exactitude du réseau développé. Les résultats de la modélisation neuronale de la conductivité thermique des fluides frigorigènes cités ont été publiés dans la revue "Thermophysics and Aeromechanics", [124].

La deuxième partie illustre les différents résultats prometteurs obtenus qui regroupent les propriétés étudiées (la densité volumique, l'enthalpie et l'entropie) dans un premier temps, puis nous expliquerons et discuterons les performances des modèles obtenus pour les fluides frigorigènes mentionnés.

4.2 Résultats de la modélisation de la conductivité thermique

4.2.1 RNA développé

Le Tableau 4.1 montre la structure du modèle RNA optimisé pour chaque système (pur, binaire, ternaire et global). Dans ce tableau, les valeurs de R^2 et RMSE des réseaux formés ont été reportés pour différents nombres de neurones et fonctions de transfert. Avec la fonction de transfert *Tangsig* utilisée dans la couche cachée et la couche de sortie pour tous les systèmes, un meilleur coefficient de détermination (R^2) et une mesure d'erreur minimale (RMSE) appropriés ont été obtenus.

Tableau 4.1 : Valeurs des coefficients de déterminations R^2 , de RMSE et nombre optimal des neurones avec différentes fonctions de transfert.

Systèmes	Type de réseau	Couche d'entrée	Couche cachée	Couche sortie		
		Nombre de neurone	Fonction d'activation	Fonction d'activation	R^2	RMSE
Purs	FFBP	13	<i>Logsig</i>	<i>Tangsig</i>	0.9931	0.0039
	FFBP	16	<i>Logsig</i>	<i>Purelin</i>	0.9941	0.0033
	FFBP	13	<i>Tangsig</i>	<i>Tangsig</i>	0.9961	0.0027
	FFBP	19	<i>Tangsig</i>	<i>Purelin</i>	0.9843	0.0054
	FFBP	25	<i>Purelin</i>	<i>Tangsig</i>	0.7570	0.0200
Binaires	FFBP	16	<i>Logsig</i>	<i>Tangsig</i>	0.9971	0.0037
	FFBP	15	<i>Logsig</i>	<i>Purelin</i>	0.9956	0.0045
	FFBP	13	<i>Tangsig</i>	<i>Tangsig</i>	0.9980	0.0030
	FFBP	19	<i>Tangsig</i>	<i>Purelin</i>	0.9911	0.0064
	FFBP	25	<i>Purelin</i>	<i>Tangsig</i>	0.9909	0.0065
Ternaires	FFBP	15	<i>Logsig</i>	<i>Tangsig</i>	0.9934	0.0046
	FFBP	16	<i>Logsig</i>	<i>Purelin</i>	0.9928	0.0048
	FFBP	12	<i>Tangsig</i>	<i>Tangsig</i>	0.9983	0.0023
	FFBP	19	<i>Tangsig</i>	<i>Purelin</i>	0.9933	0.0046
	FFBP	25	<i>Purelin</i>	<i>Tangsig</i>	0.9080	0.0157
Global (RN0)	FFBP	09	<i>Tangsig</i>	<i>Tansig</i>	0.9925	0.0063
	FFBP	16	<i>Logsig</i>	<i>Tangsig</i>	0.9941	0.0057
	FFBP	15	<i>Logsig</i>	<i>Purelin</i>	0.9825	0.0081
	FFBP	13	<i>Tangsig</i>	<i>Tangsig</i>	0.9967	0.0036
	FFBP	19	<i>Tangsig</i>	<i>Purelin</i>	0.9928	0.0052
	FFBP	25	<i>Purelin</i>	<i>Tangsig</i>	0.8153	0.0251

Les paramètres (les poids et les biais) du modèle RN0 sélectionné pour chaque système sont répertoriés dans les tableaux 4.2, 4.3, 4.4 et 4.5 respectivement, où W^I est la connexion de couche cachée en entrée, W^h la connexion de sortie de couche cachée, b_h et b_0 sont les biais de la couche cachée et de la couche de sortie respectivement.

Tableau 4.2 : Poids et biais du RNA optimal pour les systèmes purs.

Connexions Couche d'entrée-Couche cachée						Connexions Couche cachée-Couche de sortie		
Poids (w_j^l)						Biais	Poids (w_j^h)	Biais
T	P	M_{PC}	T_{PC}	P_{PC}	D_{PC}	b_{hj}	λ	b_{OK}
4.1835	-26.0332	3.548	-0.73562	1.9594	-2.3406	-24.0384	8.1261	-1.078
3.1419	3.6054	-0.36381	-1.9651	-2.152	-4.9293	5.0308	-2.9587	
1.0815	-1.6325	0.4712	-0.27291	-0.90651	-1.3208	-2.0767	-0.78916	
-1.0815	0.8861	1.4178	1.1202	-1.3863	0.31068	0.21321	-1.852	
4.186	-27.8174	3.0948	-0.53317	1.8773	0.31068	-25.6167	-12.7112	
0.018849	-10.7969	-2.5628	-4.3041	4.3532	-5.1926	-3.7738	3.0238	
-2.758	-3.7144	-0.13042	-0.16113	-3.4486	-3.4213	-3.7011	-1.4468	
3.643	3.5253	1.06	1.6562	-1.7157	3.1487	-0.10328	1.4675	
0.20958	21.8944	7.2547	7.4236	-5.9335	7.6625	9.693	9.5999	
0.67147	-0.19387	1.7556	0.184331	0.37153	-0.39813	0.68139	-2.7786	
-3.7149	1.3188	-2.8947	-1.3753	-4.3276	-6.2882	-4.335	3.7792	
-4.7261	33.3708	9.3397	11.3213	10.045	11.4176	10.549	-4.4501	
1.7355	-0.72955	-0.66524	-0.53499	-1.8261	-1.2245	2.8832	1.4051	

Tableau 4.3 : Poids et biais du RNA optimal pour les systèmes binaires.

Connexions Couche d'entrée-Couche cachée									Connexions Couche cachée-Couche de sortie	
Poids w_j^i								Biais	Poids w_j^h	Biais
T	P	M_{PC}	T_{PC}	P_{PC}	D_{PC}	X_I	X_J	b_{hj}	λ	b_{OK}
-1.1368	0.35087	0.06135	-0.092349	0.19155	0.015487	0.9552	0.93462	1.9505	2.1988	0.80292
-0.52848	-0.27209	-0.34413	1.5926	-1.8845	-2.2342	-0.89647	0.091077	0.72922	2.5544	
-9.2944	15.2025	-1.3931	-5.7894	-0.69764	-3.0922	-1.2185	0.63763	10.2253	-3.6827	
0.74509	-0.046277	-2.1833	1.0658	1.6071	-1.7698	2.1854	-0.63659	-2.6666	1.0359	
-5.463	1.3739	0.35375	-3.044	-0.13265	3.0506	-0.70419	1.0513	0.063846	0.43907	
9.2908	-15.1812	0.67375	5.4099	0.5982	3.5809	0.51316	-0.9871	-9.9995	-3.6939	
0.5417	-0.049875	-1.4994	1.3517	2.4231	-1.1869	2.38	-1.1708	-2.6427	-1.1012	
-0.52533	-0.28921	1.232	2.1296	-1.0579	-2.9281	-0.47692	0.60561	0.72659	-2.4532	
-5.2406	1.3486	1.0374	-3.6427	-1.5027	0.75957	-1.1621	0.60392	-0.001535	-0.44522	
-0.22325	-0.55471	-0.67886	-3.2055	0.02742	0.096161	1.0705	1.0084	-2.6841	-0.52743	
-0.69205	0.062437	-0.88158	0.7745	0.60294	1.371	-0.51057	-0.9332	-1.8227	3.8007	
3.4761	21.2807	0.9883	1.1499	-0.0055736	-0.49002	0.76189	0.62307	21.9264	8.5022	
3.4725	12.7136	0.97232	1.2258	0.24431	-0.20199	0.64987	0.51264	14.4721	-8.5843	

Tableau 4.4 : Poids et biais du RNA optimal pour les systèmes ternaires.

Connexions Couche d'entrée-Couche cachée										Connexions Couche cachée-Couche de sortie	
Poids w_j^i									Biais	Poids w_j^h	Biais
T	P	M_{PC}	T_{PC}	P_{PC}	D_{PC}	X_I	X_J	X_K	b_{hj}	λ	b_{OK}
-6.7739	31.4165	3.2577	0.39732	1.036	-2.527	3.2365	-4.0231	-2.7244	25.5898	5.5039	
-0.29425	-0.9485	-0.21473	0.21213	1.2451	-0.7214	0.11886	-0.74649	-2.0618	3.0249	0.16279	
-2.47	0.18387	0.75536	1.8232	0.99324	-0.27279	0.11747	1.3872	-0.52704	-1.2649	2.6773	
6.7677	-0.902	0.55508	-0.22995	-0.18338	1.1255	-0.24203	-0.49338	0.82683	-1.0511	0.11532	
12.3596	-35.956	-3.9554	-1.2256	-0.82614	2.2185	3.2681	5.1516	3.3689	-28.933	-5.1089	
-8.6059	30.2842	3.1171	0.62656	0.4441	-3.110	-3.9329	-4.3703	-3.1823	24.2517	-9.9932	
5.3871	-0.4534	0.17102	0.88106	1.5367	0.51125	-0.22673	0.45733	-0.37837	0.89032	0.33928	1.1341
-4.024	0.6629	-0.072903	0.8168	1.6132	0.07594	-0.90256	0.61739	-0.52554	0.30976	0.45079	
-0.55489	0.97025	0.81368	-1.2384	-1.1274	0.27533	-0.68395	2.6689	-0.7989	-0.5227	0.36474	
-1.9379	0.1898	-0.039593	-0.46625	-1.1118	-0.55954	1.1551	0.28289	0.45203	-1.8192	3.0944	
-0.93241	0.1198	-1.3877	-0.25618	-0.12932	0.32091	0.38547	0.91658	-0.77965	-2.7939	-1.4005	
-1.7399	0.0875	0.91754	0.57086	-0.14689	0.19638	0.45431	-0.51917	-0.50043	-0.42572	-2.6727	

Tableau 4.5 : Poids et biais du RNA optimal pour le système global.

Connexions Couche d'entrée-Couche cachée										Connexions Couche cachée-Couche de sortie	
Poids w_j^i									Biais	Poids w_j^h	Biais
T	P	M_{PC}	T_{PC}	P_{PC}	D_{PC}	X_i	X_j	X_K	b_{hj}	λ	b_{OK}
6.957	-12.2166	2.9853	-1.3155	2.01	-2.1339	3.3188	2.9528	2.015	-9.5758	0.5244	11.0953
1.4863	0.65639	-3.5468	-3.212	-0.67515	-5.9821	5.0425	-6.9349	3.4699	-3.1199	-1.9121	
10.335	-81.7504	6.0135	-1.6097	4.2269	-3.718	17.1393	16.9112	12.3423	-63.1976	-2.2127	
11.5506	-19.1889	1.0367	-2.2234	-4.1378	-10.7707	0.96966	6.8634	4.6281	-15.8314	0.4186	
-5.1279	1.2623	7.8443	5.3259	-5.9467	5.445	-8.7607	11.7747	-4.9305	-1.0918	-0.03414	
1.4196	0.70906	-5.2684	-3.4587	-1.2712	-5.6834	6.5972	-7.3254	4.5641	-3.5073	1.8947	
-10.6208	23.0268	-10.2401	2.4067	-6.6956	6.7064	-4.5555	-4.6063	-3.5096	14.769	-5.637	
1.1016	-1.1453	-9.782	0.29611	-5.9066	6.0638	0.4596	0.41237	0.30055	-1.9767	0.2192	
10.1973	-21.9597	9.7397	-2.2774	6.3447	-6.3376	4.2893	4.3408	3.3243	-14.2148	-6.1822	
-0.81496	0.045279	-1.263	0.050917	-0.43153	0.67735	-0.233	-0.21751	-0.17218	-2.5694	11.9478	
-5.9358	41.3513	-5.2625	1.0139	-2.699	3.4824	-8.3715	-8.3472	-6.1807	31.8419	7.0574	
-5.8418	41.3729	-4.9489	0.9846	-2.5971	3.2643	-7.8934	-7.8601	-5.8206	32.3549	-9.0366	
7.2882	0.0275	-2.485	3.8655	-2.1155	8.6409	0.18179	-2.7696	-1.5401	10.0868	0.4924	

4.2.1.1 Analyse de sensibilité

Les variables les plus importantes pouvant influencer sur la conductivité thermique des trois systèmes (purs, binaires et ternaires) et du système global (RN0) sont fournis par les résultats des contributions reportés sur la Figure 4.1. Un résumé des résultats obtenus est présenté dans le Tableau 4.6, où on a trouvé que, toutes les variables d'entrées ont une influence considérable sur l'estimation de la conductivité thermique, avec un léger avantage pour la masse moléculaire (M) et la température critique (T_c).

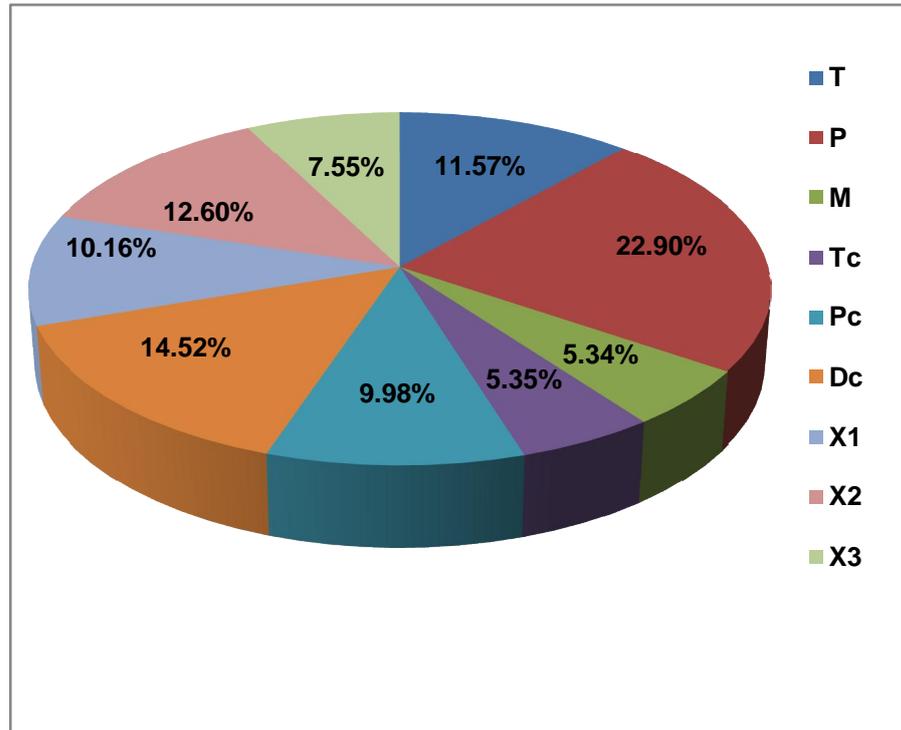


Figure 4.1: Histogramme de l'importance relative(IR).

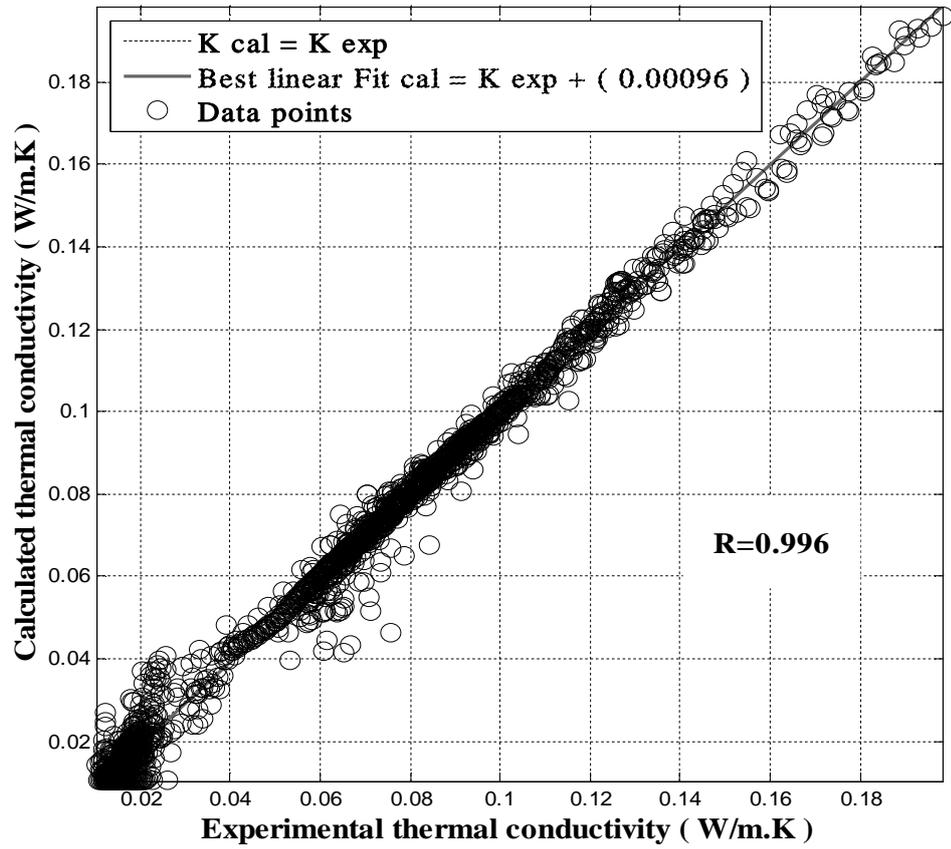
Le Tableau 4.6, montre la ligne de régression de l'équation du modèle de réseau pendant les trois phases de l'apprentissage, de la validation et du test des systèmes purs, binaires, ternaires et du système global.

Tableau 4.6 : Vecteurs de régression linéaire issue de l'équation linéaire : [équation linéaire : $y^{cal} = \alpha y^{exp} + \beta$, avec α = pente, β =y ordonnée à l'origine, R =coefficient de corrélation].

