ACI NIM CHROMALGEMA

Un problème inverse en chromatographie

ACI NIM CHROMALGEMA

Un problème inverse en chromatographie

François James, Emmanuel Le Guirriec (MAPMO)
Marie Postel (LJLL, Paris 6)
Marc Schœnauer (Projet TAO, INRIA-Futurs)

Chromatographie

Outil d'analyse et de séparation des mélanges.

Chromatographie

Outil d'analyse et de séparation des mélanges.

Analyse : pétroles, parfums, œnologie

Chromatographie

Outil d'analyse et de séparation des mélanges.

Analyse : faibles quantités de produits : phénomènes diffusifs et linéaires

Chromatographie

Outil d'analyse et de séparation des mélanges.

Analyse : faibles quantités de produits : phénomènes diffusifs et linéaires

Séparation : production en pharmacie, parfumerie, arômes alimentaires...

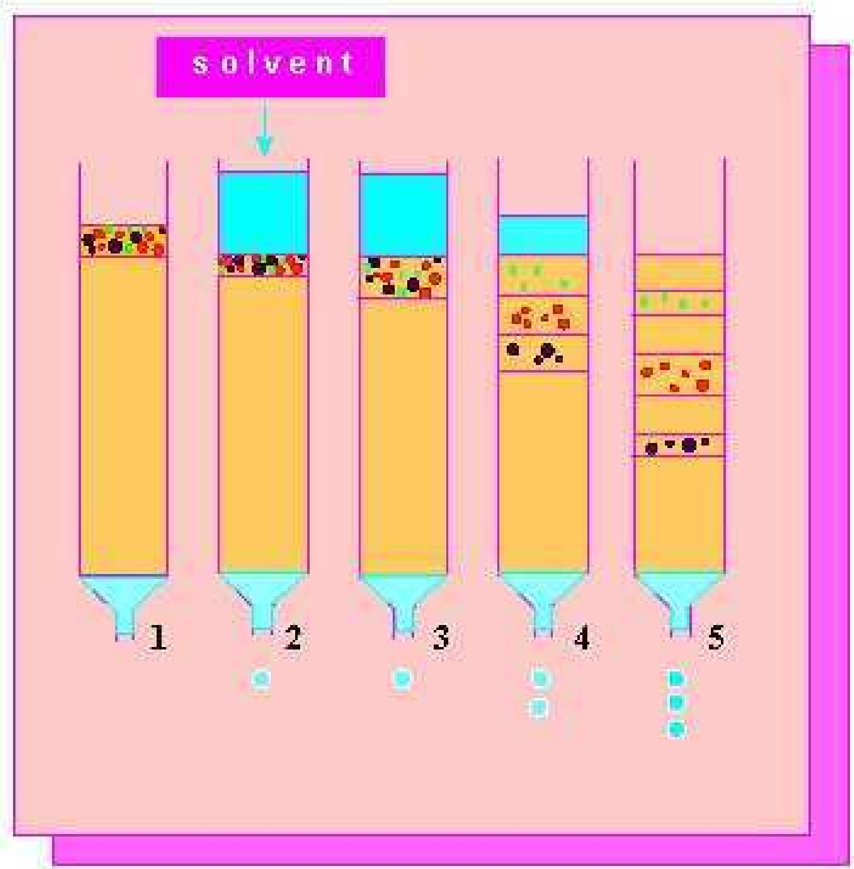
Chromatographie

Outil d'analyse et de séparation des mélanges.

Analyse : faibles quantités de produits : phénomènes diffusifs et linéaires

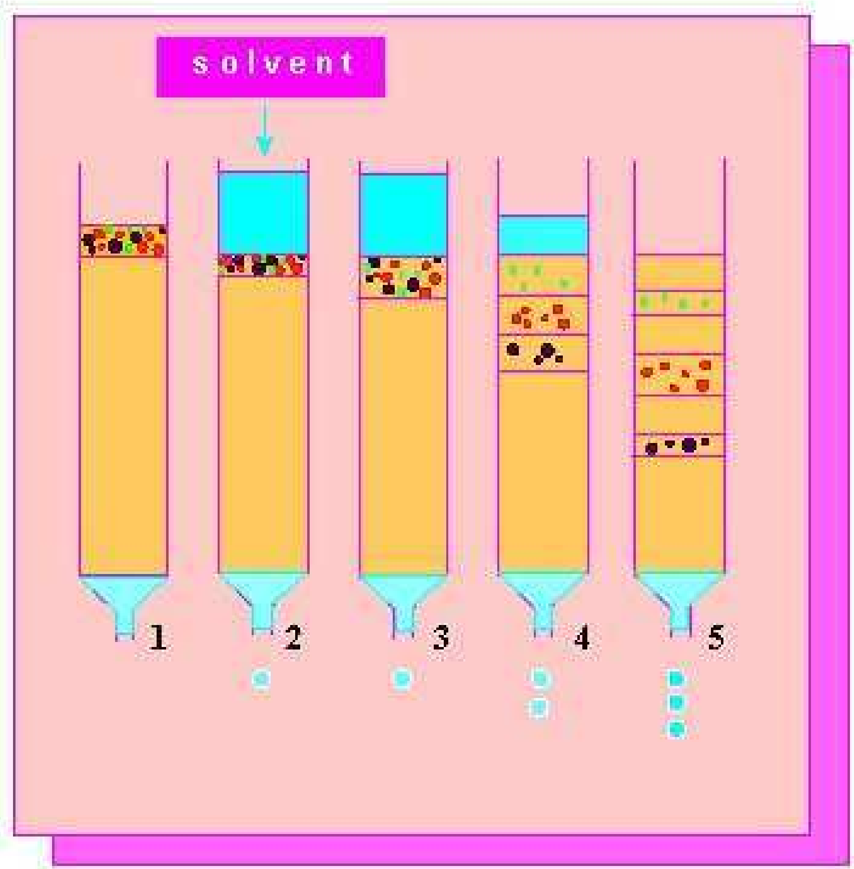
Séparation : quantités importantes, phénomènes non diffusifs et non linéaires

