

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

COMMANDE NON-LINÉAIRE D'UN SYSTÈME DÉCRIT PAR DES ÉQUATIONS
PARABOLIQUES : APPLICATION AU PROCÉDÉ DE BLANCHIMENT

STÉPHANE REYOU

DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR (Ph.D.)

(GÉNIE CHIMIQUE)

DÉCEMBRE 2000

© Stéphane Renou, 2000.



**National Library
of Canada**

**Acquisitions and
Bibliographic Services**

**395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada**

**Bibliothèque nationale
du Canada**

**Acquisitions et
services bibliographiques**

**395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada**

Your file *Votre référence*

Our file *Notre référence*

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

0-612-60941-3

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée :

COMMANDE NON-LINÉAIRE D'UN SYSTÈME DÉCRIT PAR DES ÉQUATIONS
PARABOLIQUES : APPLICATION AU PROCÉDÉ DE BLANCHIMENT

présentée par : RENOU Stéphane

en vue de l'obtention du diplôme de : Philosophiae Doctor

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. JOLICOEUR Mario, Ph.D., président

M. PERRIER Michel, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. DOCHAIN Denis, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. GENDRON Sylvain, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. TESSIER Patrick, Ph.D., membre

M. GOURDEAU Richard, Ph.D., membre

À ma soeur Anne-Claire

Pour toutes ses réussites,
Qui sont bien au delà de tous les diplômes

REMERCIEMENTS

Un grand merci à mon directeur de recherche, Michel Perrier. En deux semaines, l'aide de quelques rencontres et de quelques courriers électroniques, Michel a réussi à me redonner la flamme des études alors que je quittais mon doctorat en génie électrique. Toujours ouvert aux nouvelles idées, il a su me donner la latitude que je désirais en ayant le tact de ne pas réagir lorsque je me cognais le nez sur un mur qu'il avait déjà vu. Si son sens pratique et son intuition m'impressionnent encore, c'est surtout pour ses qualités humaines et son professionnalisme que Michel demeure pour moi un modèle à suivre.

Merci à mon codirecteur, Denis Dochain. Ma relation avec Denis ressemble à celle que j'ai eue avec certains fromages, avec un peu de patience j'y ai pris goût. J'ai appris à apprécier au plus haut point sa franchise implacable et sa capacité de découpler travail et loisirs. Mon seul regret est de ne pas avoir pu en profiter plus probablement parce que je n'ai pas réalisé assez tôt la chance que j'avais de travailler avec lui.

Merci à mon deuxième codirecteur, Sylvain Gendron. Surtout présent au début de ma thèse, il m'a grandement aidé à bien comprendre la problématique du blanchiment. Mais avant tout, cet équilibre formidable entre rigueur et remise en question des acquis que pratique Sylvain m'a donné une grande confiance dans ma démarche exploratoire.

J'ai toujours trouvé que le parcours doctoral était un peu contre nature pour des ingénieurs qui sont avant tout des travailleurs d'équipes. Un grand merci à Jean-Dobey Ourega-Enid et Jean Valiquette qui ont permis de ponctuer ma thèse de séances de design en équipe. Ces moments ont confirmé à chaque fois le grand

plaisir que j'ai à être ingénieur. Merci aussi à Sylvain Lefebvre avec qui j'ai eu le plaisir de discuter de problèmes scientifiques pour le pur plaisir de l'argumentation. Il m'a permis de réaliser que la démarche scientifique n'est pas incompatible avec le travail d'équipe.

Merci à toute la bande de l'URCPC. Parti d'une idée entre deux réunions, ce groupe a permis de développer un sentiment d'appartenance important ainsi que de nouvelles amitiés. Merci à Jean-Francois, Antoine, Jean-Dobey, David, Nancy, Zacharia ainsi qu'aux nouveaux venus qui perpétuent le plaisir.

Merci à tous les étudiants que j'ai croisés dans mes tâches d'enseignement. Ils m'ont permis de me dépasser à chaque semestre en me questionnant sur tout ce que les livres ne disent pas.

Merci au CRSNG, au fonds FCAR, au MEQ pour leur support ou leur offre de support financier.

Merci à mes parents qui ont toujours cru en mes capacités universitaires et qui ont supporté toutes mes lubbies de carrières.

Merci à Frédérique et Maxime pour tous ces sourires désarmants qui permettent de mettre bien des choses en perspective. Les plus grandes excuses pour tous ces "Papa n'a pas le temps", "Arrête de faire du bruit" et tous les autres. Pardon de ne pas avoir toujours compris que les verres de jus renversés sur l'ordinateur et les mécanismes d'imprimante arrachés étaient surtout des façons de me dire que j'étais absent même si j'étais à la maison.