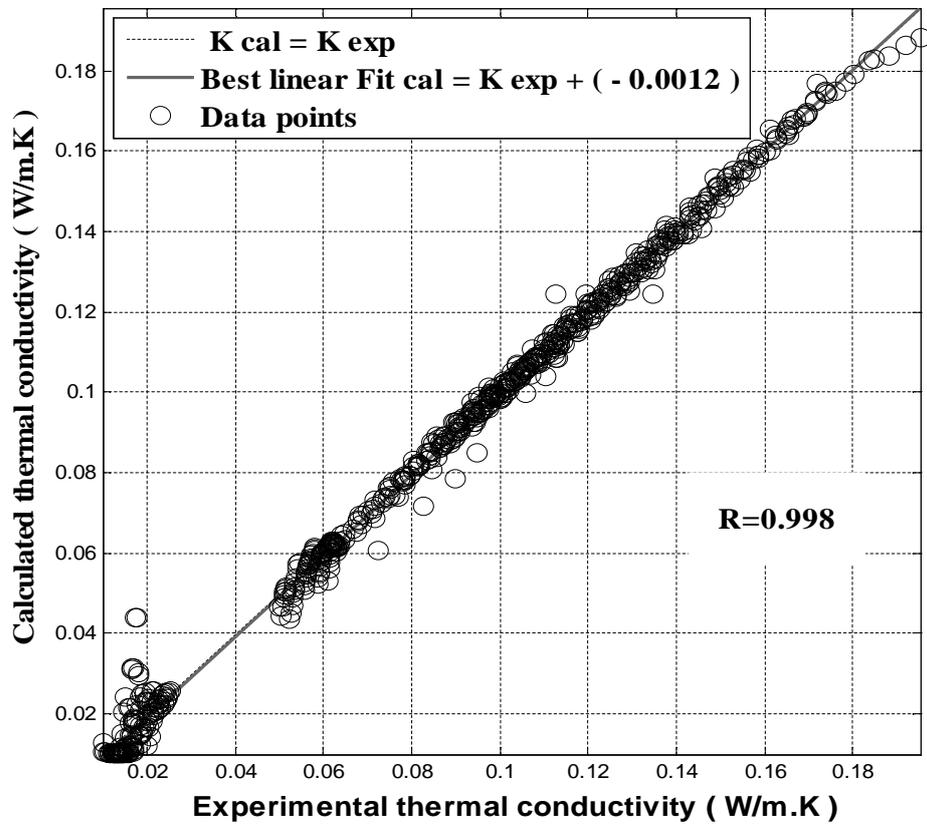
Systèmes	N	Phase	α	β	R exp
Purs	1817	Apprentissage	1.000	0.00120	0.99667
		Validation	1.000	0.00120	0.99539
		Test	0.990	0.00030	0.99445
		Total	1.000	0.00096	0.99615
Binaires	794	Apprentissage	1.000	0.00120	0.99810
		Validation	1.000	0.00094	0.99790
		Test	1.000	0.00130	0.99780
		Total	1.000	- 0.00120	0.99800
Ternaires	616	Apprentissage	1.000	0.0001100	0.99810
		Validation	1.000	0.0001700	0.99910
		Test	1.000	0.0002900	0.99880
		Total	1.000	0.0000064	0.99830
Global (RN0)	3227	Apprentissage	1.000	0.00054	0.99668
		Validation	1.000	0.00067	0.99641
		Test	1.000	0.00071	0.99690
		Total	1.000	0.00058	0.99667

La Figure 4.2 montre la comparaison entre les valeurs expérimentales et les valeurs prédites obtenues par le modèle RNA pour la base de données des différents systèmes (purs, binaires et ternaires et le système global). Les courbes de régressions ont été représentées à l'aide du logiciel MATLAB, "Plot". Chaque courbe prouve que l'approche proposée donne des résultats satisfaisants avec des coefficients de corrélations élevés (R_{exp} , R_{cal}).

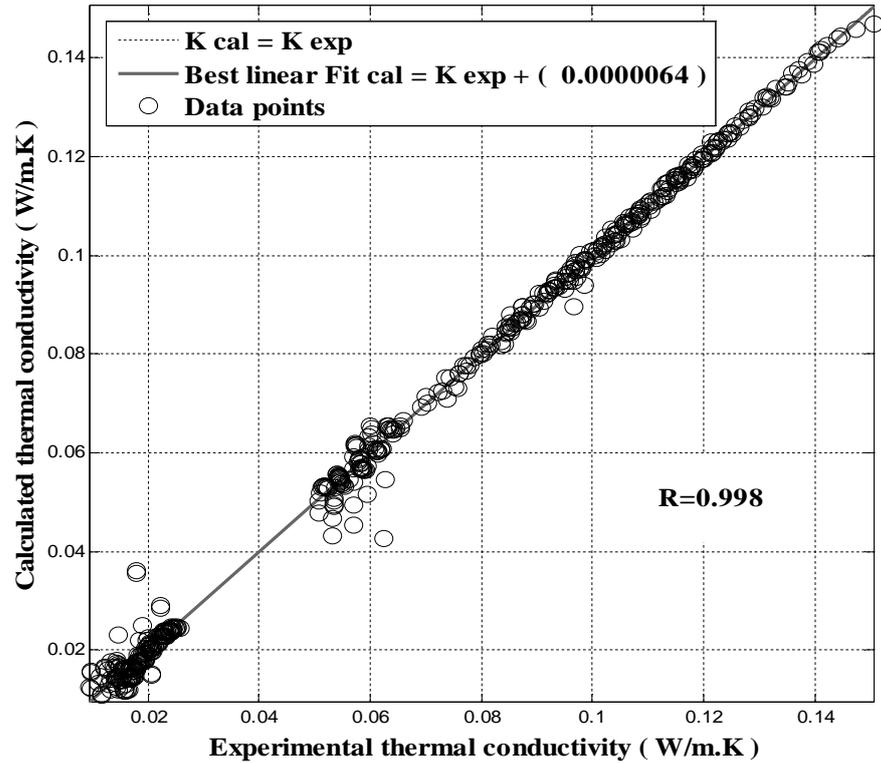
La comparaison entre les données de sortie et les valeurs calculées de la conductivité thermique des différents systèmes frigorigènes ($R_{pur} = 0.996$, $R_{binaire} = 0.998$, $R_{ternaire} = 0.998$, et $R_{global} = 0.997$) montre des pentes proches de l'unité et des valeurs d'interception proches de zéro, confirmant ainsi une corrélation étroite entre les valeurs expérimentales et celles prédites.



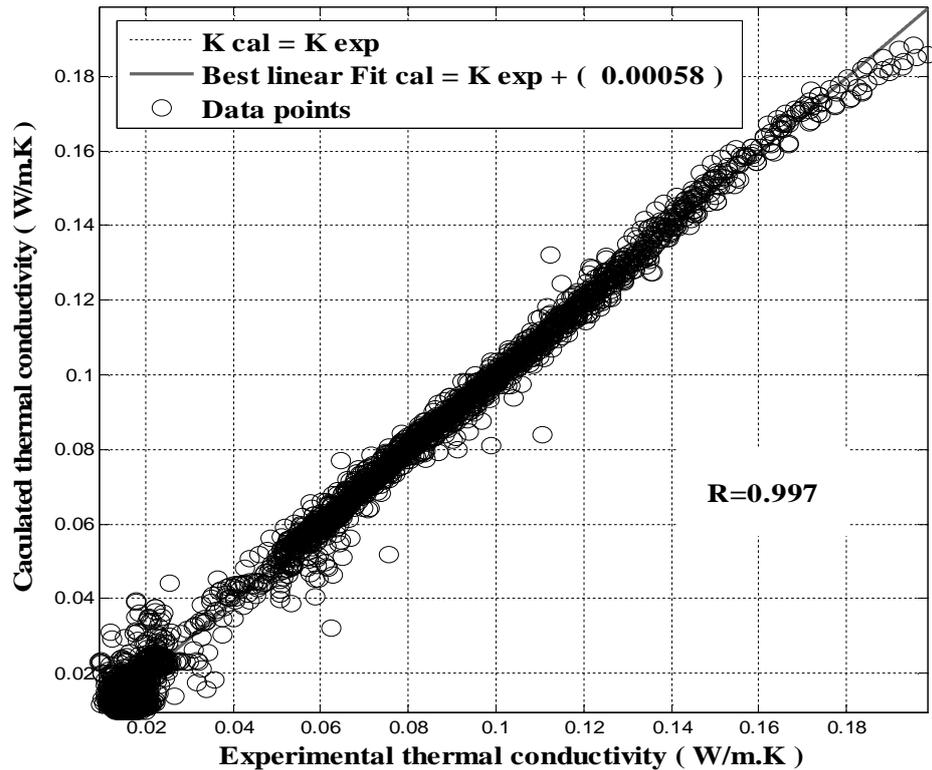
(a)



(b)



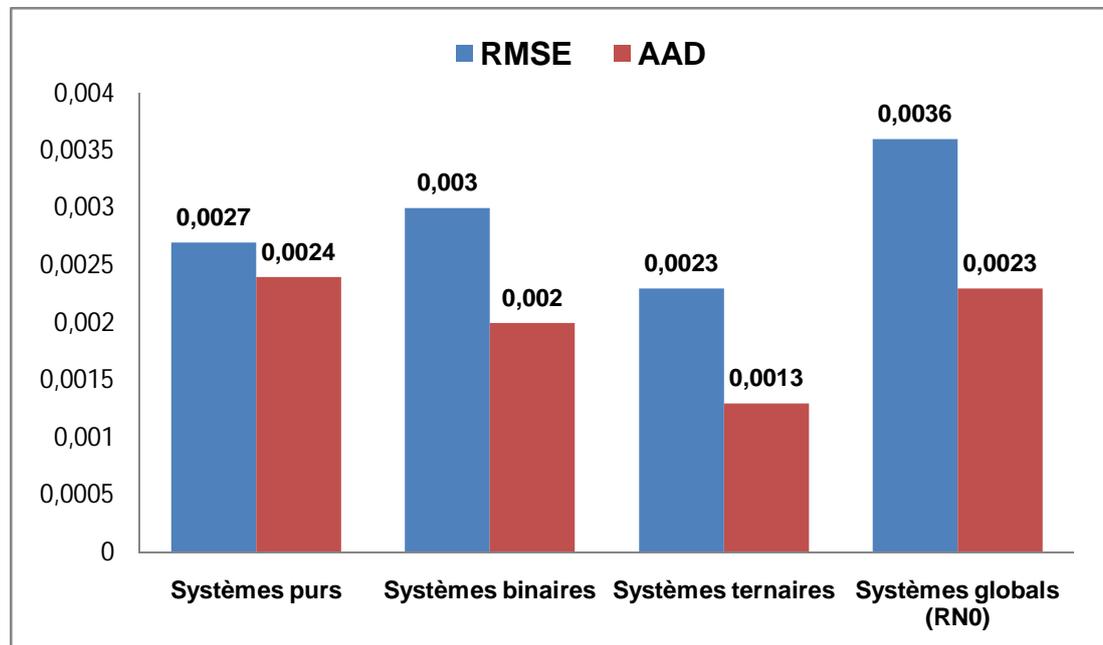
(c)



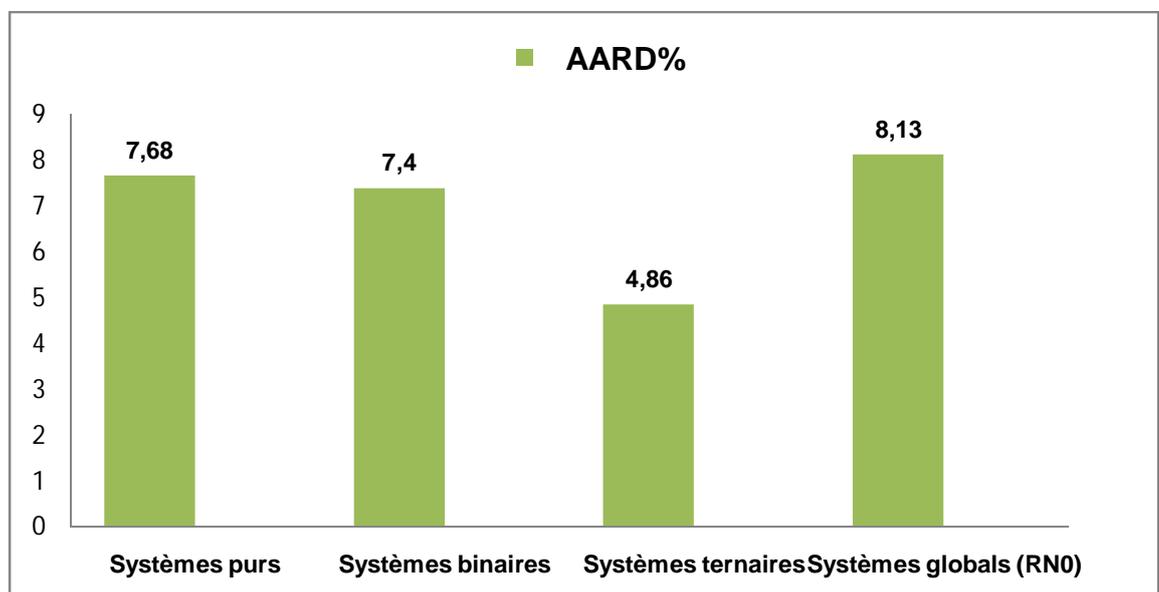
(d)

Figure 4.2 : Courbe de régression des conductivités thermiques prédites en fonction des conductivités thermiques expérimentales pour les différents systèmes (a) Systèmes purs, (b) Systèmes binaires, (c) Systèmes ternaires, (d) Système global.

On peut voir d'après la Figure 4.3, que le RNA donne des erreurs plus faibles. Le modèle RNA a été également évalué en termes de RMSE, MSE, AAD, AARD, SSE et R^2_{Cal} pour les différents systèmes purs, binaires, ternaires et du système global. Les résultats obtenus sont rassemblés dans le Tableau 4.7.



(a)



(b)

Figure 4.3 : Les différentes performances pour les trois systèmes (purs, binaires et ternaires): (a) racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (RMSE), erreur absolue moyenne (AAD), et (b) erreur relative absolue moyenne (AARD%).

Table 4.7 : Valeurs de l'erreur (RMSE), (MSE), (AAD), (AARD %) et le coefficient de détermination (R^2_{Cal}).

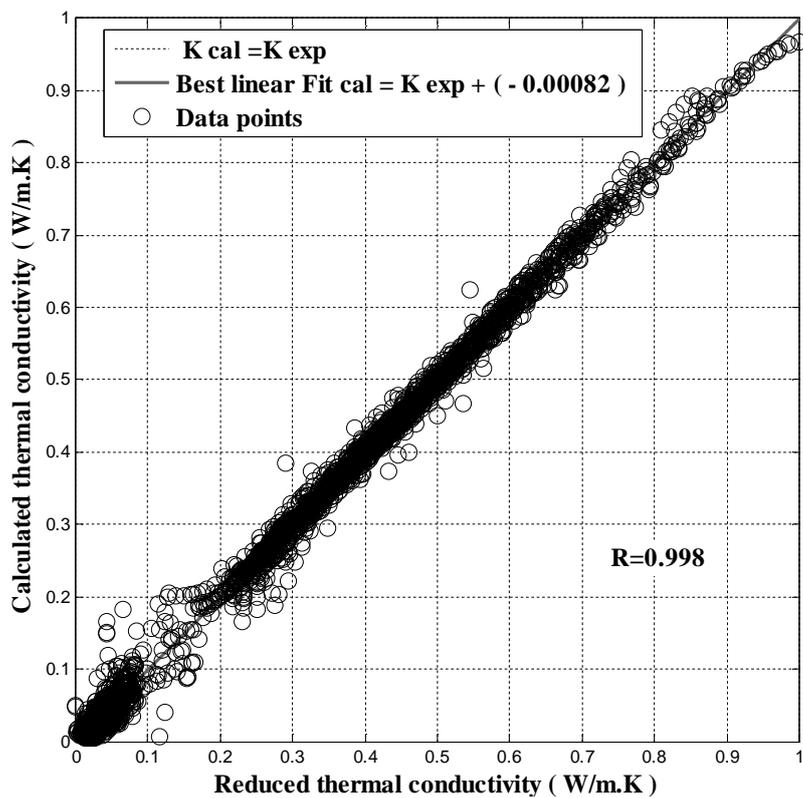
Systèmes	RMSE	MSE	AAD	AARD%	SSE	R^2_{Cal}
Purs	0.0027	0.00062	0.0024	07.6812	0.0244	0.9977
Binaires	0.0030	0.00047	0.0020	07.4144	0.0074	0.9988
Ternaires	0.0023	0.00033	0.0013	04.8599	0.0033	0.9989
Global (RN0)	0.0036	0.00090	0.0023	08.1295	0.0411	0.9980

4.2.1.2 Développement du modèle RN0 utilisant la technique de la réduction

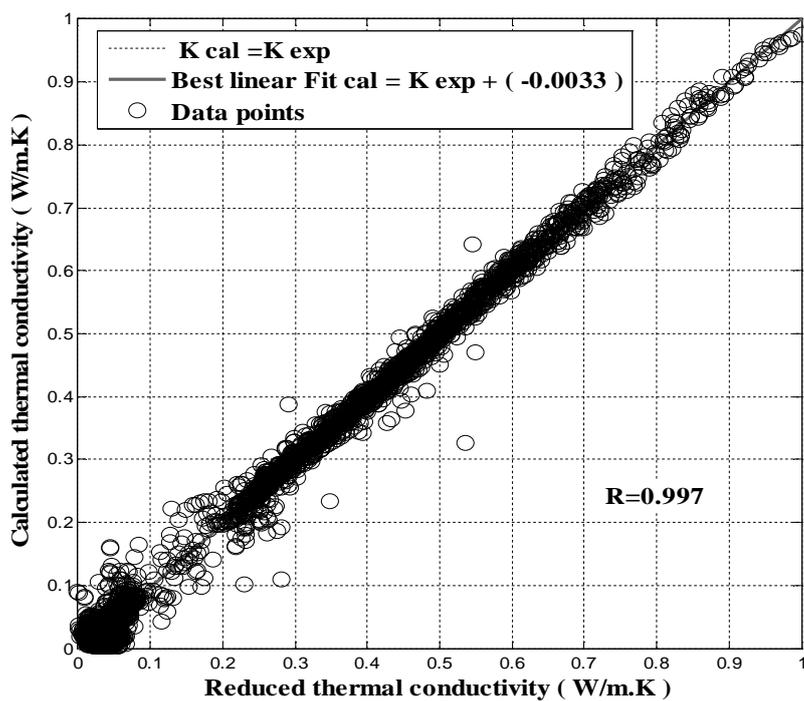
Selon la discussion précédente, un réseau de neurone artificiel est développé pour prédire la conductivité thermique des trois systèmes (purs, binaires et ternaires), avec une fonction de transfert (*Tangsig*) utilisée dans la couche cachée et la couche de sortie. La structure des trois modèles optimaux (RN0, RN1, et RN2) est résumée dans le Tableau 4.8.

Tableau 4.8 : Structure des modèles optimisés par RNA.