Principes



Interactions sélectives
phase mobile
phase stationnaire

Principes

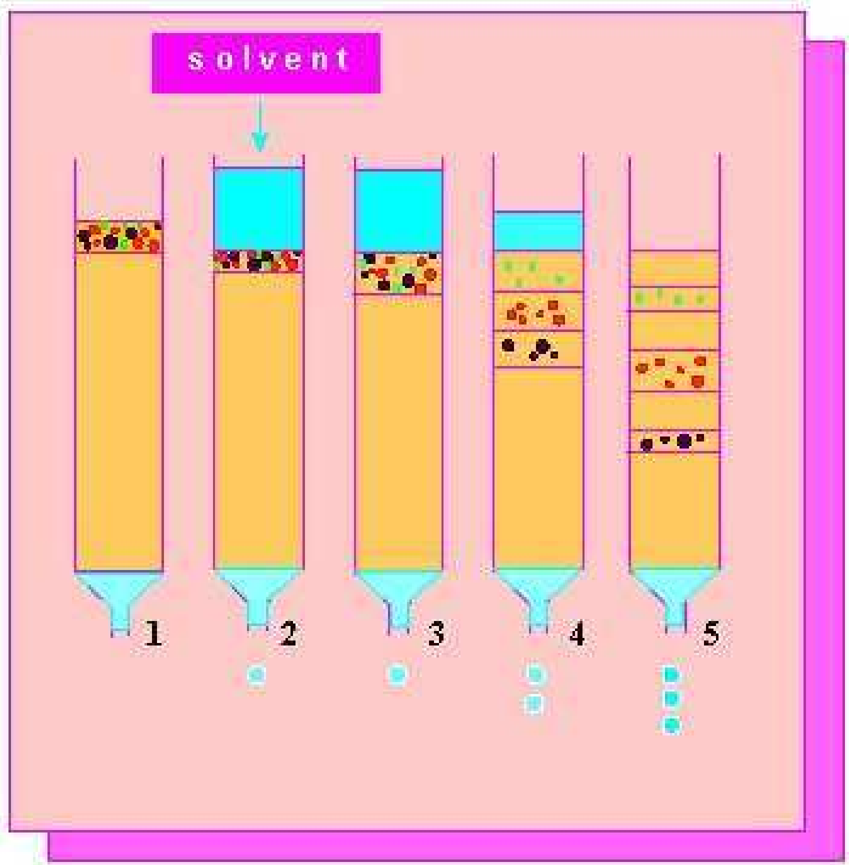


Interactions sélectives
phase mobile
phase stationnaire

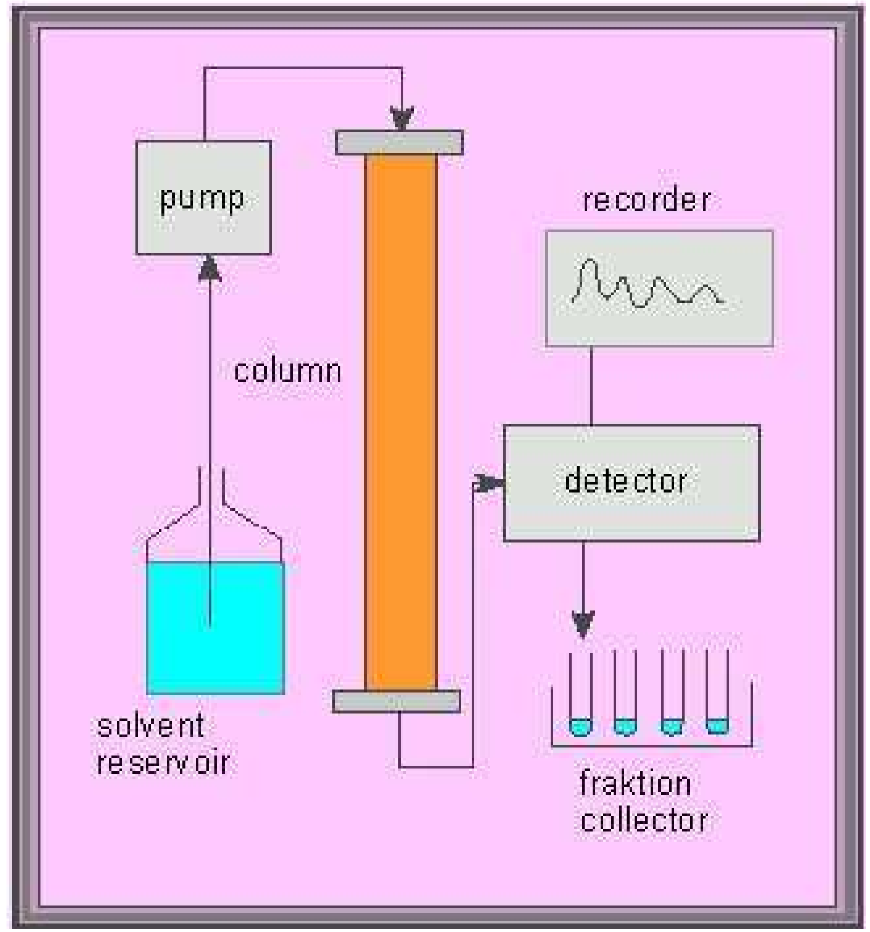
Fonction non
linéaire d'équilibre :