Un merci spécial à Hélène qui a souvent supporté sans dire un mot tous les états

d'âme et toutes mes sautes d'humeur parce qu'une courbe bleue ne voulait pas se juxtaposer à une courbe rouge. Merci pour cette famille qui a tenu le coup malgré tout grâce à sa patience. Merci pour cet appui sans conditions à mes rêves même s'ils ont empiété sur les siens.

Ces quelques pages au début d'une thèse sont une façon bien ingrate de remercier tous ceux sans qui elle n'existerait même pas...vaut mieux un bon repas au resto...oui Denis chez Lévesque!

RÉSUMÉ

La modélisation d'un réacteur tubulaire isotherme à l'aide de bilans de matière permet d'obtenir un système d'équation aux dérivées partielles. Ce modèle à paramètres répartis est toutefois peu utilisé pour la conception d'algorithme de commande. Est-il possible d'améliorer la performance du procédé en utilisant une loi de commande basée directement sur un modèle à paramètre répartis? Cette problématique est abordée dans cette thèse dans le cadre d'une application à un réacteur de blanchiment.

La première partie du travail présente la modélisation d'un réacteur tubulaire et les techniques de simulation. L'analyse des techniques de résolutions numériques classiques permet d'en identifier certaines limites dans le cas de la simulation de systèmes faiblement dispersifs en régime transitoire. Une méthode de résolution par alternance est donc proposée afin d'éliminer les problèmes de diffusion numérique et d'oscillation. Cet algorithme résout à chaque pas de temps et de façon successive les phénomènes de convection, dispersion et réaction. Cette approche simple permet une simulation rapide et stable du procédé. Elle peut donc être aisément utilisée dans un algorithme de commande en temps réel.

La seconde partie de la thèse présente trois différentes stratégies de commande appliquées au réacteur de blanchiment. Les stratégies utilisées diffèrent par le niveau de modélisation utilisé. Ainsi, la commande prédictive avec ajustement de l'échelle de temps utilise un modèle entrée-sortie, la commande par différence globale utilise une pré-approximation des équations aux dérivées partielles alors que la commande par post-approximation est construite directement à partir du modèle à paramètres répartis. L'analyse des performances de ces trois approches montre que l'utilisation d'un modèle à paramètres répartis permet de tenir compte efficacement des non-

linéarités du modèle cinétique. La commande par post-approximation proposée dans cette thèse permet de tenir compte efficacement des variations des paramètres cinétiques tout en maintenant des performances adéquates dans le cas de variations de la structure de la cinétique.

ABSTRACT

Dynamical isothermal tubular reactor modeling by mass balance leads to a set of partial differential equations. This model is not often used for the design of control laws. Is it possible to enhance process performance by using a control law based on a distributed parameter model? This problem is addressed here considering a bleaching reactor application.

The first part of this work presents the modeling of a tubular reactor and simulation algorithms. The analysis of classical numerical approaches identifies their limits in the case of the simulation of dominant convection systems in transient modes. A sequencing method is proposed to solve numerical diffusion and oscillation problems. This algorithm solves at each time step and successively each phenomena in the reactor, i.e. convection, diffusion and reaction. This simple approach reduces the simulation time and is stable. It is well suited for on-line control application.

The second part of the thesis presents three different control algorithms applied to the bleaching reactor. Those strategies differ by the complexity of the model used for the design. Hence, the predictive control uses an input-output model, the global differences algorithm uses an early lumping of the partial differential equation system and finally, the late lumping approach uses directly the distributed parameter model. The performance analysis of these three approaches shows that using a distributed parameter model is more efficient by taking into account the nonlinearities of the kinetic model. The late lumping control law proposed in this thesis, shows good performance with regard to kinetic parameters variations while maintaining good robustness properties to model mismatch.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
RÉSUMÉ	viii
ABSTRACT	x
TABLE DES MATIÈRES	xi
LISTE DES TABLEAUX	xii
LISTE DES FIGURES	xiii
LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES	xiv
LISTE DES ANNEXES	xvi
INTRODUCTION	1
 Partie I Modélisation et simulation	 12
 CHAPITRE 1 MODÉLISATION DE RÉACTEURS À PARAMÈTRES	
RÉPARTIS	13
1.1 Modèle général d'un réacteur tubulaire	14
1.1.1 Bilan de matière	15
1.1.2 Conditions frontières	16
1.1.3 Limites du modèle piston dispersif	17
1.2 Application à un réacteur de blanchiment	18