Modèles de RN	Algorithme d'apprentissage	Couche entrée	Couche cachée		Couche sortie	
		Nombre de neurone	Nombre de neurone	Fonction d'activation	Nombre de neurone	Fonction d'activation
RN0	Levenberg-Marquardt (<i>Trainlm</i> MATLAB Function)	09	13	<i>Tangsig</i>	01	<i>Tangsig</i>
RN1	Levenberg-Marquardt (<i>Trainlm</i> MATLAB Function)	07	17	<i>Tangsig</i>	01	<i>Tangsig</i>
RN2	Levenberg-Marquardt (<i>Trainlm</i> MATLAB Function)	07	15	<i>Tangsig</i>	01	<i>Tangsig</i>



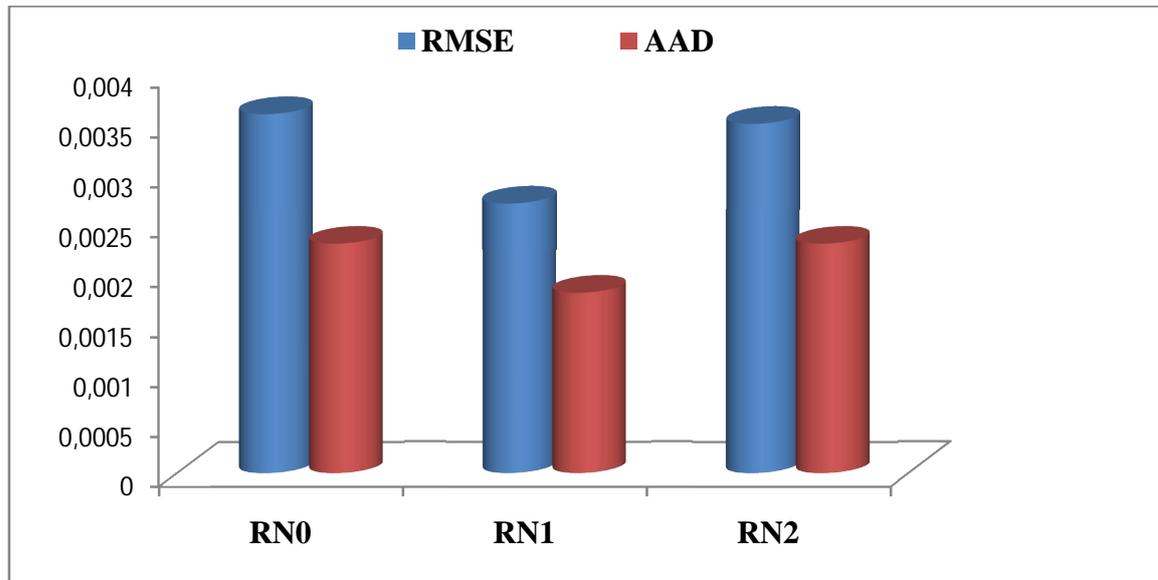
(a)



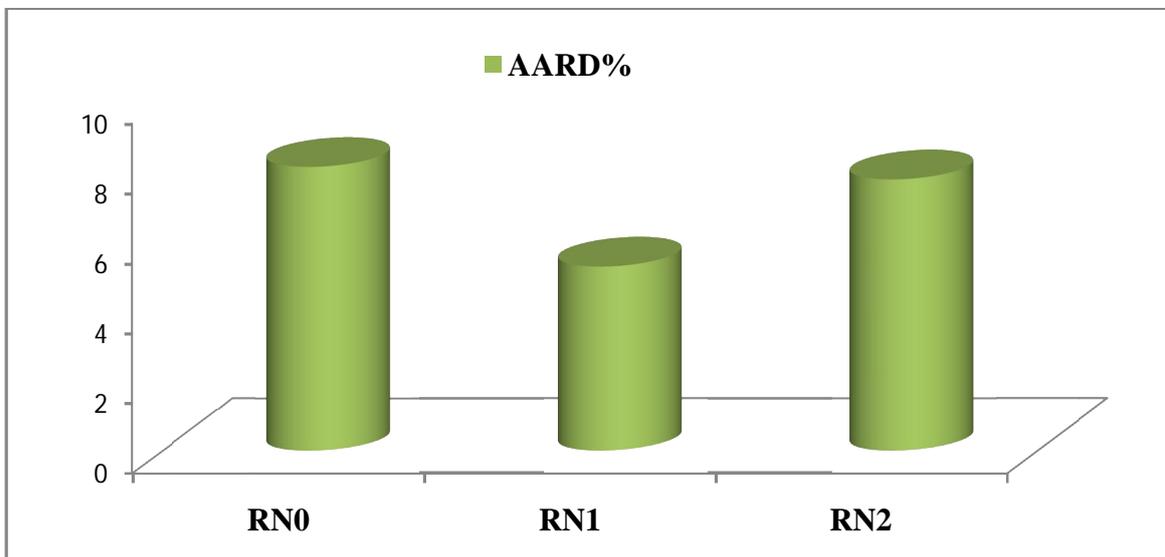
(b)

Figure 4.4 : Comparaison entre les résultats expérimentaux réduits et calculés : (a), RN1 (nombre des neurones = 17), (b), RN2 (nombre des neurones = 13) pour le système global.

Les courbes de régression présentent les valeurs calculées en fonction des valeurs expérimentales (de la conductivité thermique), pour toute la base de données (système global). Ces courbes affichent des pentes proches de l'unité et des valeurs d'interception proches du zéro. Nous observons que le meilleur coefficient de régression (R) atteint est de l'ordre de 0.998 pour RN1 et de 0.997 pour RN2, ce qui confirme l'accord entre les valeurs expérimentales et les valeurs prédites (Figure 4.4).



(a)



(b)

Figure 4.5 : Performances des trois modèles (RN0, RN1, RN2) : (a) racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (RMSE), erreur absolue moyenne (AAD), et (b) erreur relative absolue moyenne (AARD%).

Les performances des modèles RNA (RN1, RN2) développés ont été comparées aux modèles RNA (RN0) précédemment développés pour estimer la conductivité thermique des données originales (réelles) et des données réduites. Les trois modèles ont fourni des valeurs élevées du coefficient de corrélation R. Le modèle RN0 obtenu était similaire à RN2, tandis que le modèle RN1 conduit à un meilleur ajustement des données expérimentales que les modèles RN0 et RN2 qui montre une corrélation significative entre les valeurs expérimentales et les valeurs prédites. Les résultats présentés confirment la fiabilité et la robustesse de notre model développé par le RNA (Figure 4.5). Les valeurs des différentes erreurs des trois modèles développés ont été reportées sur le Tableau 4.9.

Tableau 4.9 : Performances d'erreur et vecteurs de régression linéaire entre les modèles obtenus par RN0, RN1, RN2.

	RMSE	MSE	AAD	AARD%	SSE	Rexp	Rcal
RN0	0.0036	0.00006	0.0023	08.1295	0.0411	0.99667	0.9980
RN1	0.0027	0.00004	0.0018	05.2531	0.0237	0.9980	0.9988
RN2	0.0035	0.00001	0.0023	07.7516	0.0393	0.9970	0.9980

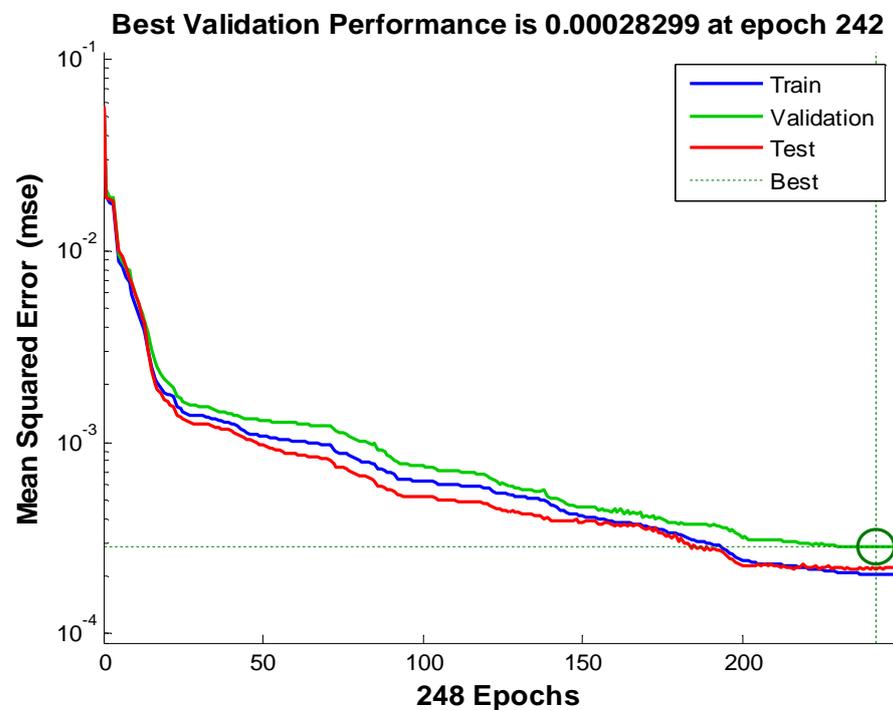


Figure 4.6 : Performance de réseau du modèle optimal.

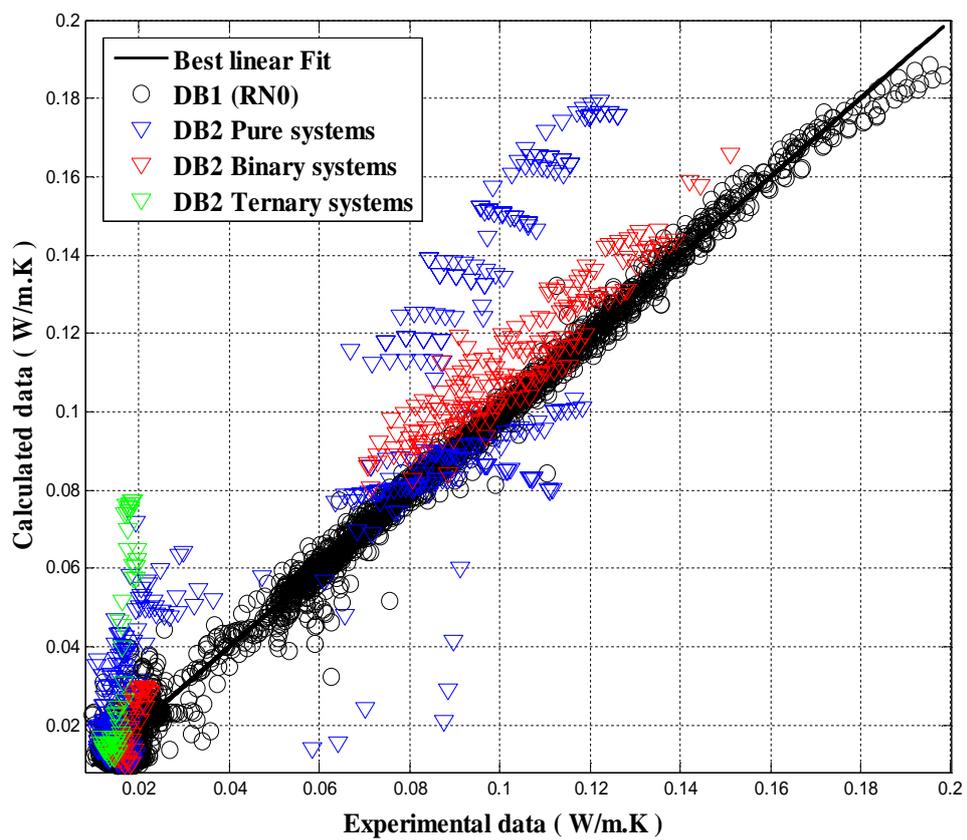
La Figure. 4.6 représente la performance mesurée en termes de MSE. Il se trouve qu'après 242 itérations, la performance du modèle ne s'améliore pas et se stabilise à 0.000283.

4.2.2 Résultats de la prédiction

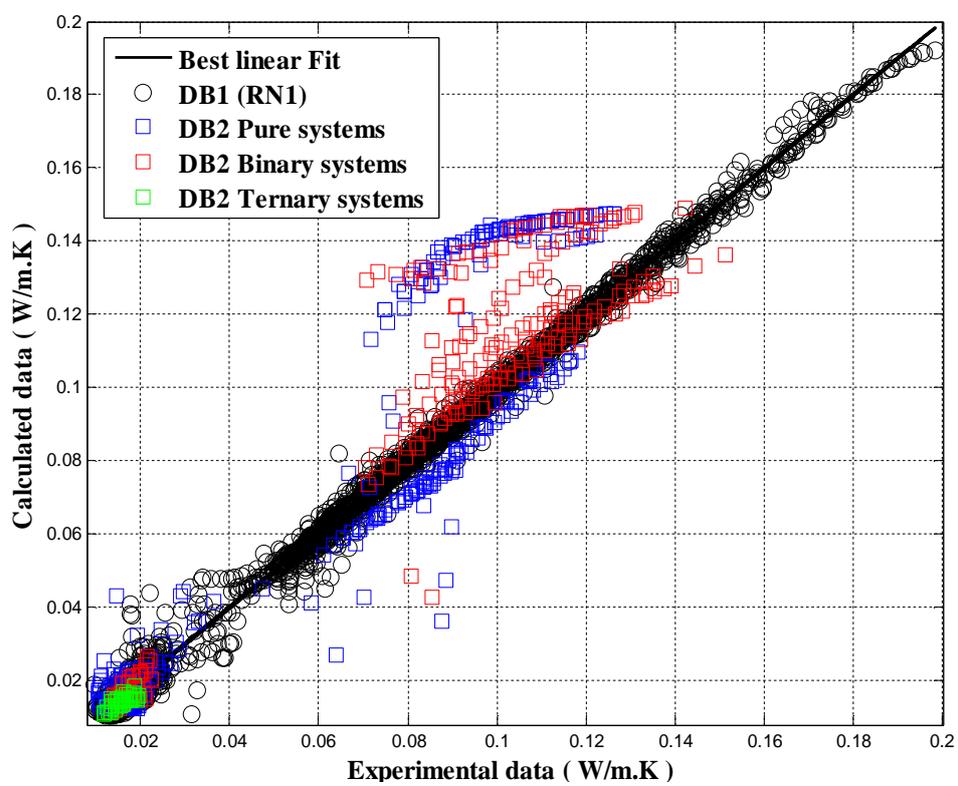
La prédiction a été réalisée pour tester la précision des modèles développés et optimisés (RN0, RN1 et RN1). Dans cette étape, on a testé des points de données expérimentales de nouveaux systèmes. Une base des données comprenant des fluides frigorigènes (purs binaires et ternaires) nocifs qui n'ont pas été exploités lors de l'apprentissage de notre réseau a été construite.

L'accord entre les données expérimentales de la conductivité thermique et celle calculées était tout à fait acceptable. Le degré du tracé entrée-sortie a été réalisé sur le modèle de réseau (RN2) pour déterminer la conductivité thermique. La prévision de la nouvelle base de données (BD2) des frigorigènes nocifs par des frigorigènes non nocifs utilisant (BD1) est donnée dans la Figure 4 .7, ce qui montre une bonne convergence entre la sortie expérimentale et la sortie prédite par le RNA.

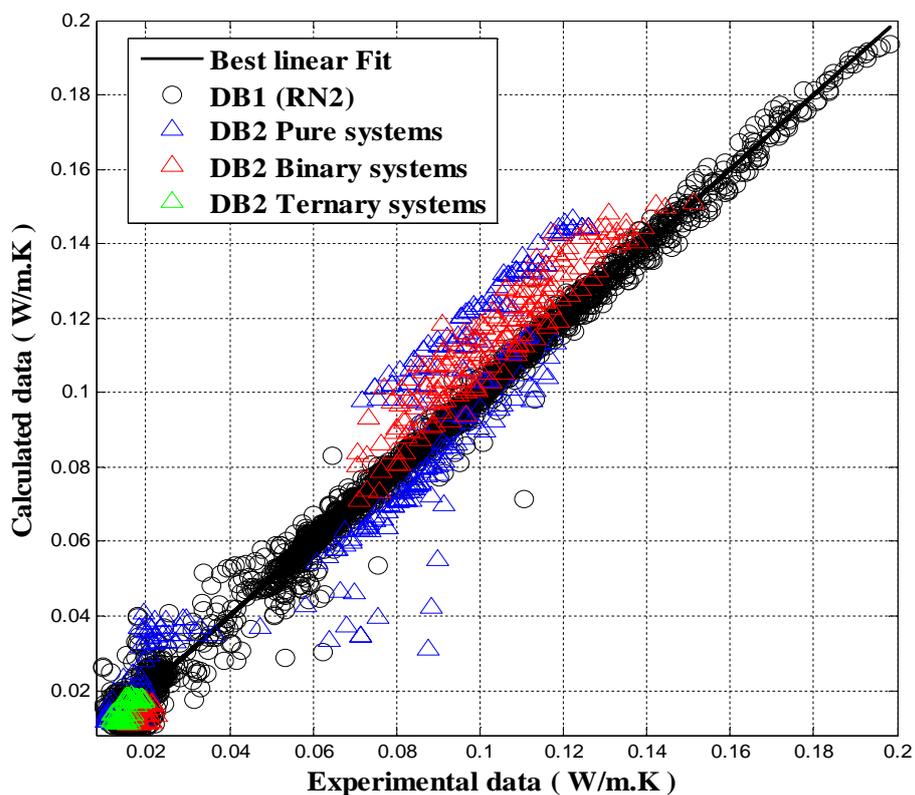
Cela confirme que la méthode utilisée a une capacité de prédiction de la sortie. La Figure 4.8 montre la prédiction de BD2 par BD1 dans l'intervalle $[0.01, 0.03] \text{ W.m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$. Ces résultats montrent la bonne capacité prédictive du modèle RNA. En général, le résidu ne dépassait pas $[-0.025, 0.04]$ pour la nouvelle base de données (BD2) et $[\pm 0.02]$ pour la base de données (BD1) sauf pour quelques points expérimentaux (Figure 4.9). Les résultats présentant la courbe de régression avec différentes couleurs montre une valeur appropriée et suffisante du coefficient de régression $R = 0.95$ (Figure 4. 10).



(a)



(b)



(c)

Figure 4.7 : Comparaison entre les valeurs de BD1 et BD2 des systèmes (purs, binaires et ternaires) pour la prédiction: (a) RN0, (b) RN1, (c), RN2.

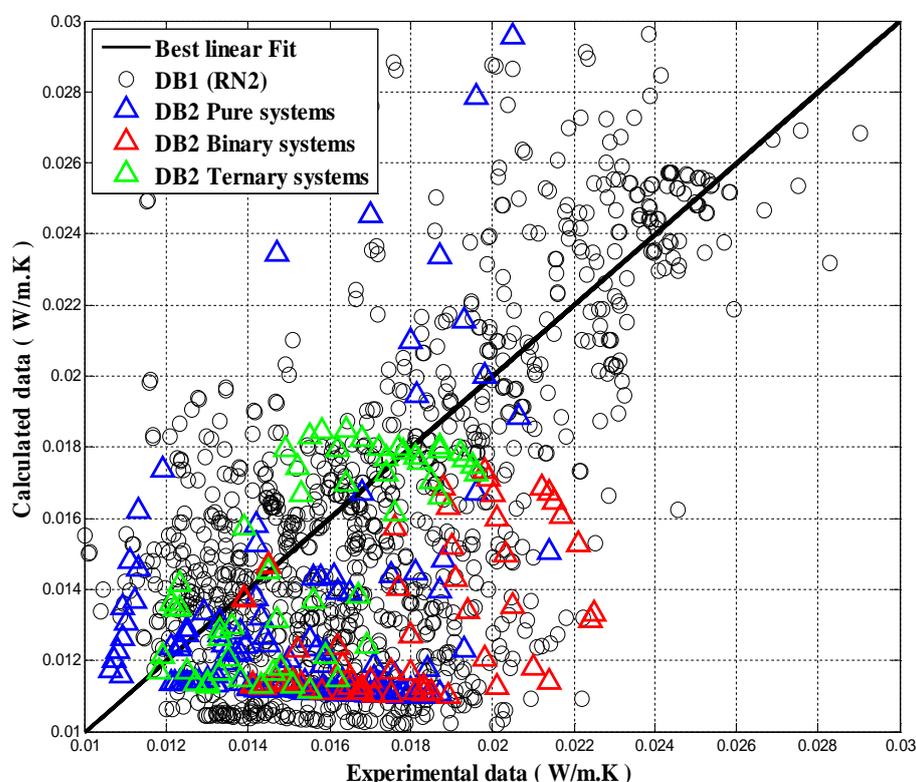


Figure 4.8 : Prédiction entre la BD2 et la BD1 dans l'intervalle $K=[0.01 \text{ à } 0.03] \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^1$.