Isotherme ℍ

Principes

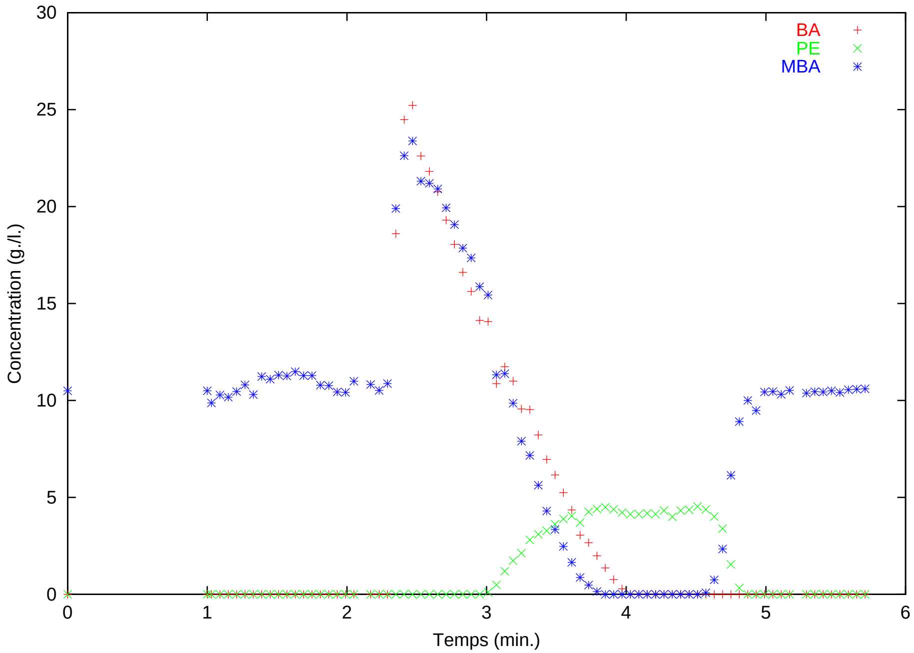


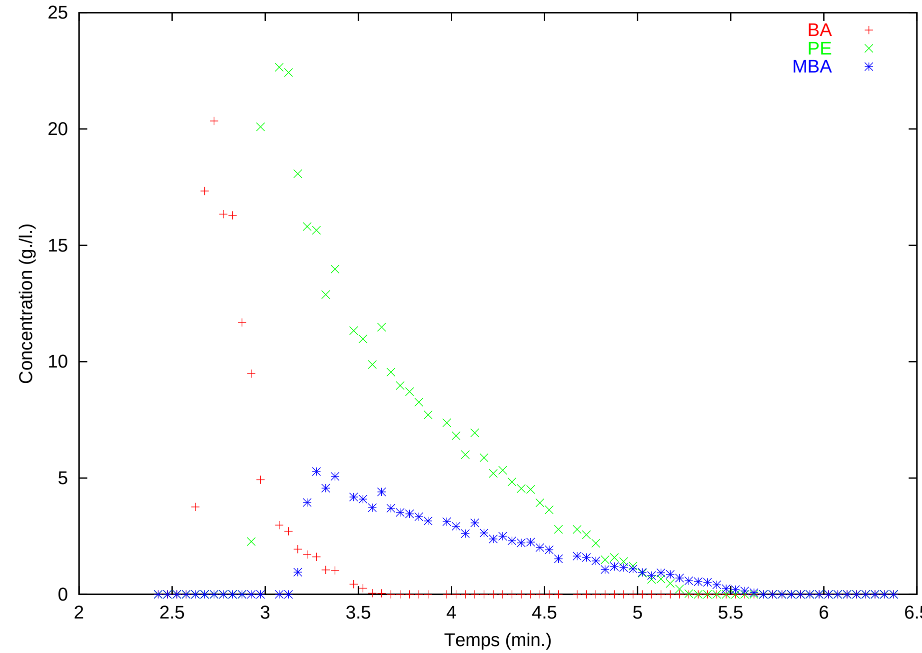
solvent
1
2
3
4
5



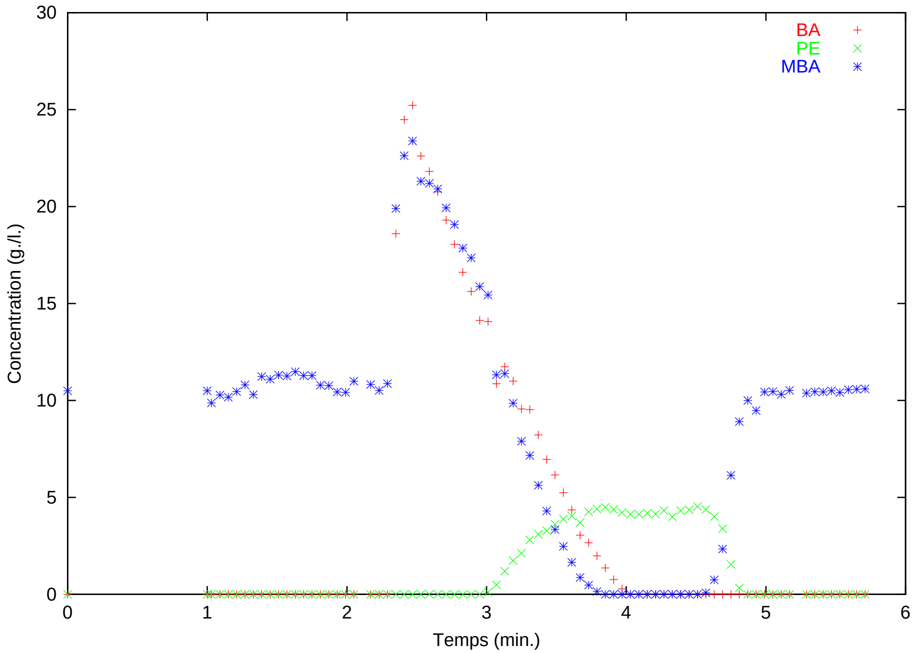
pump
recorder
column
detector
solvent
reservoir
fraktion
collector