1.2.1	Procédé de blanchiment	19
1.2.2	Modèle à paramètres répartis	20

CHAPITRE 2 RÉSOLUTION D'ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES 30

2.1	Solution analytique	31
2.2	Résolutions numériques classiques	37
2.2.1	Résolution par différences finies	38
2.2.2	Résolution par collocation orthogonale	42
2.2.3	Résolution par éléments finis	48
2.3	Méthode de résolution numérique par alternance	54
2.3.1	Description de la méthode par alternance	55
2.3.2	Résolution des sous-problèmes	57
2.3.3	Analyse de la méthode par alternance	60
2.3.4	Application au modèle de Gendron	68
2.4	Synthèse des résultats	72

Partie II Commande d'un système à paramètres répartis 73

CHAPITRE 3 PROBLÉMATIQUE, COMMANDE PRÉDICTIVE ET COMMANDE PAR PRÉ-APPROXIMATION 74

3.1	Problématique générale de commande	75
3.2	Comportement en boucle ouverte	78
3.3	Commande prédictive	82
3.3.1	Mise en oeuvre	83
3.3.2	Résultats de simulation	86
3.4	Commande adaptative par différences globales	90
3.4.1	Mise en oeuvre	90
3.4.2	Résultat de simulation	94

CHAPITRE 4 STRATÉGIE DE COMMANDE BASÉE SUR UNE POST-APPROXIMATION	98
4.1 Stratégie de commande	99
4.2 Conception du régulateur adaptatif	101
4.3 Conception du régulateur externe	108
4.4 Application au réacteur de blanchiment	115
4.5 Résultats de simulation	119
CHAPITRE 5 ANALYSE COMPARATIVE DES STRATÉGIES DE COMMANDE	125
5.1 Méthodologie et critères de performance	126
5.2 Résultats avec le système M1	130
5.3 Résultats avec le système M2	137
5.4 Résultats avec le système M3	143
5.5 Synthèse des résultats	149
CONCLUSION	151

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1.1	Paramètres de modèles	29
Tableau 2.1	Valeurs propres du système selon la dispersion	35
Tableau 2.2	Synthèse des caractéristiques des méthodes numériques utilisées	72
Tableau 3.1	Équivalence de la variation des constantes cinétiques	81
Tableau 4.1	Fonction des paramètres de réglage	119
Tableau 5.1	Performances des régulateurs sur le modèle M1	135
Tableau 5.2	Performance des régulateurs sur le modèle M2	141
Tableau 5.3	Performances des régulateurs sur le modèle M3	147

LISTE DES FIGURES

Figure 1.1	Réacteur tubulaire	14
Figure 1.2	Tranche infinitésimale d'un réacteur tubulaire	15
Figure 1.3	Séquence de blanchiment	19
Figure 1.4	Erreur entre le modèle mixte et le modèle piston dispersif selon le nombre de Peclet	22
Figure 1.5	Comparaison entre le modèle mixte et le modèle piston dis- persif pour $Pe = 0.003$	22
Figure 1.6	Étude de traceur chez Nexfor	23
Figure 1.7	Terme cinétique de type L^2C^2	26
Figure 1.8	Terme cinétique de type L^3C^3	26
Figure 1.9	Terme cinétique de type LC	28
Figure 2.1	Méthode analytique: influence du maillage	34
Figure 2.2	Méthode analytique: influence de n pour $Pe = 1$	36
Figure 2.3	Méthode analytique: influence de n pour $Pe = 10$	36
Figure 2.4	Méthode analytique: influence de n pour $Pe = 100$	37
Figure 2.5	Validation de la méthode des différences finies	41
Figure 2.6	Différences finies: modèle de Gendron avec $Pe = 1$	41
Figure 2.7	Différences finies: modèle de Gendron avec $Pe = 10^8$	42
Figure 2.8	Validation de la méthode de collocation orthogonale	47
Figure 2.9	Influence du nombre de points de collocation	47
Figure 2.10	Collocation orthogonale: Modèle de Gendron avec $Pe = 100$	48
Figure 2.11	Validation de la méthode des éléments finis	52
Figure 2.12	Éléments finis: Influence du maillage	53
Figure 2.13	Éléments finis: Résolution pour $Pe = 2000$	53
Figure 2.14	Programme Matlab [©] dans le cas linéaire	61