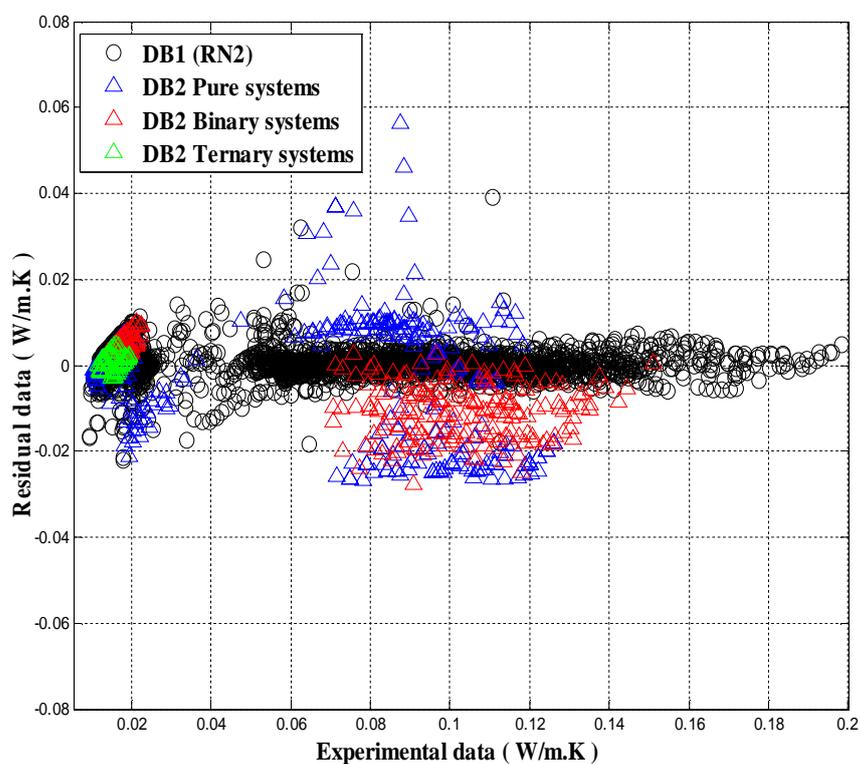


Figure 4.9 : Résidus des valeurs calculées de la conductivité thermique en fonction des valeurs expérimentales de la BD2, [$Residus = K_{exp,i} - K_{cal,i}$].

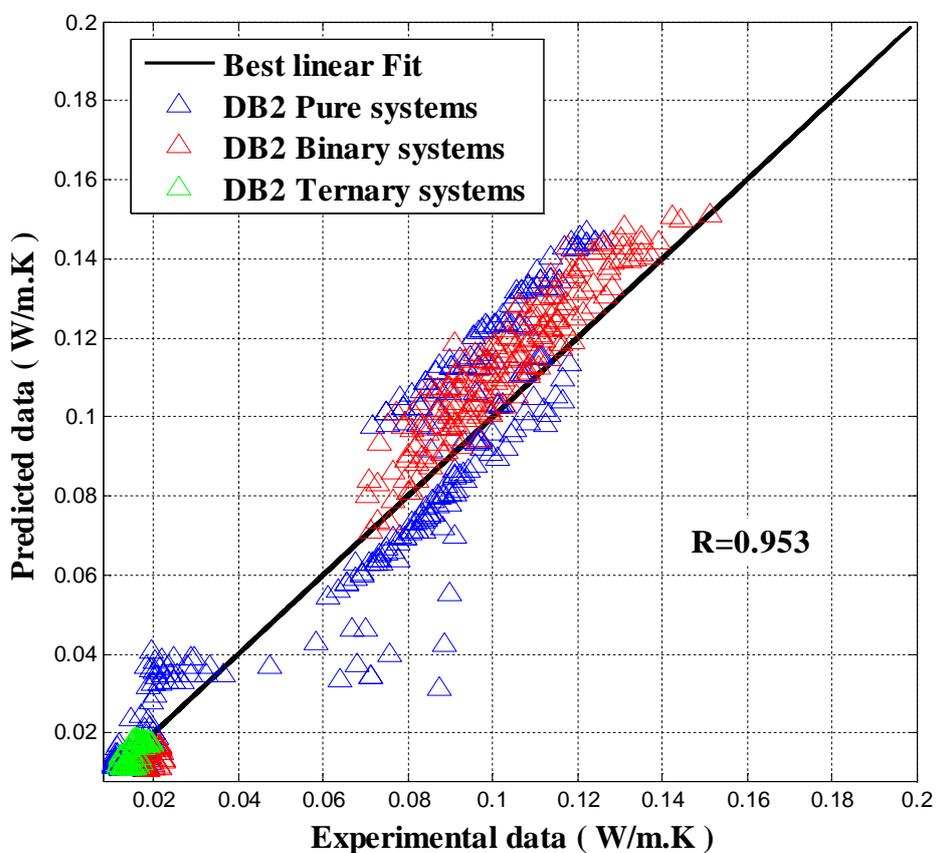


Figure 4.10 : Courbe de régression de la prédiction de la (BD2).

Tableau 4.10 : Comparaison entre le modèle prédictif des différents résultats de la nouvelle base de données (BD2) obtenue par chaque modèle RN0, RN1, RN2.

Modèle	Systèmes	N	RMSE	MSE	AAD	AARD%	SSE	R^2_{Cal}
RN0	Purs	363	0.0284	0.0008	0.0212	48.7426	0.2925	0.8446
	Binaires	240	0.0116	0.0002	0.0094	21.046	0.0486	0.9754
	Ternaires	57	0.0304	0.0009	0.0202	115.911	0.0525	-2.7634
	Total	660	0.0244	0.0006	0.0169	44.7115	0.3936	0.8982
RN1	Purs	363	0.0218	0.0005	0.0147	23.0868	0.1723	0.9084
	Binaires	240	0.0167	0.0004	0.0121	23.2145	0.1017	0.9484
	Ternaires	57	0.0021	0.0000	0.0017	10.8684	0.0002	0.9827
	Total	660	0.0204	0.0004	0.0126	22.0780	0.2743	0.9291
RN2	Purs	363	0.0140	0.0002	0.0108	21.1563	0.0710	0.9623
	Binaires	240	0.0090	0.0001	0.0092	14.6979	0.0292	0.9853
	Ternaires	57	0.0020	0.0000	0.0017	10.8850	0.0002	0.9832
	Total	660	0.0123	0.0002	0.0094	17.9208	0.1004	0.9742

Ceci indique que la nouvelle approche (RN2) a amélioré la prédiction de la conductivité thermique en produisant de petites valeurs des erreurs (RMSE, MSE, AAD, AARD, et SSE), qui sont respectivement de l'ordre de 0.0123, 0.0002, 0.0094, 17.92% et 0.10 (Tableau 4.10). De plus, la qualité du modèle (robustesse et pouvoir prédictif) est estimée par les coefficients de déterminations caractéristiques reportés ($R^2 = 0.974$), ce qui montre que notre réseau est fiable et capable de réaliser la prédiction.

4.2.3 Résultats de la modélisation neuronale optimale (BD1+BD2)

Le Réseau de Neurones Artificiel (RNA) est particulièrement bien adapté. Il est largement utilisé pour les études et est un outil puissant pour construire des modèles prédictifs. L'utilisation d'une régression neuronale passe par le choix des paramètres d'entrées mais aussi par l'optimisation de l'architecture du réseau de neurones lui-même.

La meilleure architecture du réseau FFBP, avec l'algorithme de Levenberg-Marquard Training (fonction de formation *Trainlm* MATLAB), consistait en sept neurones dans la couche d'entrée, 25 neurones dans la couche cachée et un neurone dans la couche de sortie (Tableau 4.11).

Tableau 4.11 : Topologie du RN3 optimale (BD1+BD2).

Type du réseau	FFNN-BP	
Couche	Nombre de neurone	Fonction d'activation
Couche Entrée	7	----
Couche Cachée	25	<i>Tangsig</i>
Couche Sortie	1	<i>Tangsig</i>
Algorithme d'apprentissage	FFNN-BP utilisant l'optimisation de Levenberg-Marquardt. (Fonction <i>Trainlm</i> de MATLAB)	

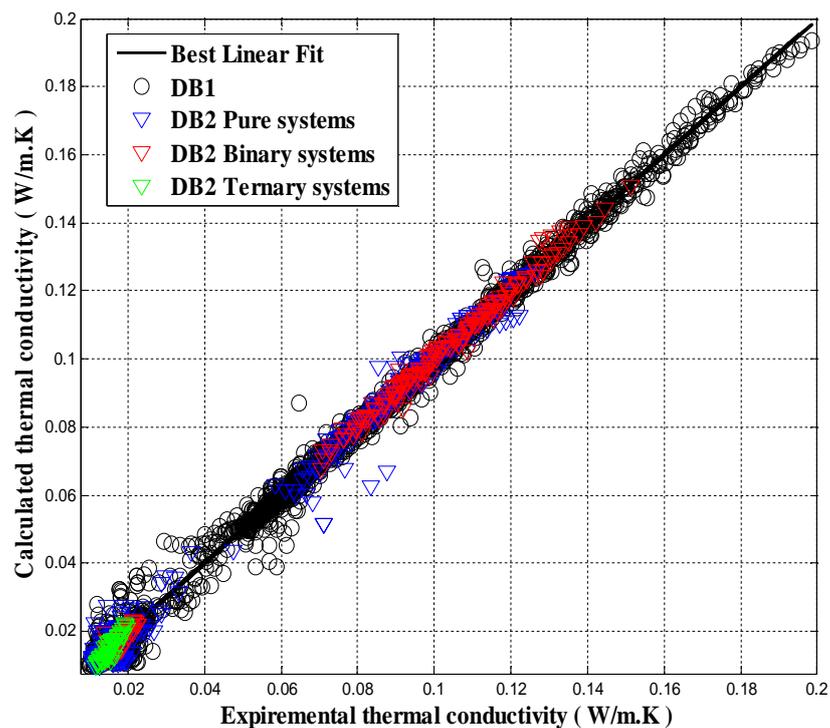


Figure 4.11: Présentation graphique des conductivités thermiques prédites en fonction des conductivités thermiques expérimentales (BD1+BD2).

Les Figure 4.11 et 4.12 montrent une corrélation significative avec un pourcentage d'erreur résiduelle variant de $[\pm 0.02]$, une valeur R^2 élevée ($R^2=0.998$) et une prédiction assez précise de l'erreur d'écart moyenne absolue (AARD) estimée à 5.8% comme une grande robustesse et fiabilité.

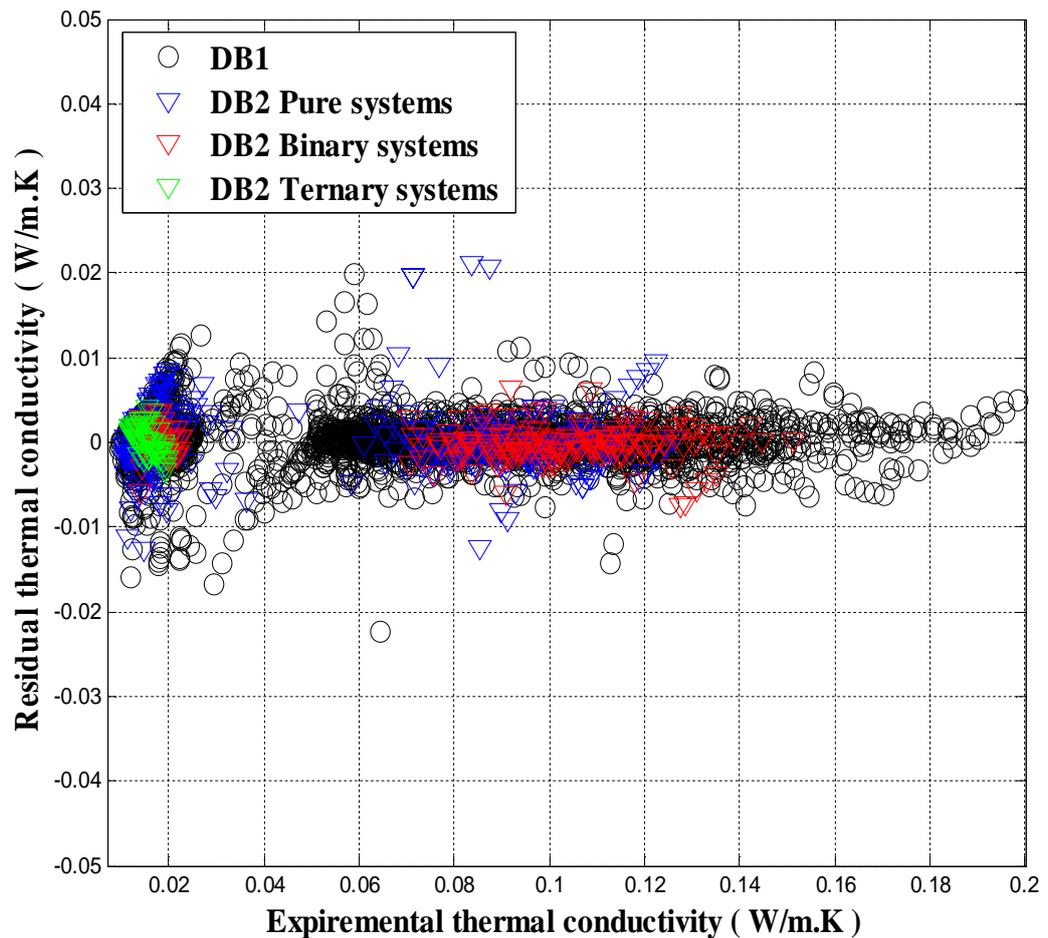


Figure 4.12 : Représentation graphique des résidus en fonction des conductivités thermiques expérimentales.

L'analyse statistique sous forme d'erreurs (RMSE, MSE, AAD, AARD, SSE) communément calculées est résumée dans le Tableau 4.12. Les valeurs de ces erreurs sont nettement minimales à ce qui est considéré généralement comme acceptables et satisfaisants et avec un coefficient (R^2_{cal}) proche de l'unité.

Tableau 4.12 : Valeurs des paramètres statistiques pour les erreurs (RN3).

Modèle	N	RMSE	MSE	AAD	AARD%	SSE	R^2_{Cal}
BD1+BD2	3887	0.0028	0.00005	0.0018	5.78	0.0303	0.9988

4.2.4 Détermination des équations du RNA optimisé

À partir du RN optimisé, on peut exprimer l'assimilation de la conductivité thermique des fluides frigorigènes des différents systèmes (purs, binaires et ternaires) par un modèle mathématique qui incorpore toutes les entrées E_i . L'architecture du réseau optimisé est représentée schématiquement sur la Figure 4.13 ci-dessous.

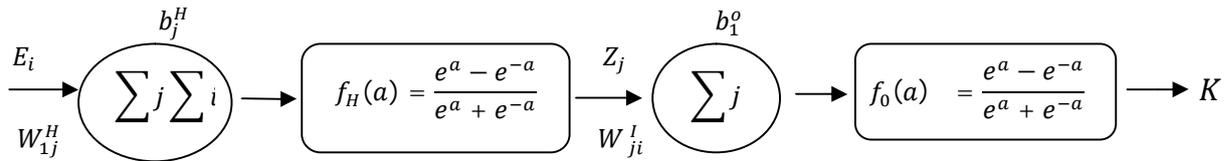


Figure 4.13 : Représentation schématique du RN2 optimal.

L'équation du modèle pour la couche cachée est exprimée par la relation suivante :

$$z_j = f_H\left(\sum_{i=1}^n w_{ji}^L E_i + b_j^H\right) \quad (4.3)$$

En appliquant l'équation d'activation hyperbolique tangente sigmoïde (*Tansig*) l'équation devient :

$$Z_j = f_H\left[\sum_{i=1}^{15} w_{ji}^L E_i + b_j^H\right] = \frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{15} w_{ji}^L E_i + b_j^H\right) - \exp\left(-\sum_{i=1}^{15} w_{ji}^L E_i + b_j^H\right)}{\exp\left(\sum_{i=1}^{15} w_{ji}^L E_i + b_j^H\right) + \exp\left(-\sum_{i=1}^{15} w_{ji}^L E_i + b_j^H\right)} \quad (4.4)$$

$j=1, 2, \dots, 15$.

La sortie du modèle la conductivité thermique :

$$\text{La conductivité thermique}(K) = f_0\left[\sum_{j=1}^7 w_{1j}^H Z_j + b_1^O\right] \quad (4.5)$$

La combinaison des équations (4.4) et (4.5) mène à la formule mathématique suivante qui décrit l'assimilation de la conductivité thermique en prenant en compte toutes les entrées (E_i) température (T), la pression (P), la masse moléculaire (M), la température pseudo-critique (T_{PC}), la pression pseudo-critique (P_{PC}), la densité pseudo-critique (D_{PC}) et la fraction massique dans la phase liquide ou vapeur (X) :

$$k = \frac{\exp\left[\sum_{j=1}^7 w_{1j}^H \left[\frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{15} w_{ji}^L Z_j + b_j^H\right) - \exp\left(-\sum_{i=1}^{15} w_{ji}^L Z_j + b_j^H\right)}{\exp\left(\sum_{i=1}^{15} w_{ji}^L Z_j + b_j^H\right) + \exp\left(-\sum_{i=1}^{15} w_{ji}^L Z_j + b_j^H\right)}\right] + b_1^O\right]}{\exp\left[\sum_{j=1}^7 w_{1j}^H \left[\frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{15} w_{ji}^L Z_j + b_j^H\right) - \exp\left(-\sum_{i=1}^{15} w_{ji}^L Z_j + b_j^H\right)}{\exp\left(\sum_{i=1}^{15} w_{ji}^L Z_j + b_j^H\right) + \exp\left(-\sum_{i=1}^{15} w_{ji}^L Z_j + b_j^H\right)}\right] + b_1^O\right]} \quad (4.6)$$

Où w_{ji}^L représente le poids synaptique de la connexion du neurone i de la couche d'entrée au neurone j de la couche cachée; w_{1j}^H représente le poids synaptique de la connexion du neurone j de la couche cachée au neurone de la couche de sortie; b_j^H et b_1^O représentent respectivement les biais du neurone j de la couche cachée et du neurone de la couche de sortie.