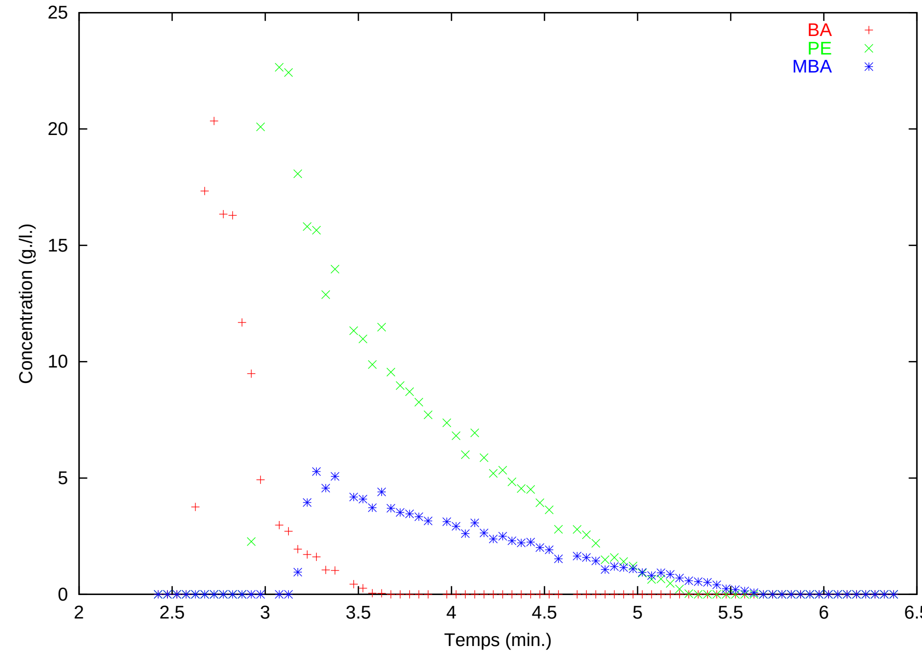
Chromatogrammes





Chromatogrammes

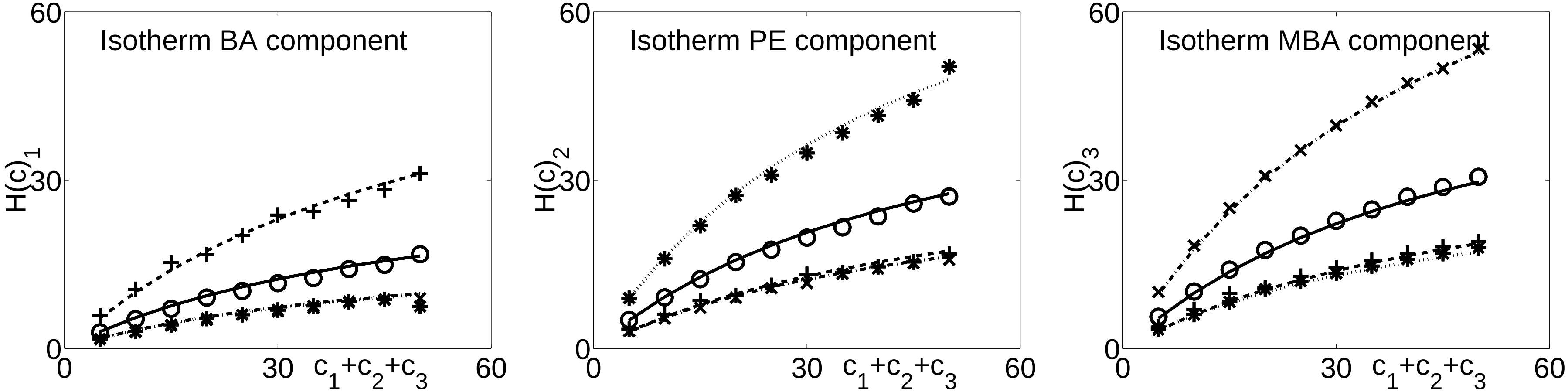




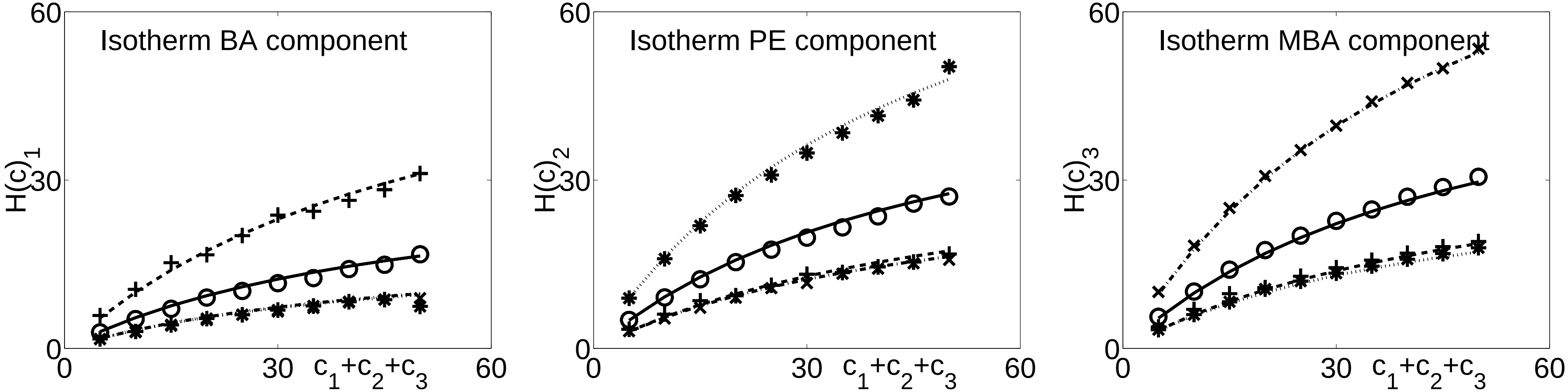
Quiñones, Ford, Guiochon (2000)

3 corps (BA, PE, MBA), 2 ensembles d’observations

Mesures d'isothermes



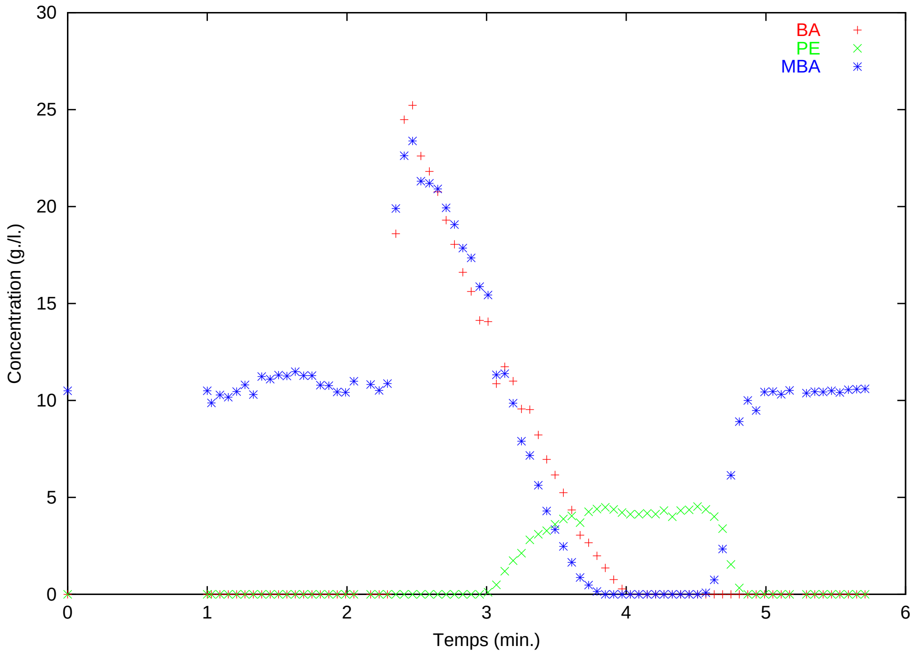
Mesures d'isothermes

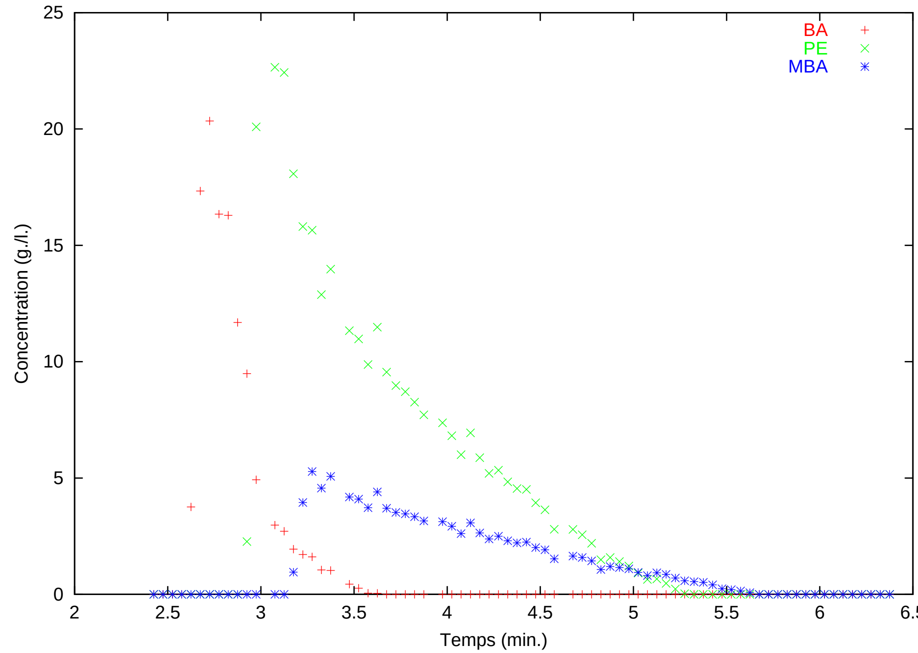


Isotherme de Langmuir modifié :

$$H_i(c) = Q_{s,i} \frac{K_i c_i}{1 + \sum_j K_j c_j}, \qquad i \in \{BA, PE, MBA\}$$