Figure 2.15	Solution du système linéaire pour $Pe = 10^8$	62
Figure 2.16	Solution du système linéaire pour $Pe = 10^4$	63
Figure 2.17	Solution du système linéaire pour $Pe = 1$	63
Figure 2.18	Analyse en fréquence	65
Figure 2.19	Analyse du temps de simulation	66
Figure 2.20	Analyse de l'erreur	68
Figure 2.21	Entrées du réacteur	69
Figure 2.22	Modèle de Gendron: simulation pour $Pe = 10^8$	69
Figure 2.23	Modèle de Gendron: simulation pour $Pe = 10^4$	70
Figure 2.24	Modèle de Gendron: simulation pour $Pe = 1$	70
Figure 2.25	Erreur entre la MA avec CDR et la MA avec CRD	71
Figure 3.1	Schéma du réacteur de blanchiment	76
Figure 3.2	Effet de la variation du débit en boucle ouverte	79
Figure 3.3	Effet de la variation de k_L en boucle ouverte	80
Figure 3.4	Effet de la variation de k_C en boucle ouverte	80
Figure 3.5	Effet de la lignine à l'entrée en boucle ouverte	81
Figure 3.6	Équivalence de la variation en boucle ouverte des variations des constantes cinétiques	82
Figure 3.7	Principe de la commande prédictive	83
Figure 3.8	Commande prédictive : variation du débit	87
Figure 3.9	Commande prédictive : variation du point de consigne	87
Figure 3.10	Commande prédictive : variation des constantes cinétiques	88
Figure 3.11	Variation de paramètres pour l'analyse de robustesse	89
Figure 3.12	Commande prédictive : analyse de robustesse	89
Figure 3.13	Structure de la commande par différences globales	93
Figure 3.14	Commande par différences globales : variation du débit	95
Figure 3.15	Commande par différences globales : variation du point de consigne	95

Figure 3.16	Commande par différences globales : variation des constantes cinétiques	96
Figure 3.17	Variation de paramètres pour l'analyse de robustesse	97
Figure 3.18	Commande par différences globales : analyse de robustesse	97
Figure 4.1	Structure du régulateur interne	102
Figure 4.2	Structure du régulateur avec rétroaction	109
Figure 4.3	Structure du régulateur avec anticipation	110
Figure 4.4	Structure du régulateur avec anticipation et rétroaction	114
Figure 4.5	Commande par post-approximation : variation du débit	120
Figure 4.6	Commande par post-approximation : variation du point de consigne	120
Figure 4.7	Commande par post-approximation : variation des constantes cinétiques	121
Figure 4.8	Variation de paramètres pour l'analyse de robustesse	122
Figure 4.9	Commande par post-approximation : analyse de robustesse	122
Figure 4.10	Commande par post-approximation : estimation des paramètres cinétiques	123
Figure 5.1	Séquence de perturbations	128
Figure 5.2	Modèle M1 : Variation du débit	131
Figure 5.3	Modèle M1 : Variation du point de consigne	132
Figure 5.4	Modèle M1 : Variation des constantes cinétiques	133
Figure 5.5	Modèle M1 : Séquence de perturbations	134
Figure 5.6	Modèle M1 : Performance selon la variation du point de consigne	136
Figure 5.7	Modèle M1 : Performance selon la variation de k_L	137
Figure 5.8	Modèle M2 : Variation du débit	138
Figure 5.9	Modèle M2 : Variation du point de consigne	139
Figure 5.10	Modèle M2 : Variation des constantes cinétiques	140

Figure 5.11	Modèle M2 : Séquence de perturbations	141
Figure 5.12	Modèle M2 : Performance selon la variation du point de consigne	142
Figure 5.13	Modèle M2 : Performance selon la variation de k_L	143
Figure 5.14	Modèle M3 : Variation de débit	144
Figure 5.15	Modèle M3 : Variation du point de consigne	145
Figure 5.16	Modèle M3 : Variation des constantes cinétiques	146
Figure 5.17	Modèle M3 : Séquence de perturbations	147
Figure 5.18	Modèle M3 : Performance selon la variation du point de consigne	148
Figure 5.19	Modèle M3 : Performance selon la variation de k_L	149
Figure I.1	Matlab [©] code for linear case	177
Figure I.2	Linear system solution for $Pe = 10^8$	179
Figure I.3	Linear system solution for $Pe = 10^4$	180
Figure I.4	Linear system solution for $Pe = 1$	180
Figure I.5	Frequency analysis	182
Figure I.6	Simulation time analysis	182
Figure I.7	Error analysis	184
Figure I.8	Input history	186
Figure I.9	ClO_2 bleaching system simulation for $Pe = 10^8$	187
Figure I.10	ClO_2 bleaching system simulation for $Pe = 10^4$	187
Figure I.11	ClO_2 bleaching system simulation for $Pe = 1$	188
Figure I.12	Error between SM CDR and SM CRD for the bleaching reactor	188
Figure II.1	Global differences controller	197
Figure II.2	Late lumping internal model controller	198
Figure II.3	Operating conditions variations	200
Figure II.4	Flow rate variations	201
Figure II.5	Set-point variations	202