4.3 Résultats et modélisation de la densité volumique, de l'enthalpie et de l'entropie

L'objectif principal de cette contribution est de développer deux modèles précis pour prédire les valeurs de la densité volumique des fluides frigorigènes qui regroupent trois systèmes purs (R32, R125, R134a), leurs mélanges binaires (R32+R125, R32+R134a) et ternaires (R32+R125+R134a) mais aussi pour prédire l'enthalpie et l'entropie des trois systèmes (R134a, R410A: (R32+R125: 50%, 50%), R407C: (R32+R125+R134a: 23%, 25%, 52%)).

4.3.1 Résultats et procédure de modélisation de la densité volumique

On s'intéresse à obtenir la structure optimale du RNA qui donne une meilleure corrélation entre les données expérimentales et celles prédites par le RNA en calculant les coefficients de déterminations (R^2) et les différentes erreurs et ce afin de déterminer le modèle le plus approprié.

4.3.1.1 Analyse de la sensibilité des entrées par apport à la sortie

Pour voir la contribution ainsi que le profil de variation de chaque variable d'entrée sur la sortie du réseau de neurone, on a procédé à une analyse de sensibilité par la méthode de poids.

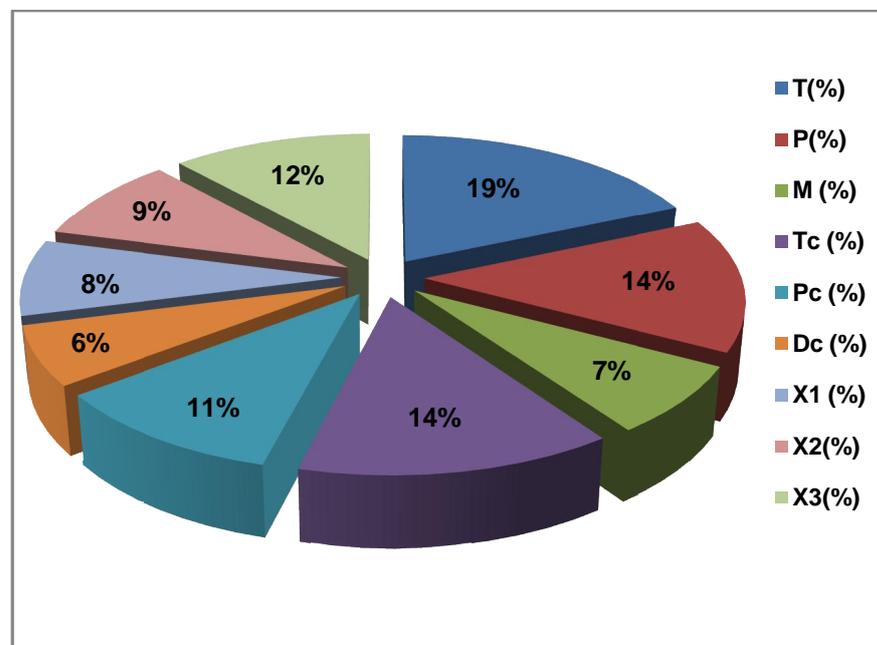


Figure 3.14 : Importance relative des variables d'entrées sur la prédiction de la densité volumique.

La contribution des variables d'entrées (la température, la pression, la masse moléculaire, la température critique, la pression critique, la densité critique, la fraction massique) sur la densité volumique est illustrée sur la Figure 3.11. Le processus de calcul qui se compose de quatre étapes est schématisé sur l'organigramme précédent de la Figure 3.6.

4.3.1.2 Performances du modèle neuronal

Le Tableau 4.13, montre la matrice des poids synaptiques et les vecteurs de biais des couches cachées et de la couche de sortie du système global. Comme indiqué précédemment, le modèle obtenu à l'aide du réseau de neurones a été développé dans le but de prédire la densité volumique. La performance du modèle a été mesurée statistiquement par la racine carrée l'erreur quadratique moyenne (RMSE), l'erreur quadratique moyenne (MSE) et le coefficient de corrélation R. Une valeur de R supérieure à 0.5 est généralement considérée comme satisfaisante, alors qu'une valeur supérieure à 0.9 est excellente.

La Figure 4.15 illustre les courbes de régression linéaire de la densité volumique prédite par le modèle avec la densité volumique expérimentale. Pour l'ensemble d'apprentissage, les valeurs des vecteurs de régression se rapprochent des valeurs idéales [α (la pente), β (Interception y), (R coefficient de corrélation)]= [0.99, 5.8, 0.997]. Les valeurs obtenues pour l'ensemble de validation sont les suivantes : [α , β , R] = [0.99, 7.4, 0.995]. Pour l'ensemble de test, on a les valeurs suivantes : [α , β , R] = [1, 3.9, 0.999]. Les coefficients de corrélations sont considérés comme excellents ($0.90 \leq R \leq 1.00$) pour la phase d'apprentissage, du test et la phase de validation, ce qui implique une très bonne robustesse du modèle neuronal établi.

La comparaison entre les valeurs expérimentales et calculées de la densité volumique obtenues par la simulation du modèle RN optimisé pour le système global montre qu'il existe un très bon accord entre elles, avec des vecteurs se rapprochant de l'idéal [α , β , R] = [0.99, 5.6, 0.997]. Pour le RNA, cela signifie qu'il existe un lien linéaire fort entre les variables dépendante (y : la sortie du réseau) et indépendantes (x : les entrées). La performance du RN optimisé a été évaluée en fonction du pourcentage de l'erreur quadratique moyenne (RMSE) et de l'erreur quadratique moyenne (MSE).

Tableau 4.13 : Poids et biais du RNA optimal pour le système global.

Connexions Couche d'entrée-Couche cachée										Connexions Couche cachée-Couche de sortie	
Poids w_j^i									Biais	Poids w_j^h	Biais
T	P	M_{PC}	T_{PC}	P_{PC}	D_{PC}	X_i	X_j	X_K	b_{hj}	ρ	b_{OK}
0.60915	-0.2727	0.6823	0.0502	0.5241	-1.3537	-0.5801	-0.9556	1.3433	-1.8356	0.3369	0.28825
0.7732	0.1949	-0.3957	-0.7949	1.0210	0.7397	0.5076	1.2692	-1.6919	-2.6504	-1.3435	
1.1856	0.9650	-1.2610	0.6783	0.1646	-0.9081	0.5972	1.2126	-0.9650	-0.8950	-0.9382	
0.1620	1.1826	-0.4924	0.5543	0.7482	-0.1561	-1.1630	-0.2628	-0.0818	-1.5374	-0.1678	
0.6321	-1.0394	1.1274	0.8085	0.2011	-0.6376	0.1515	-0.0084	0.5825	-1.7314	0.6219	
-0.0671	0.06944	-0.7576	0.6093	1.1969	0.6962	-1.1215	-1.4515	0.5851	0.9648	0.7597	
1.2207	1.1446	0.2594	0.3604	1.3269	0.1894	0.3658	-0.6650	-0.7849	-0.9756	1.0237	
-0.4446	-0.9073	-0.6322	-0.8297	-0.1594	0.3822	0.2979	-0.0832	-1.5951	1.1960	0.5093	
0.5738	-0.2033	-0.3651	0.4535	1.5411	0.1995	0.9435	2.1305	-1.5951	-1.3495	0.3026	
1.0781	0.0163	-0.7596	1.0774	-0.3536	0.9645	-0.2666	0.6904	1.6602	-0.4480	-0.2387	
0.4469	1.5130	0.1663	0.8252	1.1692	-0.0548	0.0799	0.7234	-0.4140	-0.0799	0.1100	
-0.3788	-0.7810	-0.9784	0.8821	-0.7284	0.3974	-0.2427	1.3058	-0.7469	0.3049	-0.5885	
-0.8502	-0.3440	1.1961	0.2456	0.7518	-0.0296	1.0219	-0.8952	0.2956	-0.2098	-0.2773	
-0.9096	-0.2320	-0.8952	0.1137	-0.7750	0.4515	0.4152	-1.3070	-0.5498	-0.06363	0.1346	
-1.1086	-0.3411	-0.4702	0.7289	-1.5606	-0.0390	-0.1756	0.7962	1.0021	-0.4704	0.46512	
-0.3331	0.1241	0.4748	-0.1311	1.3871	-0.9247	-0.9762	1.2023	-1.3768	-0.0927	-0.0790	
-0.3448	-1.303	-0.8810	0.9395	0.6271	-0.1011	-0.6221	0.0852	-0.2185	-0.8044	-0.9804	
-0.4187	0.0795	0.1126	-0.9286	0.3302	0.4294	1.6392	0.5910	-0.3614	-1.2792	-0.0888	
0.4757	-0.2226	0.8267	-0.9247	0.2269	-0.3569	-0.1174	1.3610	0.5263	0.9877	0.0731	
0.1736	-0.1841	0.7447	-0.729	1.0823	0.5535	-1.0749	-1.9179	0.9300	1.3524	0.4137	
0.2238	-0.7061	0.3723	-0.2150	0.5239	-0.8784	-0.6791	1.1452	-1.1227	1.3712	-0.3567	
0.9072	-0.7926	0.3522	0.2964	0.3130	-0.5602	0.1414	-0.7422	-0.1675	1.7105	-0.2914	
-0.9352	-0.6620	-0.1745	-0.9348	0.6855	0.2492	0.6396	0.3666	-0.4628	-1.9825	0.9241	
0.2566	-0.5399	-0.5845	0.5332	0.7458	0.6723	0.5191	1.3172	-0.4122	1.4913	1.1980	

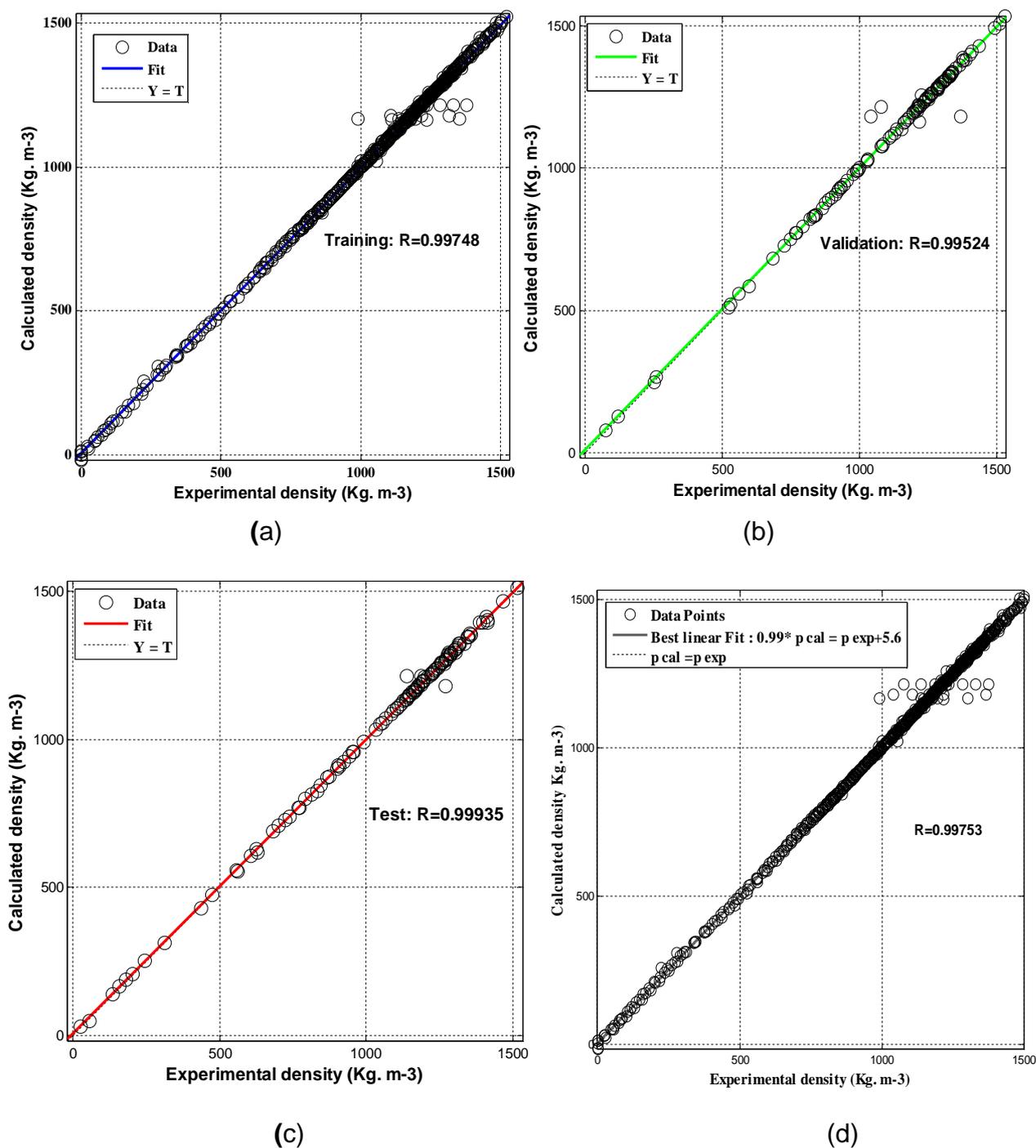


Figure 4.15 : Comparaison entre les valeurs expérimentales et prédites pour l'ensemble des données : (a) apprentissage, (b) validation, (c) test et (d) système global.

Le Tableau 4.14 résume l'analyse statistique, les vecteurs d'accords de validation et les performances du modèle RNA. À partir de ce Tableau, la racine carrée d'erreur moyenne quadratique (RMSE) et l'erreur moyenne quadratique (MSE) se sont révélées égales à 0.0052 et 0.0022 et ce pour l'ensemble des données du modèle optimal.

Tableau 4.14 : Analyses statistiques, vecteurs d'accords de validation et la performance du modèle RNA.

Système	N	RMSE	MSE	AARD%	SSE	R ² _{Cal}
Global	777	0.0022	0.0052	4.0660	0.0034	0.9986

4.3.1.3 Détermination des équations du modèle RNA optimisé

À partir du réseau neuronal artificiel optimisé, nous pouvons exprimer la densité volumique par un modèle mathématique qui incorpore toutes les entrées E_i à l'intérieur comme suit :

- Les sorties de Z_j de la couche cachée :

$$Z_j = f_H\left(\sum_{i=1}^n W_{ji}^I E_i + b_j^H\right) = \frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{24} W_{ji}^I E_i + b_j^H\right) - \exp\left(-\sum_{i=1}^{24} W_{ji}^I E_i + b_j^H\right)}{\exp\left(\sum_{i=1}^{24} W_{ji}^I E_i + b_j^H\right) + \exp\left(-\sum_{i=1}^{24} W_{ji}^I E_i + b_j^H\right)} \quad (4.7)$$

Où $i = 1, 2, \dots, n$, représente le nombre de neurones de la couche d'entrée pour chaque modèle RNA, et $j = 1, 2, \dots, 24$, représente le nombre de neurones dans la couche cachée.

- La sortie la densité volumique :

$$\rho = f_0\left[\sum_{j=1}^9 W_{1j}^H Z_j + b_1^0\right] = \left[\sum_{j=1}^9 W_{1j}^H Z_j + b_1^0\right] \quad (4.8)$$

La combinaison des équations (4.7) et (4.8) conduit à la formule mathématique pour la densité volumique en tenant compte de toutes les entrées E_i :

$$\rho = \left[\sum_{j=1}^9 W_{1j}^H \left[\frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{24} W_{ji}^I E_i + b_j^H\right) - \exp\left(-\sum_{i=1}^{24} W_{ji}^I E_i + b_j^H\right)}{\exp\left(\sum_{i=1}^{24} W_{ji}^I E_i + b_j^H\right) + \exp\left(-\sum_{i=1}^{24} W_{ji}^I E_i + b_j^H\right)} \right] + b_1^0 \right] \quad (4.9)$$

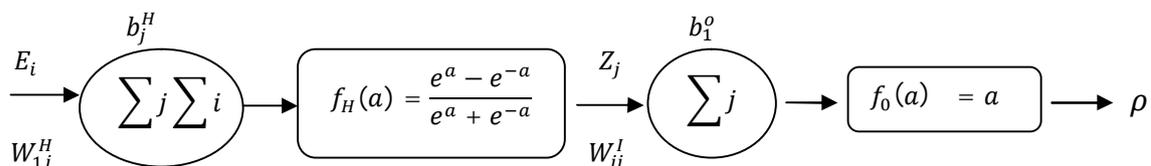


Figure 4.16 : Représentation schématique du RN optimal.

4.3.2 Résultats et procédure de modélisation de l'enthalpie et de l'entropie

Dans cette partie, un réseau de neurone artificiel (RNA) a été développé pour décrire l'enthalpie et l'entropie des fluides frigorigènes (R134a, R410A, R407C). Le réseau de neurone est caractérisé par sa topologie, ses vecteurs de poids et ses fonctions d'activation. Vues les recherches basées sur les réseaux de neurones artificiels, le modèle qui donne une erreur minimale sera choisi.

La Figure 4.17 représente la courbe de performance produite pendant l'apprentissage, la validation et le test du réseau. Cette performance est mesurée en termes de MSE. La ligne converge vers le meilleur MSE possible (une chute constante). Il se trouve qu'après 96 itérations, la performance du modèle ne s'améliore pas et se stabilise à 0.206.

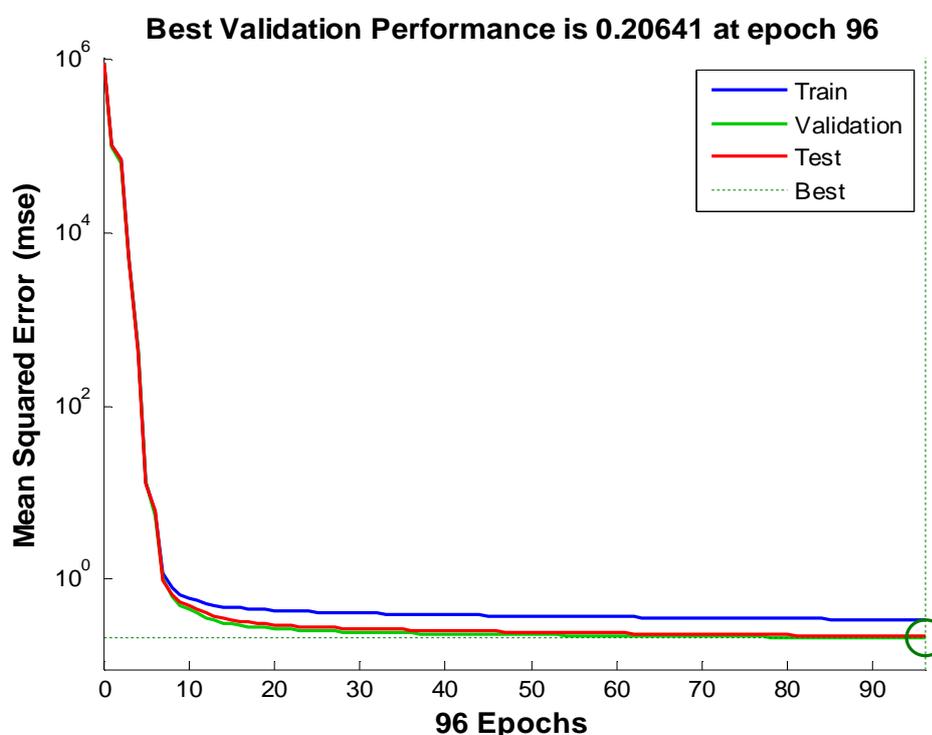


Figure 4.17 : Performance du réseau du modèle optimal.