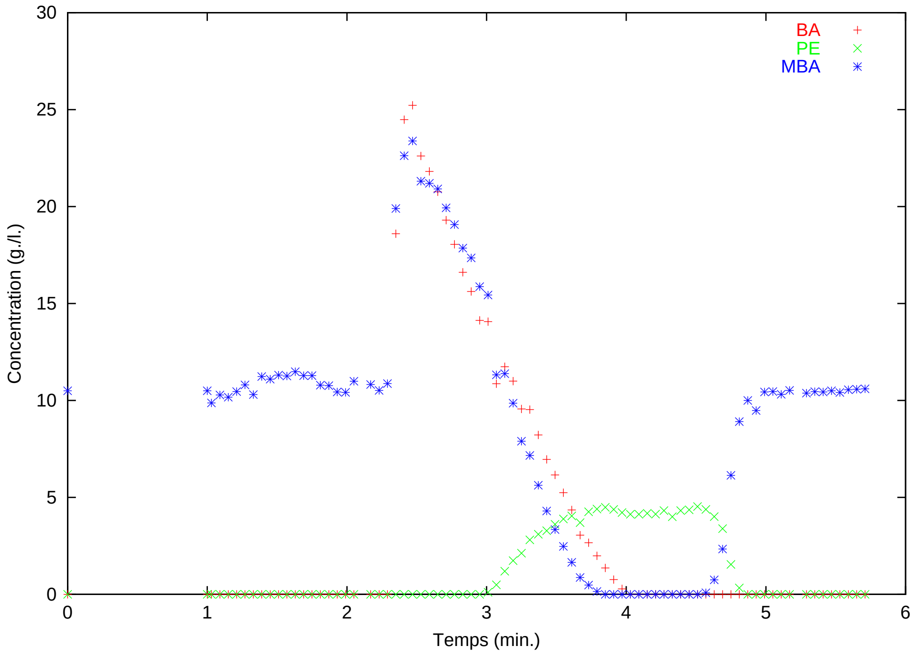
Chromatogrammes

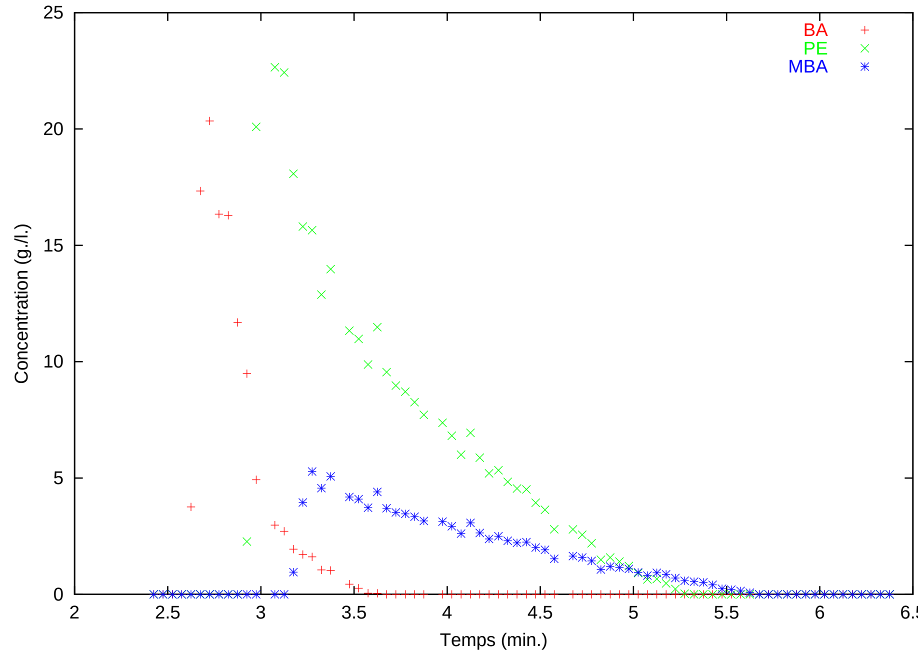




$$\mathbf{c}^{\text{obs}}(t)$$

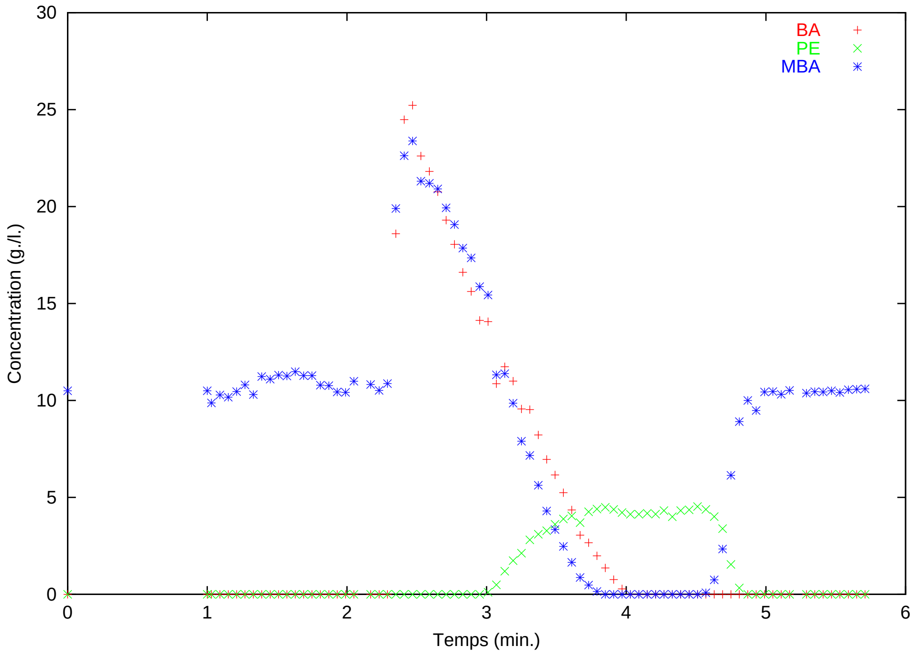
Chromatogrammes

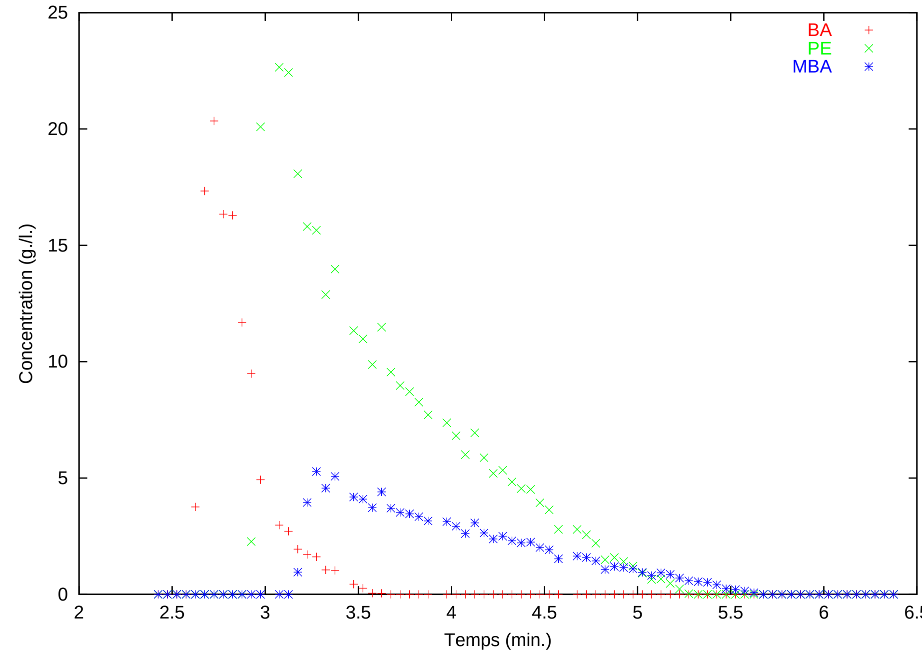




$$\mathbf{c}^{\mathrm{obs}}(t) \sim \mathbf{c}[\mathbf{H}](t, L)$$

Chromatogrammes





$$\inf_{\mathbf{H}\in\mathcal{H}} \int |\mathbf{c}^{\mathrm{obs}}(t) - \mathbf{c}[\mathbf{H}](t,L)|^2 \, dt$$

Simulation

$\mathbf{c}[\mathbf{H}]$ désigne la solution de

$$\partial_t(\mathbf{c} + \mathbf{H}(\mathbf{c})) + \partial_x(u\mathbf{c}) = 0$$

état initial $\quad \mathbf{c}[\mathbf{H}](0,x)$ donné

injection $\quad \mathbf{c}[\mathbf{H}](t,0)$ donné

- Système hyperbolique de lois de conservations

Simulation

$\mathbf{c}[\mathbf{H}]$ désigne la solution de

$$\partial_t(\mathbf{c} + \mathbf{H}(\mathbf{c})) + \partial_x(u\mathbf{c}) = 0$$

état initial	$\mathbf{c}[\mathbf{H}](0, x)$ donné
injection	$\mathbf{c}[\mathbf{H}](t, 0)$ donné

- Système hyperbolique de lois de conservations