Figure II.6	Model perturbations	203
Figure II.7	Kinetic parameter estimations	203
Figure III.1	Structure du contrôleur.	208
Figure III.2	Variation de la référence Ref_{out}	215
Figure III.3	Perturbation du modèle.	215
Figure III.4	Adaptation des paranètres.	216
Figure III.5	Variation de la référence et des paramètres du système.	217
Figure III.6	Variation de la référence, des paramètres du système et de l'entrée L_{in}	218
Figure IV.1	Controller structure.	223
Figure IV.2	Set point change on Ref_{out}	229
Figure IV.3	Model perturbation.	230
Figure IV.4	Parameters adaptation.	231
Figure IV.5	Set point change and model perturbation.	232
Figure IV.6	Set point change, model perturbation and L_{in} variation.	233
Figure V.1	Model 1 and 2 kinetic analysis	239
Figure V.2	Effect of flow rate variation	243
Figure V.3	Effect of set-point variation	244
Figure V.4	Effect of variation of kinetic rate	245
Figure V.5	Effect of kinetic structure	246

LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES

Sigles

EDO	Equation(s) différentielle(s) ordinaire(s)
EDP	Equation(s) aux dérivées partielles
DMC	Dynamic Matrix Control
M1	Modèle 1
M2	Modèle 2
M3	Modèle 3

Symboles

ℓ	m	Longueur du réacteur
A	m^2	Aire de la section du réacteur
v	m/s	Vitesse superficielle
D	m^2/s	Coefficient de dispersion
J_A	$\frac{mol \cdot m}{l \cdot s}$	Flux molaire de diffusion
C_A	mol/l	Concentration
z	m	Position
t	min	Temps
F	m^3/min	Débit volumique
Δz	m	Discrétisation spatiale
Δt	m	Discrétisation temporelle
Pe		Nombre de Peclet
L	Kappa	Concentration de lignine
C	g/l	Concentration de dioxyde de Chlore

τ_L		Constante cinétique de la lignine
τ_C		Constante cinétique du dioxyde de Chlore
α, β		Ordre des cinétiques
L_0	Kappa	Variation instantanée de lignine à l'entrée du réacteur
C_0	g/l	Variation instantanée de ClO_2 à l'entrée du réacteur
x	g/l	Concentration dans le cas du système linéaire
k	1/s	Constante cinétique dans le cas du système linéaire
H		Espace de Hilbert
L^2		Espace des fonctions réelles de carré intégrable
$\langle \rangle$		Produit scalaire dans L^2
$\ \cdot \ _2$		Norme dans L^2
δ		Distribution de Dirac
$D()$		Domaine de définition
λ_n		Valeurs propres
ϕ_n		Fonctions propres
ψ_n		Fonctions co-orthogonale aux fonctions propres

LISTE DES ANNEXES

Annexe I	Solution of the Convection-Dispersion-Reaction Equation by a Sequencing Method	166
I.1	Introduction	168
I.2	Description of the sequencing method	169
I.3	Sub-problems resolution	172
I.4	Sequencing method analysis	175
I.5	Nonlinear PDE: Application to a bleaching reactor	185
I.6	Conclusion	189
 Annexe II	 Partial Differential Equation Model Based Control: Application to a Bleaching Reactor	 190
II.1	Introduction	191
II.2	Bleaching reactor model	193
II.3	Time-Scaled DMC	195
II.4	Early lumping approach	196
II.5	Late lumping approach	197
II.6	Simulation results	199
II.7	Conclusion	201
 Annexe III	 Commande adaptative d'un système parabolique	 204
III.1	Introduction	205
III.2	Design du contrôleur	207
III.3	Résultats et discussion	214
III.4	Conclusion	217

Annexe IV	Direct Adaptive Control of a Linear Parabolic System	219
IV.1	Introduction	220
IV.2	Model Reference Controller Design	222
IV.3	Results and Discussion	228
IV.4	Conclusion	231
IV.5	Acknowledgements	232
Annexe V	Nonlinear Control Design for Pulp Bleaching	234
V.1	Introduction	235
V.2	PDE modeling	237
V.3	Control Design	239
V.4	Simulation Results	243
V.5	Conclusion	247