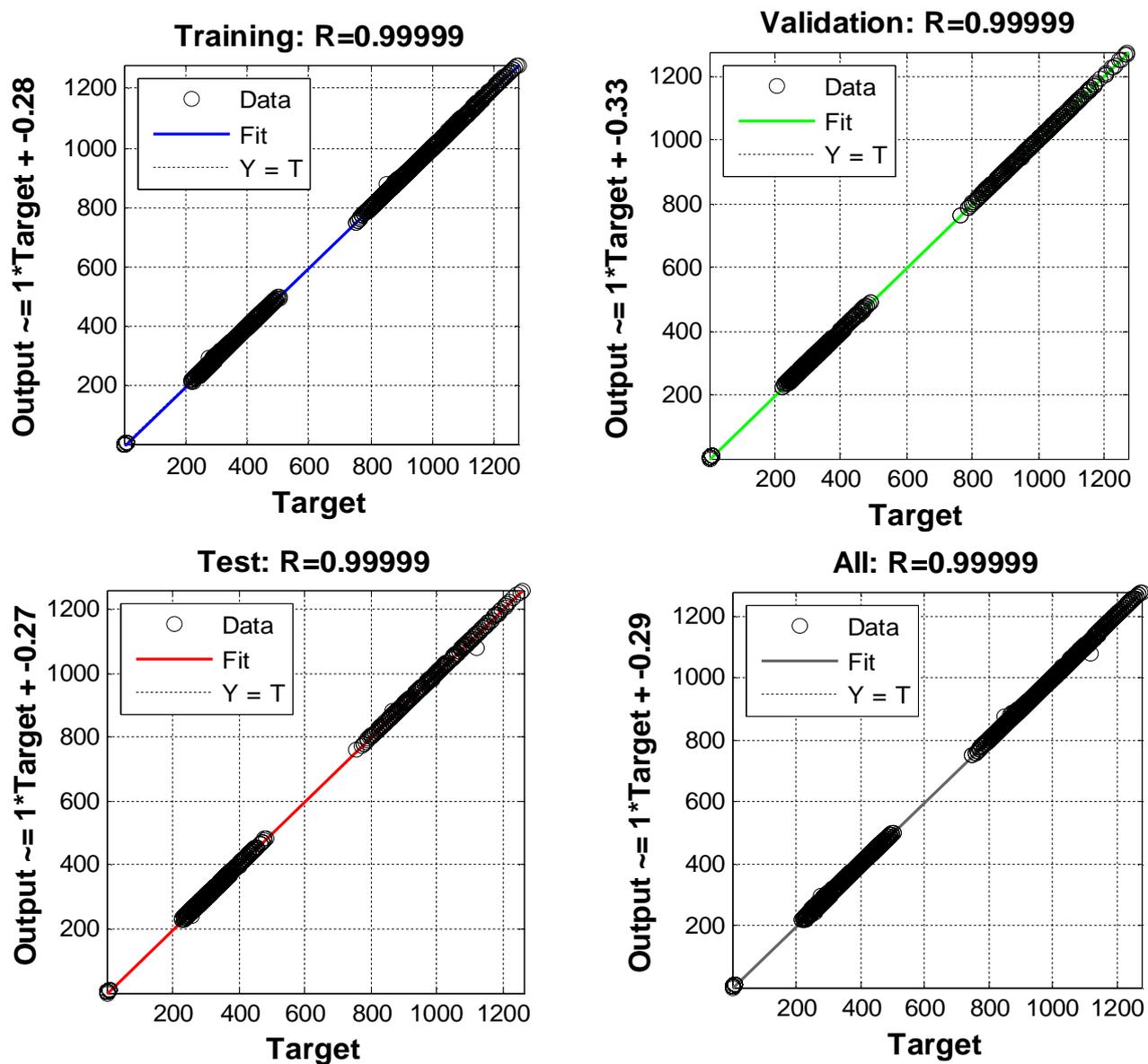


Figure 4.18 : Les courbes de régression linéaire de modélisation de l'enthalpie et de l'entropie.

Results			
	Samples	MSE	R
Training:	5352	2.59843e-1	9.99998e-1
Validation:	1147	4.54802e-2	9.99999e-1
Testing:	1147	9.80378e-2	9.99999e-1

Figure 4.19 : Résumé des résultats obtenus pour les trois phases.

Les Figures 4.18 et 4.19 illustrent les courbes de régression linéaire de l'enthalpie et de l'entropie prédites et un résumé des résultats obtenus pour les trois phases. Pour l'ensemble d'apprentissage, les valeurs des vecteurs de régression se rapprochent des valeurs idéales ($[\alpha, \beta, R] = [1, 0.28, 0.9999]$) avec une erreur quadratique moyenne (MSE) de 26%. Les valeurs obtenues pour l'ensemble de validation sont les suivantes : ($[\alpha, \beta, R] = [1, 0.33, 0.9999]$) avec une MSE de 4.55%.33. Pour l'ensemble de test, on a eu les valeurs suivantes: ($[\alpha, \beta, R] = [1, 0.27, 0.9999]$) avec une MSE de 9.80%. Les coefficients de corrélation sont généralement considérés comme excellents ($0.95 \leq R \leq 1.00$) pour les trois phases ce qui montre une bonne robustesse du modèle neuronal établi.

Les résultats obtenus avec le RN optimal montrent la capacité et la précision du réseau, en donnant des coefficients de corrélations très élevés avec des erreurs très petites (Figure 4.20). Il est clair que la modélisation neuronale appliquée dans cette partie représente une alternative simple, fiable et plus précise.

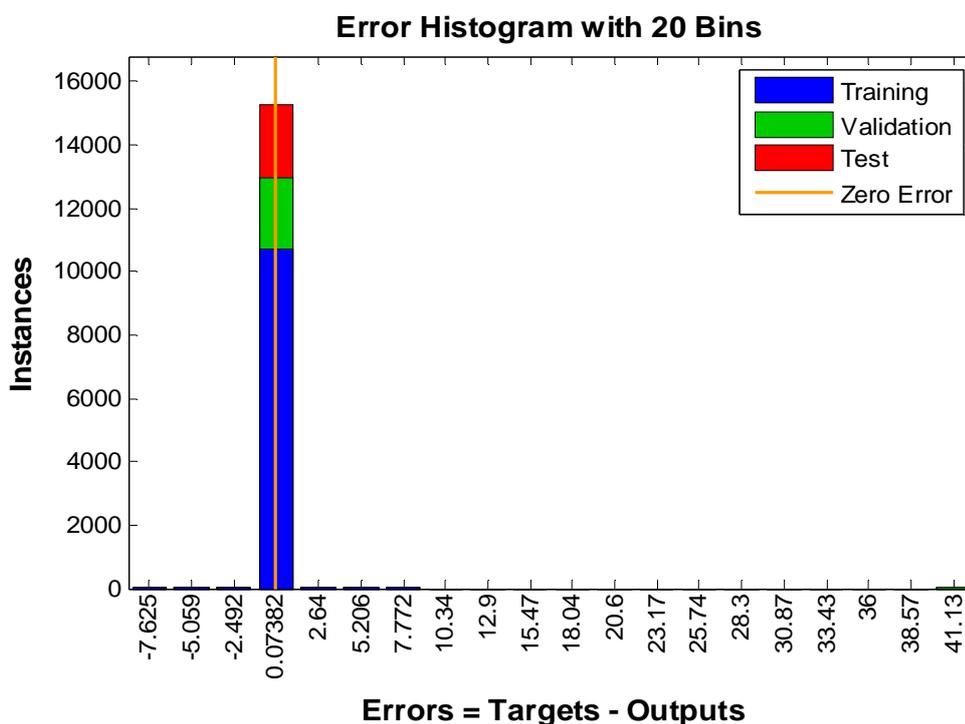


Figure 4.20 : Résidus tracés pour les données.

4.3.2.1 Détermination des équations du modèle de RNA optimisé

Nous pouvons exprimer l'enthalpie et l'entropie par un modèle mathématique qui incorpore toutes les entrées E_i à l'intérieur comme suit :

- Les sorties de Z_j de la couche cachée :

$$Z_j = f_H\left(\sum_{i=1}^n W_{ji}^l E_i + b_j^H\right) = \frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{13} W_{ji}^l E_i + b_j^H\right) - \exp\left(-\sum_{i=1}^{13} W_{ji}^l E_i + b_j^H\right)}{\exp\left(\sum_{i=1}^{13} W_{ji}^l E_i + b_j^H\right) + \exp\left(-\sum_{i=1}^{13} W_{ji}^l E_i + b_j^H\right)} \quad (4.8)$$

Où $i = 1, 2 \dots n$, représente le nombre de neurones de la couche d'entrée pour chaque modèle RNA, et $j = 1, 2, \dots, 13$, représente le nombre de neurones dans la couche cachée.

- La sortie:

$$(H, S) = f_0\left[\sum_{j=1}^9 W_{1j}^H z_j + b_1^0\right] = \left[\sum_{j=1}^9 W_{1j}^H z_j + b_1^0\right] \quad (4.9)$$

La combinaison des équations (4.8) et (4.9) conduit à la formule mathématique pour la sortie (l'enthalpie et l'entropie) en tenant compte de toutes les entrées E_i :

$$(H, S) = \left[\sum_{j=1}^9 W_{2j}^H \left[\frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{15} W_{ji}^l E_i + b_j^H\right) - \exp\left(-\sum_{i=1}^{15} W_{ji}^l E_i + b_j^H\right)}{\exp\left(\sum_{i=1}^{15} W_{ji}^l E_i + b_j^H\right) + \exp\left(-\sum_{i=1}^{15} W_{ji}^l E_i + b_j^H\right)} \right] + b_2^0 \right] \quad (4.10)$$

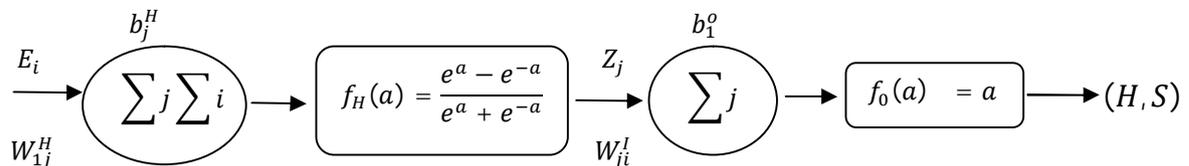


Figure 4.21: Représentation schématique du RN optimal.

4.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les résultats de modélisation neuronale de la conductivité thermique, de la densité volumique et de deux propriétés thermodynamiques (l'enthalpie et l'entropie) des fluides frigorigènes en utilisant MATLAB®2013a. D'après les résultats obtenus, la modélisation neuronale s'avère donc comme une alternative fiable, facile et complémentaire aux méthodes conventionnelles du moins pour les personnes qui n'ont pas de l'expérience dans le choix de la méthode conventionnelle la plus adaptée au problème en main.

Dans la première contribution nous avons présenté les résultats de modélisation neuronale de la conductivité thermique des fluides frigorigènes des trois systèmes (purs, binaires et ternaires) et de leurs mélanges. Le but de la présente étude était de développer trois modèles de réseaux neuronaux de type Feed-forward. La méthodologie adoptée pour la détermination du modèle neuronal optimal est basée sur une recherche par essai et erreur de la topologie du RNA ayant une capacité de généralisation acceptable pour une erreur minimale. Les résultats de prédiction des trois modèles neuronaux optimisés (RN0, RN1 et RN2) ont été comparés entre eux. Cette comparaison montre que le modèle neuronal obtenu RN2 pour les trois systèmes étudiés possède une capacité de prédiction supérieure à celles des modèles RN0 et RN1. Il possède également une très bonne tendance de prédiction d'interpolation et même d'extrapolation.

Dans la deuxième contribution, deux modèles ont été élaborés pour prédire la densité volumique et deux propriétés thermodynamiques. Les modèles ont été développés avec l'algorithme FFBP. Un très bon accord entre les valeurs expérimentales et celles prédites a été observé. Pour les deux modèles optimaux, on constate que les coefficients de régressions pour l'ensemble de données (formation, validation et Test) sont tous supérieurs à 99% : $R=99.7\%$ pour la densité volumique et 99.99% pour l'enthalpie et l'entropie.

En conclusion, les résultats obtenus sont très satisfaisants avec une meilleure robustesse. De plus, Nous tenons à souligner que les modèles pourraient être utilisés pour la prédiction des paramètres étudiés pour de nouveaux fluides frigorigènes.

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Nous avons évoqué dans cette étude l'importance des fluides frigorigènes d'un point de vue économique et social, mais aussi d'un point de vue écologique dans le sens où il est nécessaire de protéger notre planète des effets destructeurs dus aux émissions de ces gaz. La recherche bibliographique entreprise nous a permis de présenter une revue critique de la littérature qui regroupe d'une part l'aspect expérimental et d'autre part l'aspect de la modélisation dans les différentes recherches effectuées.

Notre thèse avait pour objectif de modéliser quelques propriétés thermo physico-chimiques de certains fluides parmi les plus actuellement utilisés dans le domaine du froid et de la climatisation. Il s'agit des fluides frigorigènes : R32, R125, R134a, R152a, R143a et de leurs mélanges binaires et ternaires. Les points des données expérimentales, sous différentes conditions opératoires, ont été tirés à partir de la littérature. Nous nous sommes intéressés à développer des méthodologies basées sur les réseaux de neurones pour la modélisation et ce dans un but de prédiction. Dans divers domaines, la modélisation par les techniques neuronales présente un intérêt accru de nos jours.

La méthodologie adoptée commence par une recherche bibliographique afin de développer un modèle avec une complexité minimale, des performances optimales et un choix des paramètres d'entrées et de sorties. Les propriétés calculées ont donné des résultats encourageants. Dans ce contexte, deux contributions de recherche ont été apportées.

La **première contribution** a porté sur la modélisation de la conductivité thermique utilisant la modélisation par réseau de neurones artificiel RNA. La méthodologie englobe 11 systèmes avec un ensemble de 3227 points de données (BD1) divisés en 1817 points de données pour les systèmes purs, 794 points de données pour les systèmes binaires et 616 points de données pour les systèmes ternaires. Les conclusions tirées à travers cette contribution sont les suivantes :

- L'analyse de sensibilité a révélé que les variables les plus importantes qui influent sur la conductivité thermique sont la température, la masse moléculaire, la température critique, la pression critique, la densité critique et la fraction massique. De plus, la pression peut-être un paramètre forfaitaire possible pour la modélisation de la conductivité thermique.
- La recherche de la topologie du réseau de neurones optimal (RNO) adoptée est la stratégie d'essai et erreur (trial and error), suggérée par plusieurs auteurs comme étant la stratégie la plus raisonnable, avec deux critères d'arrêt : vérification d'une fonction de performance (d'erreur) donnée et la capacité de généralisation du réseau de neurones. Neuf neurones correspondant aux neuf paramètres d'entrées ont été utilisés dans la couche d'entrée, treize neurones dans la couche cachée et un seul dans la couche de sortie. L'algorithme d'apprentissage de back propagation de Levenberg-Marquardt (*Trainlm*) a été appliqué, alors que la fonction de transfert tangent sigmoïde a été utilisée pour la couche cachée et la couche de sortie. Dans le but d'améliorer le RNO et ses performances, les valeurs réduites (la technique de réduction) ont été utilisées pour calculer les propriétés pseudo-critiques (RN1, RN2). Néanmoins, la comparaison entre ces deux modèles montre une amélioration des paramètres statistiques pour le deuxième modèle (RN2).
- Les résultats obtenus par le RN0, RN1 et RN2 présentent respectivement des coefficients de corrélations $R = 0.996$, $R = 0.998$ et $R = 0.997$, ce qui implique une meilleure estimation et montre que le RNA est un outil robuste et le plus approprié pour modéliser la conductivité thermique. Pour chaque modèle neuronal, une bonne concordance entre les valeurs expérimentales et les valeurs prédites a été obtenue (les racines carrées des erreurs quadratiques moyennes pour la base de donnée totale étaient 0.0036 pour RN0, 0.0027 pour RN1 et 0.0035 pour RN2).
- Le test de la prédiction du RNO sur 660 points d'une nouvelle base de donnée (BD2) des réfrigérants nocifs englobant trois systèmes (purs, deux systèmes binaires et un système ternaire) donne des résultats acceptables et satisfaisants pour le système global avec un coefficient de prédiction $R=0.953$ et une racine carrée de l'erreur quadratique moyenne $RMSE= 0.0123$.
- Les résultats de l'évaluation indiquent que le modèle RN2 développé était capable de prédire la conductivité thermique avec un coefficient de

détermination élevée $R^2 = 0.95$ et une racine carrée de l'erreur quadratique moyenne $RMSE = 0.0123$. Les résultats obtenus en appliquant le modèle du réseau neuronal formé aux données de test indiquent que la méthode offre une très bonne capacité de prédiction (prévision) en ce qui concerne non seulement les plages de température et de pression, mais également les types de réfrigérants.

La **seconde contribution** comporte deux parties de modélisation, qui sont basées sur l'utilisation d'un réseau de neurones artificiel pour prédire la densité volumique, l'enthalpie et l'entropie dans un large gamme de températures et de pressions. Nous avons étudié différents systèmes de réfrigération incluant R32, R125, 134a, leurs mélanges binaires et ternaires.

Les conclusions tirées de la première modélisation peuvent être résumées comme suit :

- Un réseau de neurones artificiel de type Feed-forward a été utilisé avec l'application de l'algorithme d'apprentissage de back propagation Levenberg–Marquardt (*Trainlm*). La structure optimale du réseau a été obtenue en utilisant 09 neurones dans la couche d'entrée, 24 neurones dans la couche cachée et 01 neurone dans la couche de sortie. Les fonctions d'activations hyperbolique tangente sigmoïde (*Tangsig*) et linéaire (*Purelin*) ont été utilisées dans les couches cachées et de sortie respectivement.
- Le modèle neuronal développé a donné des valeurs de la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (RMSE) et de l'erreur quadratique moyenne (MSE) de l'ordre de 0.0022 et 0.0052 respectivement pour toute la base des données. Ceci signifie une meilleure estimation entre les points de données expérimentaux et prédits (calculées par le réseau optimal).
- Ces résultats ont été confirmés par la valeur du coefficient de corrélation (R) obtenu qui était de l'ordre de 0,997 pour toute la base de données. Ce coefficient très proche de l'unité montre la grande performance et la robustesse du modèle neuronal optimisé.