- Solutions non régulières

Simulation

$\mathbf{c}[\mathbf{H}]$ désigne la solution de

$$\partial_t(\mathbf{c} + \mathbf{H}(\mathbf{c})) + \partial_x(u\mathbf{c}) = 0$$

état initial $\quad \mathbf{c}[\mathbf{H}](0, x)$ donné

injection $\quad \mathbf{c}[\mathbf{H}](t, 0)$ donné

- Système hyperbolique de lois de conservations
- Solutions non régulières
- Unicité, stabilité,...

Simulation

$\mathbf{c}[\mathbf{H}]$ désigne la solution de

$$\partial_t(\mathbf{c} + \mathbf{H}(\mathbf{c})) + \partial_x(u\mathbf{c}) = 0$$

état initial $\mathbf{c}[\mathbf{H}](0, x)$ donné

injection $\mathbf{c}[\mathbf{H}](t, 0)$ donné

- Système hyperbolique de lois de conservations
- Solutions non régulières
- Unicité, stabilité,...

Mais moins cher à simuler

Simulation

$\mathbf{c}[\mathbf{H}]$ désigne la solution de

$$\partial_t(\mathbf{c} + \mathbf{H}(\mathbf{c})) + \partial_x(u\mathbf{c}) = 0$$

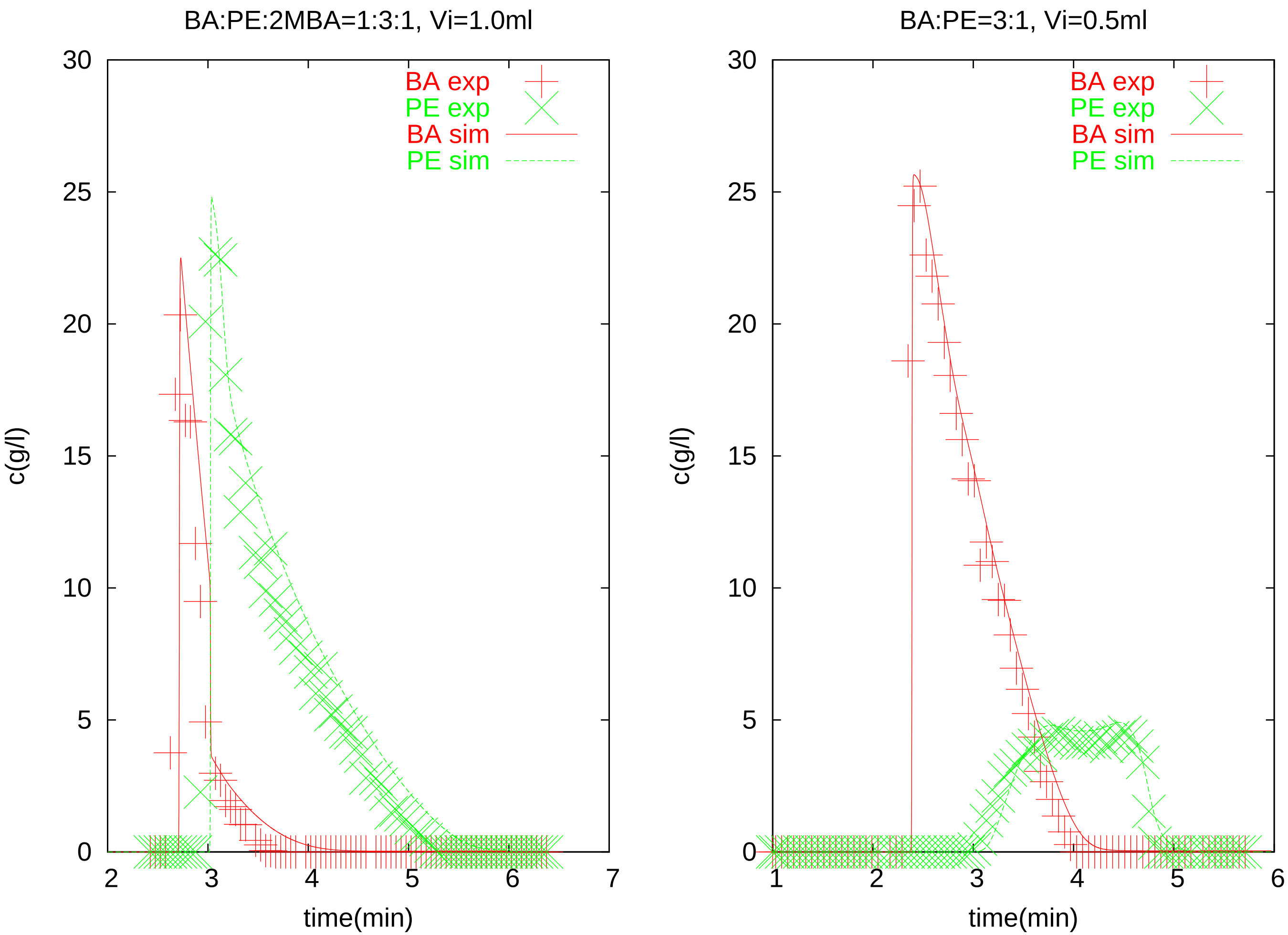
état initial	$\mathbf{c}[\mathbf{H}](0, x)$ donné
injection	$\mathbf{c}[\mathbf{H}](t, 0)$ donné