INTRODUCTION

Les progrès de l'informatique et de la micro-électronique ont révolutionné l'industrie. La disponibilité de nouveaux capteurs performants, la cueillette de données en ligne et la centralisation de cette information sur de véritables autoroutes de l'information dans l'usine sont le reflet des investissements importants faits dans le domaine des technologies de l'information. Ces développements technologiques ouvrent maintenant la porte à toute une gamme d'outils pour l'optimisation du fonctionnement des procédés. Cette optimisation étant rendue essentielle dans un contexte de marché global où les marges de rentabilité des usines sont réduites à leur limite. Le développement de stratégies de commande avancée s'avère aujourd'hui un outil clé pour atteindre cet objectif.

Traditionnellement la commande de procédé est principalement basée sur une vue entrée-sortie du procédé. Dans le cas d'un réacteur tubulaire, différentes boucles de contrôle sont mises en place pour commander chacune des variables du procédé autour d'un point d'opération donné. Ainsi, l'ajustement de ces régulateurs est souvent réalisé à l'aide de modèles linéaires tels des fonctions de transfert avec retard. Cette approche est justifiée et efficace lorsque le procédé reste très près de son point de fonctionnement en tout temps. Par contre, les contraintes de productivité croissantes remettent en question l'utilisation de modèles valides sur une plage de fonctionnement restreinte. En effet, l'usine moderne doit maintenant pouvoir composer avec des stocks limités et des exigences de qualité accrue. Il en résulte une plus grande variabilité des conditions d'opération du procédé qui doit pouvoir s'ajuster rapidement à des débits de production variés et des spécifications variables. Les régulateurs traditionnels basés sur des modèles linéaires peuvent être inefficaces dans de telles circonstances car pour chaque changement important des

conditions opératoires, ils doivent être ajustés de nouveau pour un fonctionnement optimal. Dans le cas contraire, une variabilité accrue des produits, des oscillations entre les boucles de contrôle et parfois même l'instabilité menacent les réacteurs. Heureusement, l'utilisation de meilleurs modèles est une solution maintenant envisageable grâce au progrès de l'informatique.

La modélisation des réacteurs tubulaires n'est pas un sujet nouveau. Le modèle piston dispersif pour ce type de réacteur est bien connu et largement couvert dans les ouvrages de génie chimique. Son utilisation à des fins de commande est par contre beaucoup moins fréquente compte tenu de la complexité de ce type de modèle. En effet, le modèle d'un réacteur tubulaire en transitoire est composé d'équations aux dérivées partielles qui sont généralement non-linéaires. Ce type de modèle est appelé modèle à paramètres répartis car les variables du système ne sont plus seulement fonction du temps mais aussi de l'espace. Ces équations permettent donc de décrire le profil du réacteur dans le temps. Outre la complexité du traitement mathématique direct des équations aux dérivées partielles, la commande d'un réacteur tubulaire est en soi difficile par la nature même du système:

1. *Les réacteurs tubulaires sont des systèmes avec un grand retard.* Le retard d'un réacteur tubulaire correspond plus ou moins à son temps de résidence moyen. La commande des systèmes à retard est complexe car l'effet de l'entrée sur la sortie apparaît avec un délai. Il est donc impossible de réagir trop rapidement ou trop fortement à une déviation non désirée de la sortie sans risquer de rendre le système instable. Quel que soit le modèle ou le régulateur utilisé, le délai limitera toujours la performance du système.
2. *Les réacteurs tubulaires sont généralement des systèmes non-linéaires.* Lorsque la cinétique de réaction est non linéaire, le modèle du réacteur est non linéaire de facto. De plus, l'effet de la température, et des divers autres facteurs

qui influencent la cinétique, sont aussi généralement fortement non linéaires. Cette caractéristique des réacteurs limite l'utilisation de régulateurs linéaires qui ne sont calibrés que pour un point de fonctionnement précis. En effet, il est possible de considérer que dans une certaine zone autour du point de fonctionnement, le comportement du réacteur est linéaire. Par contre, ce modèle n'est plus valide lorsque le procédé change de point d'opération ou simplement s'éloigne fortement de ce point.

Le modèle non linéaire à paramètre répartis d'un réacteur tubulaire a l'avantage d'être valide pour tous les points d'opérations de fonctionnement dans la mesure où l'ensemble des variables opératoires sont incluses dans le modèle. De plus, ce type de modèle permet de tenir compte directement de l'information disponible sur le procédé. En effet, les paramètres hydrodynamiques et la cinétique de réaction apparaissent explicitement dans le modèle. Le modèle est donc non linéaire et le délai est maintenant implicite dans la formulation des équations aux dérivées partielles.