Les principales conclusions de la deuxième modélisation appliquée aux propriétés thermodynamiques (l'enthalpie et entropie) sont les suivantes :

- La structure optimale du RNA obtenu en appliquant l'algorithme de Levenberg-Marquardt est de 9 neurones dans la couche d'entrée, 15 neurones dans la couche cachée et deux neurones dans la couche de sortie. Les fonctions d'activation de la couche cachée et celle de sortie sont respectivement la tangente hyperbolique et la fonction linéaire.
- Les résultats obtenus par le réseau de neurone optimal étaient très satisfaisants et présentent un coefficient de corrélation (R) élevé de l'ordre de 0.9999 et une erreur quadratique moyenne (MSE) très petite. La bonne concordance entre les valeurs collectées (générées) et les valeurs prédites confirme que l'approche étudiée a une capacité très élevée à prédire les propriétés thermodynamiques.

A la lumière des résultats obtenus on peut tirer les remarques suivantes :

- Les réseaux de neurones sont des outils statistiques, qui permettent d'ajuster des fonctions non linéaires très générales à des ensembles de points comme toute méthode statistique.
- Les réseaux de neurones fonctionnent comme une boîte noire et les paramètres du réseau (poids et biais) n'ont pas de signification physique. L'application des réseaux neuronaux ne développe pas directement de la théorie de description du système, mais rend faisable la modélisation et la simulation des différents paramètres thermo-physicochimiques des fluides frigorigènes (purs, binaires, ternaires et leurs mélanges).
- La modélisation par réseau de neurones est une méthode qui est basée seulement sur des données expérimentales et/ou semi-expérimentales (dédites des modèles analytiques, empiriques, numériques, etc.), donc la quantité de données influe sur l'exactitude et la robustesse du modèle.
- Les réseaux de neurones peuvent être très robustes et performants même en présence de peu de données expérimentales à condition que ces dernières soient statistiquement bien réparties dans le domaine d'entrée du modèle neuronal.

- Les formules mathématiques extraites des modèles neuronaux peuvent trouver des applications intéressantes dans la prédiction, l'optimisation et même le contrôle des procédés frigorifiques.
- Compte tenu qu'il n'y a pas de règle pour le choix du modèle neuronal pour un problème donné, la stratégie d'essai et erreur devient parfois laborieuse.

Les réseaux de neurones artificiels sont très fiables par rapport aux modèles classiques, vu qu'ils peuvent modéliser plusieurs systèmes à la fois sous plusieurs conditions opératoires. Les perspectives peuvent être envisagées dans le futur concernant plus particulièrement d'autres techniques récentes de modélisation et d'optimisation telles que les systèmes experts, les algorithmes génétiques, la logique floue, (Système d'Inférence Flou Neural Network adaptif 'ANFIS') qui peuvent être utilisés pour prédire d'autres paramètres. Il en est de même pour la méthode de QSAR (Quantitative Structure Activity Relationship) et les machines à vecteurs de support machine (support vector machine, SVM).

APPENDICE A

PROGRAMME MATLAB DE CALCUL DES VALEURS PREDITES

Soit une matrice A de dimension (n, 2). Dans la première colonne sont placées les valeurs d'un paramètre d'entrée (E) et dans la deuxième colonne sont placées les valeurs de paramètre de sortie (S).

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} \end{pmatrix}$$

Le programme a pour but de déterminer la courbe de régression entre les valeurs expérimentales et prédites tout en minimisant l'erreur entre eux utilisant un modèle mathématique donné de deux paramètres. Le programme fait appel au l'algorithme génétique. Les paramètres aa, bb, cc sont respectivement la pente, le point à l'origine et le coefficient de corrélation de la courbe de régression. Le programme s'écrit comme suit :

```
A=xlsread('base.xls')
E=A(a11:an1,1)
S=A(a12: an2,2)
global ydata xdata
xdata=E;
ydata=S
ydata
xdata
plot(xdata,ydata)
xdata=E';
ydata=S';
x=ga(@modellga,2)
[x,resnorm] = lsqcurvefit(@modell,x,xdata,ydata)
Scal=modell(x,xdata)
[aa,bb,cc]=postreg(S',Scal)
```

APPENDICE B

PROGRAMME DE CALCUL DES ERREURS

```

clc
for i=1:N
A1(i)=(pr(i)-exp(i)).^2;
end
RMSE=sqrt(sum(A1)/N);
for i=1:N
A2(i)=(exp(i)-pr(i)).^2;
end
MSE=sum(A2)*(1/N);
for i=1:N
A3(i)=abs(exp(i)-pr(i))/exp(i);
end
AAD=(100/N)*sum(A3);
for i=1:N
A4(i)=((pr(i)-exp(i)).^2);
A5(i)=((exp(i))-((1/N))*sum exp(i)).^2;
end
A6=sum(A4)/sum(A5);
Rcal=1-A6/;
for i=1:N
A7(i)=(exp(i)-pr(i)).^2;
end
SSE=sum(A7);
Error=[RMSE,MSE, AAD,Rcal,SSE]

```

APPENDIC C

LISTE DES SYMBOLES ET DES ABREVIATIONS

Symboles

AAD	Erreur absolue moyenne (Average Absolute Deviation)	
AARD	Erreur relative absolue moyenne (Average Absolute Relative Deviation)	
ANN	Réseau de Neurone Artificiel (Artificial Neural Network)	
ANFIS	Système d'interface neuro-floue adaptatif (adaptive neuro fuzzy interface system)	
<i>B</i>	Biais du réseau de neurones artificiels	
BD	Base de données	
BP	Back propagation	
bt	émission de CO ₂ par kWh d'énergie électrique produite	kg CO ₂ /kWh
de	Taux d'émission annuel	kg /kg
dr	Efficacité de récupération lors de la mise au rebut	kg /kg
E	Consommation journalière d'électricité	KWh / 24 h
FFNN	Réseau de Neurone de Feed-forward Neural Network.	
G	valeur de donnée d'origine	
IR	Importance Relative	
LM	Algorithme de Levenberg-Marquardt	
Logsig	Logarithmique sigmoïde	
mi	charge initiale de fluide frigorigène	kg
MMM	Méthode de normalisation du Minimum et Maximum	
MSDN	Méthode de normalisation Moyenne et l'Ecart Type	

MSE	Erreur Quadratique Moyenne (Mean Square Error)	
N	Nombre de points expérimentaux	
nt	Durée de vie de l'installation	an
P	Pression	MPa
Purelin	Fonction d'activation linéaire	
QSAR	Relations Quantitatives Structure-Activité (Quantitative Structure Activity Relationship)	
R	Coefficient de corrélation	
R ²	Coefficient de détermination	
Réf	Référence	
RMSE	Racine Carrée de l'Erreur Quadratique Moyenne (Root Mean Square Error)	
RN	Réseau de Neurone	
RNA	Réseau de Neurone Artificiel	
RNFF	Réseau de neurones de type Feed-forward	
SSE	Somme des Erreurs Quadratiques	
STD	Standard déviation	
T	Température	K
Tangsig	Hyperbolique tangent sigmoïde	
tt	nombre de jours de fonctionnement annuel	jours/an
W	Poids du réseau de neurones artificiels (weights)	
X	Variable d'entrée	
Y	Variable de sortie	

Lettres Grecques

f	Fonction d'activation	
α	Pente de la droite du meilleur ajustement linéaire	
β	Point à l'origine de la droite du meilleur ajustement linéaire	
ρ	Densité volumique	Kg.m ⁻³
k	Conductivité thermique	W. m ⁻¹ .K ⁻¹

<i>H</i>	Enthalpie	Kj/Kg
<i>S</i>	Entropie	Kj/Kg.K

Indice et exposants

<i>i</i>	Couche d'entrée (Input)
<i>c</i>	Critique
Cal	Calculée
exp	Expérimentale
<i>h</i>	Couche cachée (Hidden)
Max	Maximum
Mean	Moyenne
Min	Minimum
<i>O</i>	Couche de sortie (Output)
<i>P_c</i>	Pseudo-critique
<i>i</i>	Réfrigérant <i>i</i>
<i>j</i>	Réfrigérant <i>j</i>
<i>k</i>	Réfrigérant <i>k</i>
<i>r</i>	Réduite

Abréviations

ASHRAE	American Society of Heating Refrigerating and Air Conditioning Engineers
CFC	Chloro Fluoro Carbone
GWP	Global Warming Potential (Pouvoir de Réchauffement h)
HC	HydroCarbone
HCFC	Hydro chlorofluorocarbures
HFC	HydroFluoro Carbone
ISO	International standard organization
ODP	Ozone Depletion Potential (potentiel d'appauvrissement de la couche d'ozone)
R	Réfrigérant
SACO	Substances d'appauvrissant la couche d'ozone
TEWI	Total Equivalent Warming Impact (Effet de serre équivalent total)
UV	Ultraviolet

REFERENCES

1. Manuel de formation des agents des douanes protection de la couche d'ozone: Élimination progressive des SACO dans les pays en développement 2001, Publication des Nations Unies ISBN 92-807, (1998).
2. Ferry,D.,"Ozone stratosphérique", (<http://www.crmcn.univ-mrs.fr>).
3. Jancovici, J. M., "L'avenir climatique: quel temps ferons-nous?", ISBN: 2020512351, Editions du Seuil, Mars (2005).
4. Venkatarathnam, G., Srinivasa Murthy, S., "Refrigerants for vapour compression refrigeration systems", Resonance, V.17, (2012), 139-162.
5. Meunier, F., Colbourne, D., "Les fluides frigorigènes, composé halogénés et fluide", Revue Pratique du Froid, ISBN:9782100587797, (2014).
6. Galland, J.M., "Chlorofluoroalcanes" Techniques de l'Ingénieur, traité Génie des procédés" Doc, J 6 225.
7. Bertrand, A., "La production de froid dans le milieu agro-alimentaire, industriel et tertiaire, Impacts environnementaux et applications techniques", les cahiers de la production propre publiés par Centre de Ressources des Technologies pour l'Environnement, (Février 2006), 1-100.
8. Derghout, Z., "Investigation du cycle de réfrigération a ejecto-compression et des application dans le froid, le chaude et l'énergie", Mémoire de Magister en Génie Climatique, Université Mentouri Constantine, (2007).
9. Récupération des fluides dans tous les secteurs du froid et de la climatisation, Commande du Ministère de l'Aménagement du Territoire et de l'Environnement 89/99, Version; n°2, (Mars 2000).
10. Clodic, D., Chang, Y. S., Pougin, A. M., "Evaluation des fluides frigorigènes à faible GWP, pour le froid domestique et commercial, les transports réfrigérés et la climatisation automobile", Lettre de Commande du Ministère de l'Environnement, Centre d'Energétique de l'Ecole des Mines de Paris, (Mai 1999).
11. Clodic, D., "Récupération des fluides dans tous les secteurs du froid et de la climatisation", Commande du Ministère de l'Aménagement du Territoire et de l'Environnement 89/99, Version; n°2, Centre d'Energétique de l'Ecole des Mines de Paris, (Mars 2000).

12. Vink, Tim. G. A., "Evolution Récentes des réglementations relatives aux fluorocarbures", European Seminars February, (2002).
13. Didon, D. A., "The role of refrigerant mixtures", Bulletin of IIR N=94-3, (January 1994).
14. Palandre, L., Nassif, P., Mercier, F., Clodic, D., "Inventaire 1999 et prévision à 15 ans de l'ensemble des fluides frigorigènes", Rapport final, Centre d'Energétique de l'Ecole des Mines de Paris, (Avril 2001).
15. Dumas, C., "La disparition du HCFC-22 et la recherche du réfrigérant idéal", La Maîtrise de l'Energie, Conférence ASHRAE, Chapitre de Montréal (Mars 2003).
16. Vidal, J., "Thermodynamique-Application au génie chimique et à l'industrie pétrolière", Edition Technip, ISBN: 9782710807155 (1997).
17. Van Wylen, G. J., Sontag, R. E., Detrochers, P., "Thermodynamique Appliquée", Edition du Renouveau, (1992).
18. Abbot, M. N., Van Ness, H. C., "Théorie et applications de la thermodynamique", Mc Graw Hill, (1984), 149.
19. Belhachemi, B., "Etude des équilibres", OPU, (1992).
20. Trott, A. R., Welch, T., "Refrigeration and Air-Conditioning", Third Edition, Butterworth-Heinemann, ISBN: 9780750642194, (Décembre 1999).
21. ASHRAE Handbook, American society of heating, refrigerating and air conditioning engineers, Inc., Atlanta; McGraw-Hill, New York, (1993).
22. Clodic, M., "Journées Techniques", Ecole des Mines de Paris, (1999).
23. Clodic, D., Chang, Y.S., Pougin A.M., "Evaluation des fluides frigorigènes à faible GWP pour le froid domestique et commercial, les transports réfrigérés et la climatisation automobile", (Mai 1999).
24. Thermodynamic properties of fluids, CE304, Spring, Lecture 12: Part 2: Residual properties and how to get them, (2003).
25. J-Pierre, C., "Thermodynamiques Chimiques", Techniques de l'ingénieur, Traité des Procédés, J1026, 1-3.
26. Volumetric Properties of pure fluids, CE304, Spring, Lecture 6 Part 4, (2003).
27. Barret, M., Candau, Y., Marioton, C., balaesque, J.P., "La modélisation thermodynamique des fluides frigorigènes", Revue Générale du Froid, (Décembre 1989), 691.

28. Jacquard, P., Sandre, S., Rapin, P., "La pratique et la formulation du froid", 2ème édition + 12ème édition, Edition du Dunod (Décembre 1998).
29. Raffinage Thermodynamique des Fluides Réels, OPU (1998), 199-200.
30. Badr, O., Probert, D., Ocallaghan, P. W., "Chlorofluorocarbons and the environment", Scientific, Economic, Social and Political issues. Applied Energy, n °37, (1990), 247-327.
31. Duminil, M., "Les fluides frigorigènes actuels, leurs actions sur l'environnement, les fluides de substitution", Journée d'étude de la société française de thermiciens, Paris, (22 Janvier 1992), 18.
32. Vink. Tim G.A., "Evolutions récentes de la réglementation relative aux fluorocarbures", European Seminars (February 2002).
33. Perkins, R, A., Huber, M, L., Assael, M. J., "Measurement and Correlation of the Thermal Conductivity of trans-1-Chloro-3,3,3-trifluoropropene (R1233zd(E))", Journal of Chemical Engineering Data, doi: 10.1021/acs.jced.7b00106, V.62, (2017), 2659-2665.
34. Perkins, R, A., Huber, M, L., "Measurement and Correlation of the Thermal Conductivity of 1,1,1,2,2,4,5,5,5-Nonafluoro-4-(trifluoromethyl)-3-pentanone", Journal of Chemical Engineering Data, doi: 10.1021/acs.jced.8b00132, (2018), A-G.
35. Alam, M. J., Islam, M. A., Kariya, K., Miyara, A., "Measurement of thermal conductivity and correlations at saturated state of refrigerant trans-1-chloro-3,3,3-trifluoropropene(R-1233zd(E))", International Journal of Refrigeration, doi:10.1016/j.ijrefrig.2018.02. 004, (2018).
36. Huber, L., M, Aesecke, A. Perkins, R., A., "Model for the Viscosity and Thermal Conductivity of Refrigerants, Including a New Correlation for the Viscosity of R134a", Industrial and Engineering Chemistry Research doi: 10.1021, /ie0300880, V.42, (2003), 3163-3178.
37. Yata, J., Ueda, Y. Hori, M., "Equations for the thermal conductivity of R-32, R-125, R-134a, and R-143a", International Journal of Thermophysics. V.26, (2005), 1423-1435.
38. Shi, L., Liu, X. J., Wang, X., Zhu, M. S., "Prediction method for liquid thermal conductivity of refrigerant mixtures", Fluid Phase Equilibria, V. 172, (2000), 293–306.
39. Focke, W.W., "Correlating thermal conductivity data for ternary liquid mixtures", International Journal of Thermophysics, V. 29, (2008), 1342–1360.

40. He, M.G., Liu, Z.G., Yin, J.M., "New equation of state for transport properties: Calculation for the thermal conductivity and the viscosity of halogenated hydrocarbon refrigerants", *Fluid Phase Equilibria*, V. 201, (2002), 309–320.
41. Assael, M.J., Dalaouti, N.K., Gialou, K. E., "Viscosity and thermal conductivity of methane, ethane and propane halogenated refrigerants", *Fluid Phase Equilibria*, V.174, (2000), 203–211.
42. Scalabrin, G., Piazza, L., Grigante, M., Baruzzo, M., "Thermal conductivity modeling of refrigerant mixtures in a three-parameter corresponding states format", *International Journal of Thermophysics*, V. 26, (2005), 399-412.
43. Huber, M.L., Friend, D.G., Ely, J.F., "Prediction of the thermal conductivity of refrigerants and refrigerant mixtures", *Fluid Phase Equilibria*, V.80, (1992), 249-261.
44. Sami, S.M., Comeau, J.D., "Study of viscosity and thermal conductivity effects on condensation characteristics of some new alternative refrigerant mixtures", *International Journal of Energy Research*, V. 27, (2003), 63–77.
45. Hosseinejad, T., Behnejad, H., "Viscosity and thermal conductivity of some refrigerants at moderate and high densities on the basis of rainwater friend theory and the corresponding states principle", *Fluid Phase Equilibria*, doi: 10.1016/j.fluid.2007.09.024, V.263, (2008), 85–95.
46. Geller, V., Shimchuk, N., Plokhotnyuk, M., "Transport Properties for Refrigerant Mixtures", *Odessa National Academy of Food Technologies*. 149, (2014).
47. Huber, M. L., Assael, M. J., "Correlations for the viscosity of 2, 3, 3, 3-tetrafluoroprop-1-ene (R1234yf) and trans-1, 3, 3, 3-tetrafluoropropene (R1234ze (E))", *International Journal of Refrigeration*, doi: 10.1016 /j. ijrefrig. 2016.08.007, V.71, (2016), 39–45.
48. Perkins, R. A., Huber, M., Assael, J. M., "Measurements of the thermal conductivity of 1, 1, 1, 3, 3-Pentafluoropropane (R245fa) and correlations for the viscosity and thermal conductivity surfaces", *Journal of Chemical Engineering Data*, doi:10.1021/acs.jced.6b00350, V.61, (2016), 3286–3294.
49. Sencan, A., Kose, I., Selbas, R., "Prediction of thermophysical properties of mixed refrigerants using Artificial neural network", *Energy Conversion Management*, doi: 10.1016/j.enconman.2010.08.024, V.52, (2011), 958–974.