- Système hyperbolique de lois de conservations
- Solutions non régulières
- Unicité, stabilité,...

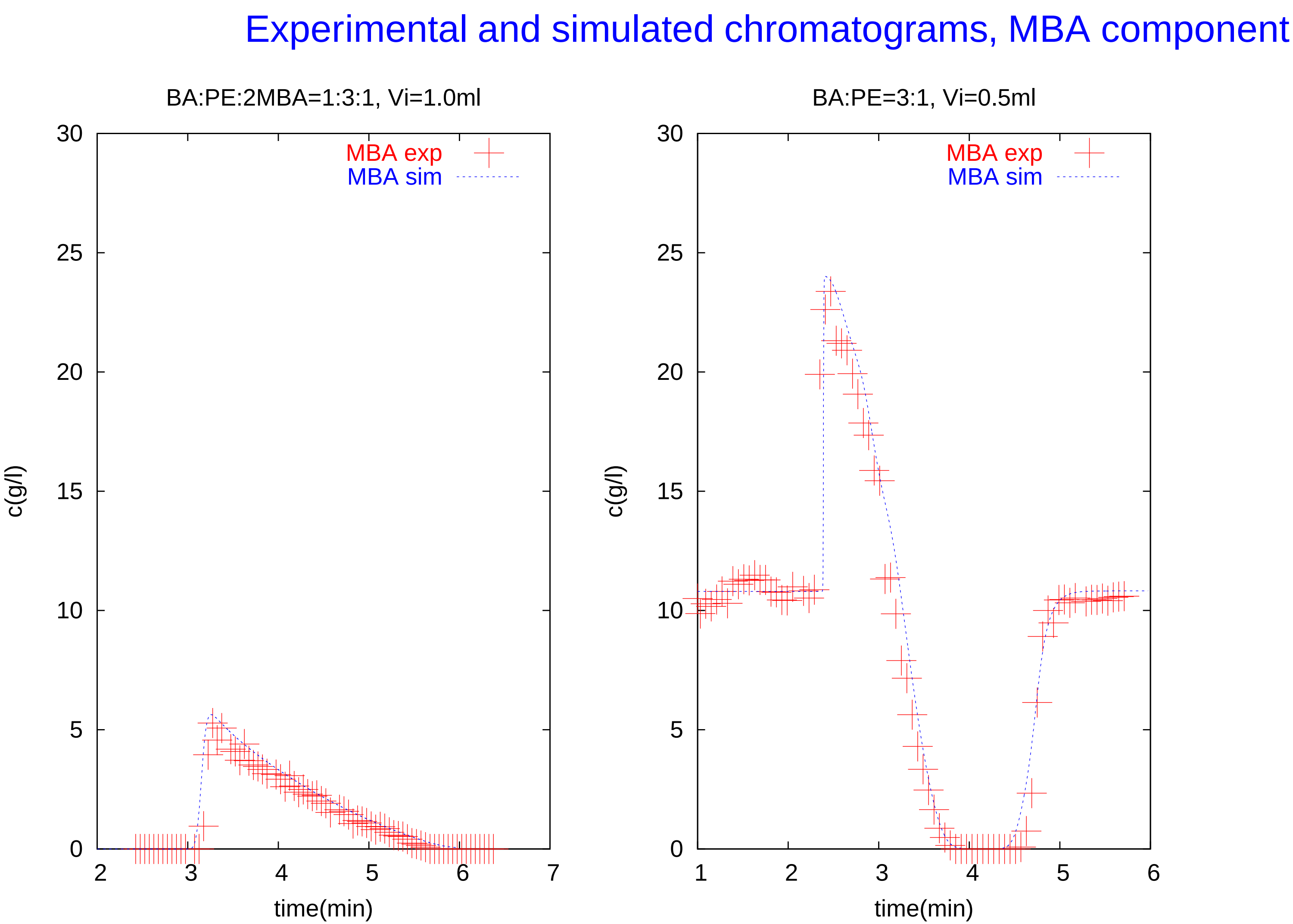
Mais moins cher à simuler et physiquement pertinent