Travaux antérieurs

Différentes approches ont été considérées pour commander des systèmes à paramètres distribués. Ray (1981) propose de scinder ces approches en deux grandes catégories: les stratégies de pré-approximation et les stratégies de post-approximation. Les approches par pré-approximation utilisent une approximation préalable des équations aux dérivées partielles (EDPs) en équations différentielles ordinaires (EDOs). L'algorithme de commande est donc conçu en utilisant cette approximation. Dans les stratégies de post-approximation la conception de la loi de commande est faite directement à partir du modèle à paramètres répartis. Une approximation sera utilisée au besoin lors de la mise en oeuvre du contrôleur.

Les stratégies de pré-approximation se distinguent par le type d'approximation utilisé. En effet, des techniques analytiques ou numériques doivent être utilisées pour permettre la transformation des EDPs en un nombre suffisamment restreint d'EDOs pour que l'approximation du modèle permette la conception de loi de commande. Parmi les techniques numériques, notons la technique de collocation orthogonale (Villadsen et Michelsen, 1978) qui permet d'obtenir un nombre restreint d'équations. Le choix d'une technique analytique dépend fortement de la nature des EDPs. Si les équations ne comportent pas de dérivé partielle du deuxième ordre, le système est dit hyperbolique. Sinon les équations sont classifiés selon la forme caractéristique de l'équation. Dans le cas des système de type convection-diffusion-réaction, les équations sont dites de type parabolique.

Dans le cas de systèmes hyperboliques, le système évolue selon un champ vectoriel caractéristique. Il est alors possible d'utiliser un changement de variable pour obtenir un système d'EDOs de dimension finie (Farlow, 1993). Cette technique a été utilisée entre autre par Hanczyc et Palazoglu (1995) ainsi que par Shang et al (2000) qui proposent des lois de commande à mode de glissement. Par contre, cette technique ne peut être appliquée aux équations paraboliques.

Dans le cas des systèmes paraboliques, l'utilisation des modes principaux, i.e. des valeurs propres les plus faibles, peut permettre de représenter adéquatement le système. Les valeurs propres d'un système d'EDPs sont obtenues en résolvant le problème aux valeurs propres associées. Il est ainsi possible d'obtenir une décomposition sous la forme d'un système d'EDO de dimension infinie. Cette approche a été utilisée par Curtain (1982) qui propose une stratégie de retour d'état pour le contrôle par la condition frontière. Drakunov et Barbieri (1997*a*; 1997*b*) proposent de combiner l'approche modale au concept de variété d'équilibre auquel ils contraignent le système par une stratégie à mode de glissement. Finalement, Chakravarti et

Ray (1997) critiquent l'utilisation des formes modales qui sont parfois impossibles à calculer et proposent l'utilisation des fonctions singulières comme approximation du système. Christofides et Daoutidis (1998; 1998) ont formalisé l'approche de décomposition modale en utilisant le concept de système à deux échelles de temps.

Dochain (1994) a proposé l'approche par différence globale qui peut être utilisée en pré-approximation ou en post-approximation. Si l'action de commande est présente dans l'EDP, un régulateur peut être conçu directement par linéarisation exacte. La loi de commande inclut alors un terme de dérivée partielle qui sera approximé par la suite à l'aide d'une différence globale. Tali-Maamar (1994) a utilisé cette approche dans le cas d'un bioréacteur décrit par des équations hyperboliques ou paraboliques. Si l'action de commande est à la frontière, les différences globales sont utilisées au préalable pour introduire l'action de commande dans les bilans. Cette technique de pré-approximation a été utilisée par Bourrel (1996) sur un biofiltre décrit par des équations hyperboliques. Cette approche a aussi été utilisée dans les travaux de Babary et al (1998; 1995) en combinaison avec une formulation particulière des conditions frontières. Finalement, Christofides et Daoutidis (Christofides et Daoutidis, 1997) utilisent eux aussi une approche de linéarisation exacte sur une classe particulière de systèmes quasi-linéaires à deux échelles de temps.