50. Arcaklioglu, E., Cavusoglu, A., Erisen, A., "Thermodynamic analyses of refrigerant mixtures using artificial neural networks", *Applied Energy*, doi: 10.1016/j.apenergy.2003.08.001, V.78, (2004), 219–230.
51. Cristofoli, G., Piazza, L., Scalabrin, G., "A viscosity equation of state for R134a through a multi-layer feed-forward neural network technique", *Fluid Phase Equilibria*, doi: 10.1016/S0378-3812(02)00004-3 V.199, (2002), 223–236.
52. Ghaderi, F., AGhaderi, H., Najafi, B., Ghaderi, N., "Viscosity prediction by computational method and artificial neural network approach: the case of six refrigerants", *Journal Supercritical Fluids*, doi: 10.1016/j.supflu.2013.04.017, V.81, (2013), 67–78.
53. Sahin, A. S., Kose, I., Selbas, R., "Comparative analysis of neural network and neuro-fuzzy system for thermodynamic properties of refrigerants", *Applications Artificial Intelligence*, doi: 10.1080/08839 514. 2012. 701427, V.26, (2012), 662–672.
54. Sozen,A., Ozalp, M ., Arcaklioglu, E.,"Calculation for the thermodynamic properties of an alternative refrigerant (R508b)", *Applied Thermal Energy*, doi:10.1016/j.applthermaleng.2006.06.003, V.27, (2007), 551-559.
55. Sozen,A., Arcaklioglu, E., Menlik,T., Ozalp, M.," Determination of thermodynamic properties of an alternative refrigerant (R407c) using artificial neural network", *Expert Systems with Applications*, doi: 10.1016 /j. eswa.2008.05.02 3, V.36, (2009), 4349-4356.
56. Sozen, A., Arcaklioglu, E., Menlik, T., "Derivation of empirical equations for thermodynamic properties of ozone safe refrigerant (R404a) using artificial neural network", *Expert Systems with Applications*, doi: 10.1016/j.eswa. 2009.06.016, V.37, (2010), 1158–1168.
57. Sencan, A., Ilkeose, I., Selbas,R.,"Prediction of thermophysical properties of mixed refrigerants using artificial neural network", *Energy Conversion and Management*, doi:10.1016/j.enconman.2010.08.024, V.52, (2011), 958-974.
58. Zhi, L.H., Hu, P., Chen, L.X., Zhao, G.,"Viscosity prediction for six pure refrigerants using different artificial neural networks", *International Journal of Refrigeration*, doi:org/10.1016/j.ijrefrig.2018.02.011, V.88, (2018), 432-440.
58. Morar, J.E., Perez T, C., Gonzalez N, F.F.," Thermodynamic properties of refrigerants using artificial neural networks", *International Journal of Refrigeration*, doi: org/10.1016/j.ijrefrig.2014.07.007, V.46, (2014), 9-16.

59. Mohebbi, A., Taheri, M., Soltani, A., "A neural network for predicting saturated liquid density using genetic algorithm for pure and mixed refrigerants", *International Journal of Refrigeration*, doi: 10.1016 /j. ijrefrig. 2008.04.008, V.31, (2008), 1317-1327.
60. Moosavi, M., Sedghamiz, E., Abareshi, M., "Liquid density prediction of five different classes of refrigerant systems (HCFCs, HFCs, HFEs, PFAs and PFAAs) using the artificial neural network-group contribution method", *International Journal of Refrigeration*, doi.org/10.1016/j. ijrefrig.2014.09.007 ,V.48, (2014) 188-200.
61. Zhi, L.H., Hu, P., Chen, L.X., Zhao, G., "Viscosity prediction for six pure refrigerants using different artificial neural networks", *International Journal of Refrigeration*, doi.org/10.1016/j.ijrefrig.2018.02.011, V.88, (2018), 432-440.
62. Pierantozzi, M., Petrucci, G., " Modeling thermal conductivity in refrigerants through neural networks", *Fluid Phase Equilibria*, doi.org/10.1 016/j.fluid. 2017. 12.027, V. 460, (2018), 36-44.
63. Mylona, S, K., Hughes, T., J. Saeed, A., A. Rowland, D. Park, J.Tsuji, T. Tanaka, Y. Seiki, Y., May, E. F., "Thermal conductivity data for refrigerant mixtures containing R1234yf and R1234ze(E)", *Journal of Chemical Thermodynamics*, doi:org/10.1016/j.jct.2019.01.028, V.133,(2019),135-142
64. Parizeau, M., "Reseaux de Neurones", GIF-21140 et GIF-64326, (2006).
65. Ayadi H., Bouaoun B., "Système d'aide à la détection de maladies sur image médicale basé sur les réseaux de neurones", *Mémoire d'ingénieur, Ecole Nationale Supérieure d'informatique (Alger)*, (2008).
66. Ademeyer F., Jacob M., JAY G., Menguy J.P., "La conversion bioénergétique du rayonnement solaire et biotechnologies", *Technique et Documentation Lavoisier*, V.5, (1982) ,313.
67. Ghribi, A., Chlrndi, M., "Modeling of fixed bed adsorption: Application of the adsorption of orange dye". *Asian Journal of Textile*, V.4, (2011), 161-171.
68. Laidi, M., "Etude et modélisation d'un réfrigérateur solaire", *Thèse de Doctorat, Université de Médéa, Algérie*, (2013).
69. Haykin, S., "Neural networks - A comprehensive foundation", *Macmillan College publishing company, New York*, ISBN:978-0-02-352761-6, (1994).
70. Mcculloch, W. S., Pitts, W. A., "Logical calculus of the ideas immanent in nervous activity", *Bulletin of Mathematical Biophysics*, V.5, (1943), 115-133.

71. Lippmann, R., "An Introduction to computing with neural nets", IEEE ASSP Magazine, V.4, (1987). 4-22.
72. Hornik, K., Stinchcombe, M., White, H. and Auer, P. "Degree of approximation results for FeedForward networks approximating unknown mappings and their derivatives", Neural computation, V. 6, (1994), 1262-1275.
73. Si-Moussa, C., "Modélisation des équilibres de phases à pression élevées par les réseaux de neurones artificiels", Thèse de doctorat en génie chimique, Ecole Nationale Polytechnique, El-Harrach, Alger, (2010).
74. Lee D. S., Park J. M., "Neural network modeling for on-line estimation of nutrient dynamics in a sequentially-operated batch reactor", Journal of Biotechnology, V.75, (1999), 229-239.
75. Silva R. G., Cruz A. J. G., Hokka C. O., Giordano R. L. C., Giordano R. C., "A hybrid Feed-forward neural network model for the cephalosporin production process", Brazilian Journal of Chemical Engineering ,V. 17,(2000), 587-598.
76. Si-Moussa, C., Hanini, S., Derriche, R., Bouhedda, M., Bouzidi, A., "Prediction of high-pressure vapor liquid equilibrium of six binary systems, carbon dioxide with six esters, using an artificial neural network model", Brazilian Journal of Chemical Engineering ,V. 25, (2008),183 -199.
77. Bart, K., "Neural network and fuzzy systems: A dynamical systems approach to machine intelligence", Englewood Cliffs N. J. Prentice Hall, New Delhi, (1994).
78. Hagan, T., Demuth, H. B., Beale, M. H., "Neural network design", USA, Boston, (1996).
79. Laidi, M., Hanini, S., "Optimal solar COP prediction of a solar-assisted adsorption refrigeration system working with activated carbon/methanol as working pairs using direct and inverse artificial neural network", International Journal of Refrigeration, V.36, (2013), 247-257.
80. Gross, U., Song, Y. W., "Thermal conductivities of new refrigerants R125 and R32 Measured by the Transient Hot-Wire method", International Journal of Thermophysics, V.17, (1996), 607-619.
81. Le Neindre, B., Garrabos, Y., "Measurements of the thermal conductivity of HFC-134a in the temperature range from 300 to 530 K and at pressures up to 50 MPa", International Journal of Thermophysics ,V.20, (1999),1379-1401.

82. Tsvetkov, O. B., Laptev, Yu. A., Asambaev, A. G., "Thermal conductivity of refrigerants R123, R134a, and R125 at low temperatures", *International Journal of Thermophysics*, V.15, (1994), 203-214.
83. Tanaka, Y., Nakata, M., Makita, T., "Thermal conductivity of gaseous HFC-134a, HFC-143a, HCFC-141b, and HCFC-142b", *International Journal Thermophysics*, V.12, (1991), 949-963.
84. Lavrenchenko, G. K., Ruvinskij, G. Ya., Iljushenko, S. V., Kanaev, V. V., "Thermophysical properties of refrigerant R134a", *International Journal of Refrigeration*, V.15, (1992), 386-392.
85. Perkins, R.A., Laesecke, A., Nieto Castrob, C.A., "Polarized transient hot wire thermal conductivity measurements", *Fluid Phase Equilibria*, V. 80, (1992), 275-286.
86. Gross, U., Song, Y. W., Hahne, E., "Thermal conductivity of the new refrigerants R134a, R152a, and R123 measured by the Transient Hot-Wire method", *International Journal of Thermophysics*, V.13, (1992), 957-983.
87. Laeseck, A., Perkin, R.A., Nieto Castro, C.A., "Thermal conductivity of R134a", *Fluid Phase Equilibria*, V.80, (1992), 263-274.
88. Yamamoto, R., Matsuo, S., Tanaka, Y., "Thermal conductivity of halogenated ethanes, HFC-134a, HCFC-123, and HCFC-141h", *International Journal of Thermophysics*, V.14, (1993), 79-90.
89. Assael, M. J., Karagiannidis, E., "Measurements of the thermal conductivity of R22, R123, and R134a in the temperature range 250-340 K at pressures up to 30 MPa", *International Journal of Thermophysics*, V.14, (1993), 183-197.
90. Hammerschmidt, U., "Thermal conductivity of a wide range of alternative refrigerants measured with an improved guarded Hot-Plate Apparatus", *International Journal of Thermophysics*, V.16, (1995), 1203-1211.
91. Ro, S. T., Kim, J. Y., Kim, D. S., "Thermal conductivity of R32 and Its mixture with R134a", *International Journal of Thermophysics*, V.16, (1995), 1193-1201.
92. Gurova, A. N., Mardolcar, U. V., Nieto Castro, C. A., "The thermal conductivity of Liquid 1,1,1,2-Tetrafluoroethane (HFC 134a)", *International Journal of Thermophysics*, V.18, (1997), 1077-1087.
93. Jeong, S. U., Kim, M. S., Ro, S. T., "Liquid thermal conductivity of binary mixtures of pentafluoroethane (R125) and 1,1,1,2-tetrafluoroethane (R134a)", *International Journal of Thermophysics*, V.20, (1999), 55-62.

94. Baginsky, A.V., Shipitsyna, A.S., "Thermal conductivity and thermal diffusivity of the R134a refrigerant in the liquid state", *Thermophysics and Aeromechanics*, V.16, (2009), 267-273.
95. Tanaka, Y., Matsuo, S., Taya, S., "Gaseous thermal conductivity of difluoromethane (HFC-32), pentafluoroethane (HFC-125), and their mixtures" *International Journal of Thermophysics*", V.16, (1995), 121-131.
96. Assael, M. J., Karagiannidis, L., "Measurements of the thermal conductivity of liquid R32, R124, R125, and R141b", *International Journal of Thermophysics*, V.16, (1995), 851-865.
97. Tsvetkov, O. B., Kletski, A. V., Laptev, Yu. A., Asambaev, A. J., Zausaev, I. A., "Thermal conductivity and PVT measurements of Pentafluoroethane (refrigerant HFC-125)", *International Journal of Thermophysics*, V.16,(1995),1185-1192.
98. Gross, U., Song, Y. W., "Thermal conductivities of new refrigerants R125 and R32 Measured by the Transient Hot-Wire method", *International Journal of Thermophysics*, V. 17, (1996), 607-619.
99. Ro, S. T., Kim, M. S., Jeong, S. U., "Liquid thermal conductivity of binary mixtures of difluoromethane (R32) and pentafluoroethane (R125)", *International Journal of Thermophysics*, V.18, (1997), 991-999.
100. Gross, U., Song, Y. W., "Thermal conductivities of new refrigerants R125 and R32 Measured by the Transient Hot-Wire method", *International Journal of Thermophysics*, V.17, (1996), 607-619.
101. Kim, S. H., Kim, D. S., Kim, M. S., Ro, S. T., "The thermal conductivity of R22, R142b, R152a, and their mixtures in the liquid State", *International Journal of Thermophysics*, V.14, (1993), 937-950.
102. Tsvetkov, O. B., Laptev, Yu. A., Asambaev, A. G., "The thermal conductivity of binary mixtures of liquid R22 with R142b and R152a at low temperatures", *International Journal of Thermophysics*, V.17, (1996), 597-606.
103. Gurova, A. N., Mardolcar, U. V., Nieto Castro, C. A., "Thermal conductivity of 1,1-difluoroethane (HFC-152a)", *International Journal of Thermophysics*, V. 20, (1999),63-72.
104. Lee, S.H., Kim, M.S., Ro S.T., "Thermal conductivity of 1, 1, 1-trifluoroethane (R143a) and R404A in the liquid phase", *Journal Chemical Engineering*, V. 46, (2001), 1013-1015.

105. Gao, X., Nagasaka, Y., Nagashima, A., "Thermal conductivity of binary refrigerant mixtures of HFC-32/125 and HFC-32/134a in the liquid phase", *International Journal of Thermophysics*, V. 20, (1999), 1403-1415.
106. Geller, V. Z., Nemzer, B. V., Cheremnykh, U. V., "Thermal conductivity of the refrigerant mixtures R404A, R407C, R410A, and R507A", *International Journal of Thermophysics*, V.22, (2001), 1035-1043.
107. Baginsky, A.V., Shipitsiyna, A.S., "Thermal conductivity of liquid R507 refrigerant", *Thermophysics and Aeromechanics*, V. 15, (2008), 291-295.
108. Verba, O. I., Raschektaeva, E. P., Stankus, S. V., "Experimental study of thermal conductivity of refrigerant R-409A in vapor phase*", *Thermophysics and Aeromechanics*, V. 18, (2011) ,661-664.
109. Gao, X., Nagasaka, Y., Nagashima, A., "Thermal conductivity of ternary refrigerant mixtures of HFC-32/125/134a in the liquid phase", *International Journal of Thermophysics*, V. 20, (1999), 1417-1424.
110. Jeong, S. U., Kim, M. S., Ro, S. T., "Liquid thermal conductivity of ternary mixtures of difluoromethane (R32), pentafluoroethane (R125), and 1,1,1,2-tetrafluoroethane (R134a)", *International Journal of Thermophysics*, V.21, (2000), 319-328.
111. Verba, O. I., Raschektaeva, E. P., Stankus, S. V., "Experimental study of thermal conductivity of the R407C refrigerant in the vapor phase", *High Temperature*, V.50, (2012), 200–203.
112. Verba, O. I., "Thermal conductivity of gaseous refrigerant R 404A*", *Thermophysics and Aeromechanics*, V.14, (2007), 165-168.
113. Baginsky, A.V., Shipitsiyna, A. S., "Thermal conductivity of liquid refrigerant R404A*", *Thermophysics and Aeromechanics*, V.14, (2007), 165-168.
114. Garson, G. D., "Interpreting neural-network connection weights", *Artificial Intelligence Expert*, V.6 (4), (1991), 46-51.
115. Goh, A. T. C., "Back-propagation neural networks for modeling complex systems", *Artificial Intelligence in Engineering*, V.3, (1995), 143-151.
116. Gevrey, M., Dimopoulos I., Lek, S., "Review and comparison of methods to study the contribution of variables in artificial neural network models", *Ecological Modelling*, V. 160, (2003), 249-264.
117. Khaouane, L., "Étude et modélisation de la biosynthèse des antibiotiques à partir de différentes souches productrices - cas de pleuromutiline", *Thèse de doctorat de l'université de Médéa, Algérie*, (2013).

118. Makita, T., Tanaka, Y., Morimoto, Y., Noguchi, M., Kubota, H., "Thermal conductivity of gaseous Fluorocarbon refrigerants R12, R13, R 22, and R23, under pressure", *International Journal of Thermophysics*, V. 2, (1981), 249-268.
119. Verba, O. I., Raschektaeva, E. P., Stankus, S. V., "Thermal conductivity of refrigerant R-415A in the vapor phase", *Thermophysics and Aeromechanics*, V. 20,(2013), 477-479.
120. Verba, O. I., Raschektaeva, E. P., Stankus, S. V., "Experimental study of thermal conductivity of refrigerant R-409A in vapor phase*", *Thermophysics and Aeromechanics*, V. 18, (2011), 661-664.
121. Zohuri, B., McDaniel, P., "Thermodynamics in nuclear power plant systems", 1st edn, (CRC Press, New York, (2013).
122. Potter, M.C., Somerton, C.W., "Thermodynamics for engineers", 2nd edn, McGraw-Hill Schuam's Outlines Series, (2006).
123. Dreyfus, G., Martinez, J. M., Samuelides, M., Gordon, M. B., Badran, F., Thiria, S., Hérault, L., "Réseaux de neurones: Méthodologie et applications", Éditions Eyrolles, Paris, (2002).
124. Ghalem, N., Hanini, S., Naceur, M. W., Laidi, M., Amrane, A., "Prediction of Thermal Conductivity of Liquid and Vapor Refrigerants for Pure and their Binary, Ternary Mixtures using Artificial Neural Network", *Thermophysics and Aeromechanics*, V. 26(4), (2019), 547-565

LISTE DES PUBLICATIONS

Article de journal

- N. Ghalem, S. Hanini, M. W. Naceur, M. Laidi, A. Amrane., " Prediction of Thermal Conductivity of Liquid and Vapor Refrigerants for Pure and their Binary, Ternary Mixtures using Artificial Neural Network", Thermophysics and Aeromechanics , V. 26, (2019), 547-565.

Communications Internationales

- Naima Ghalem, Salah Hanini, Maamar Laidi et Abdeltif Amrane "Prediction of Thermal Conductivity of pure Refrigerants using Artificial Neural Network", International Workshop on Silica Raw Material for energetic (WISE, Février 2017), Alger.
- Naima Ghalem, Salah Hanini, Maamar Laidi et Abdeltif Amrane "Modélisation de la conductivité thermique des fluides frigorigènes binaires utilisant les réseaux de neurones artificiels", 3ème Conférence Internationale de Mécanique (I.C.M, Avril 2017), Université de Annaba.
- Naima Ghalem, Salah Hanini, Maamar Laidi et Abdeltif Amrane "Artificial Neural Network Prediction for liquid thermal conductivity of R32, R125, R134a refrigerants and their Binary mixtures", International Symposium on Materials Chemistry (ISYMC, Mars 2018), Université de Boumerdes.

Communications nationales

- Naima Ghalem, Salah Hanini, Maamar Laidi et Abdeltif Amrane "Modeling of Thermal Conductivity for Binary and their Ternary Mixtures Refrigerants using Artificial Neural Network", Séminaire national de Génie des Procédés (SNGP, Novembre 2018), Université de Blida.