Identification sur chromatogrammes

Experimental and simulated chromatograms, BA and PE components

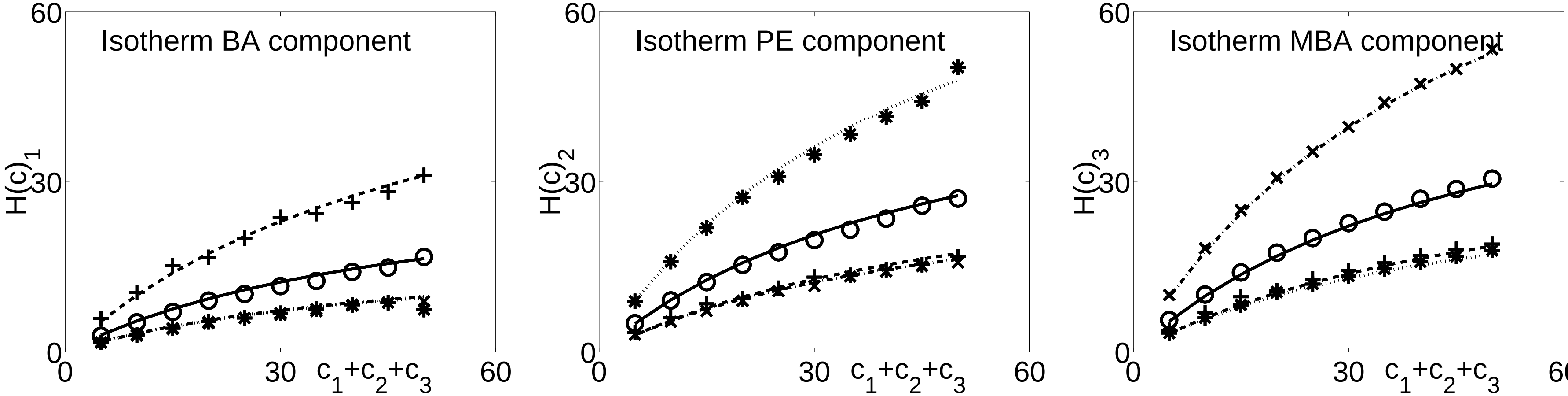


Identification sur chromatogrammes

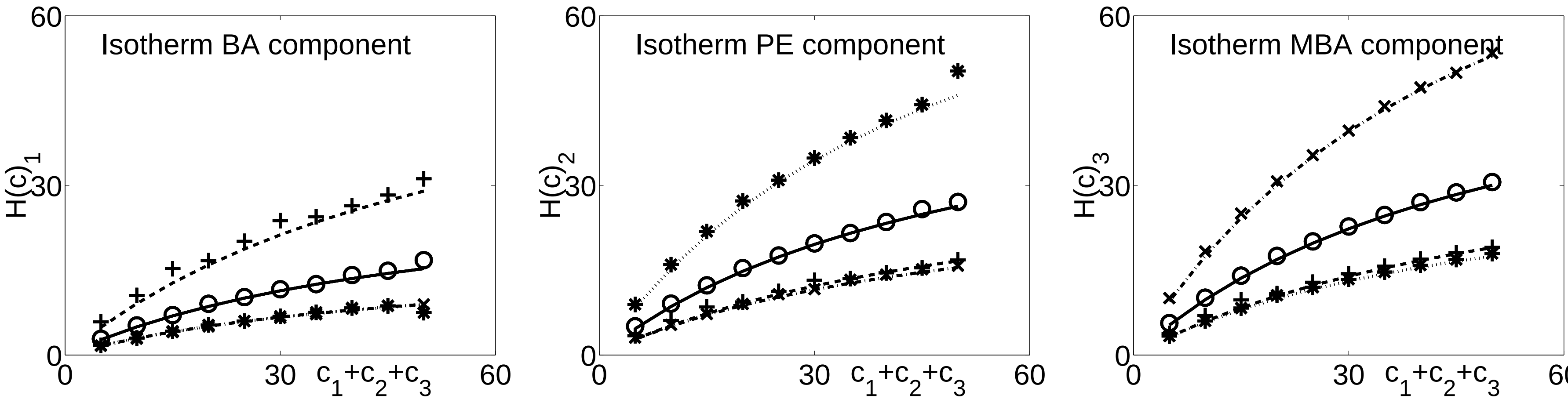


Isothermes

Isothermes identifiés sur FA



Isothermes identifiés sur chromatogrammes



Optimisation

Directe :

$$J(\mathbf{H}) = \int |\mathbf{c}^{\mathrm{obs}}(t) - \mathbf{c}[\mathbf{H}](t, L)|^2 \, dt$$

Optimisation

Directe :

$$J(\mathbf{H}) = \int |\mathbf{c}^{\text{obs}}(t) - \mathbf{c}[\mathbf{H}](t, L)|^2 \, dt$$

Sous contrainte :

$$\tilde{J}(\mathbf{c}) = \int |\mathbf{c}^{\text{obs}}(t) - \mathbf{v}(t)|^2 \, dt,$$

$\mathbf{v} = \mathbf{c}[\mathbf{H}](t, L)$ solution du problème direct

Gradient I

Sous contrainte

Utilisation de l'état adjoint : équation de transport

Gradient I

Sous contrainte

Utilisation de l'état adjoint : équation de transport linéaire

Gradient I

Sous contrainte

Utilisation de l’état adjoint : équation de transport

linéaire

rétrograde

Gradient I

Sous contrainte

Utilisation de l'état adjoint : équation de transport

linéaire

rétrograde

à coefficients discontinus $\mathbf{H}'(\mathbf{c})$

Gradient I

Sous contrainte

Utilisation de l'état adjoint : équation de transport

linéaire

rétrograde

à coefficients discontinus $\mathbf{H}'(\mathbf{c})$

Problèmes d'unicité

Gradient II

Direct

Dérivation du problème direct : équation de conservation

Gradient II

Direct

Dérivation du problème direct : équation de conservation

linéaire

Gradient II

Direct

Dérivation du problème direct : équation de conservation

linéaire

à coefficients discontinus $\mathbf{H}'(\mathbf{c})$

Gradient II

Direct

Dérivation du problème direct : équation de conservation

linéaire

à coefficients discontinus $\mathbf{H}'(\mathbf{c})$

dont la solution est "$\dfrac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{H}}$"

Gradient II

Direct

Dérivation du problème direct : équation de conservation

linéaire

à coefficients discontinus $\mathbf{H}'(\mathbf{c})$

dont la solution est "$\dfrac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{H}}$"

Solutions mesures : définition, stabilité ?

Gradient numérique

- Discrétisation de la fonction coût J

Gradient numérique

- Discrétisation de la fonction coût J
- Discrétisation de

$$\partial_t(\mathbf{c} + \mathbf{H}(\mathbf{c})) + \partial_x(u\mathbf{c}) = 0$$

Gradient numérique

- Discrétisation de la fonction coût J
- Discrétisation de

$$\partial_t(\mathbf{c} + \mathbf{H}(\mathbf{c})) + \partial_x(u\mathbf{c}) = 0$$

- Calcul du gradient exact du problème discrétisé.

Gradient numérique

- Discrétisation de la fonction coût J
- Discrétisation de

$$\partial_t(\mathbf{c} + \mathbf{H}(\mathbf{c})) + \partial_x(u\mathbf{c}) = 0$$

- Calcul du gradient exact du problème discrétisé.
- Impose la discrétisation des équations linéaires.