Les techniques de post-approximation utilisent généralement un contenu mathématique important qui est dû à la définition des EDPs dans un espace de Hilbert (Gustafson, 1980). Ainsi des notions d'analyse fonctionnelle sont essentielles à la compréhension de ces concepts (Kreyszig, 1978). Certaines similarités entre l'automatique des systèmes localisés et répartis ont toutefois été mises en évidence par El Jai et Pritchard (1986) ainsi que El Jai et Amouroux (1990). Dans le cas particulier des systèmes linéaires, la théorie des systèmes de dimension infinie permet à Curtain et Zwart (1995) de donner un cadre de travail complet pour le développe-

ment de loi de commande. Ce cadre a été utilisé par Dochain et Winkin (1995) puis Winkin et al (2000) qui l'ont appliqué aux réacteurs à lit fixe en démontrant l'existence d'une solution faible ainsi que les concepts de stabilité, observabilité et accessibilité dans le cas des réacteurs piston et piston dispersif.

La commande optimale est une stratégie de prédilection dans ce cadre formel. Cette stratégie est à la base de la majorité des travaux présentés dans les années 70 comme le rapporte la compilation de Ray et Lianiotis (1978). L'évolution des outils informatiques a permis récemment un regain d'activité dans ce domaine grâce au développement de méthodes de résolution efficaces. Ainsi Glowinski et He (1996) présentent une application à la commande d'un système de convection-diffusion-réaction par la frontière. Dans cet algorithme, la formulation du problème est faite directement sur les EDPs mais l'algorithme utilise les éléments finis lors de la mise en oeuvre.

Récemment, plusieurs travaux présentent des solutions qui utilisent la commande adaptative pour les systèmes répartis. Ces travaux sont basés sur l'utilisation des techniques de stabilité de Lyapunov. Ces techniques élaborées par Lyapunov à la fin du 19^e siècle ont été popularisées beaucoup plus tard vers le milieu du 20^e siècle. Les premières applications en génie chimique remontent aux travaux de Berger et Lapidus (1968) ainsi que Gurel et Lapidus (1969) sur l'analyse de la stabilité des réacteurs décrits en régime permanent par le modèle piston dispersif. L'application de ces techniques de stabilité dans un espace de Hilbert a, par la suite, été discutée formellement par Datko (1970) et Pazy (1972). Puis, des travaux sur la stabilité des réacteurs tubulaires en transitoire ont été présentés par Liou et al (1974) sur les réacteurs non adiabatiques avec recirculation et par McGreavy et Soliman (1973) sur les réacteurs catalytiques à lit fixe. Les applications des techniques de Lyapunov aux systèmes à paramètres localisés sont déjà bien établies.

L'utilisation de cette théorie fait l'objet de plusieurs livres dont celui de Khalil (1996) et certaines applications ont été présentées pour le contrôle des réacteurs parfaitement agités (Viel *et al.*, 1997). L'application à la commande adaptative des systèmes à paramètres répartis est toutefois beaucoup plus récente. Böhm *et al.* (1998) utilisent des arguments similaires à ceux de Lyapunov pour présenter une stratégie de commande par modèle de référence. Leur traitement exhaustif inclut entre autres une preuve de convergence des paramètres identifiés en ligne ainsi que les conditions d'excitation persistante qui s'y rattachent. Cette approche s'applique aux systèmes pour lequel le modèle de référence est fortement coercitif et dont la commande apparaît explicitement dans les EDPs. Hong et Bentsman (1994) proposent aussi une stratégie de commande basée sur un modèle de référence. Leur argumentation est principalement basée sur une analyse de Lyapunov mais elle se limite à des systèmes de diffusion-réaction où la commande est explicite dans les EPD.

Application au blanchiment de la pâte

Pour illustrer les développements de cette thèse dans un contexte plus pratique que purement théorique, tous les développements seront appliqués à un réacteur de blanchiment. Ce type de réacteur est utilisé dans l'industrie des pâtes et papiers pour augmenter la blancheur de la pâte avant la formation du papier. Ces réacteurs sont tubulaires et se prêtent bien à la modélisation par bilan de masse. De plus, l'intérêt industriel pour le développement de nouvelles stratégies de commande s'est manifesté clairement récemment. En effet, Paprican a présentement un programme de recherche dans cet axe (Gendron, 1996) et Nexfor a présenté divers travaux sur la modélisation et la commande des séquences de blanchiment (Savoie et Tessier, 1997; Pudlas *et al.*, 1999; Tessier *et al.*, 2000). Les collaborations avec ces partenaires justifient en partie le choix de cette application.

Différents travaux ont déjà été présentés sur la commande des systèmes des procédés tel que le relate Kayihan (1990). Rankin et Bialkowski (1984) utilisent un algorithme de blancheur compensée qu'ils combinent à un modèle dynamique du système sur une tour de chlorination. Gough et Kay (1994) présentent une stratégie de commande adaptative à effort minimal basée sur un modèle de fonction de transfert. Finalement Barette et Perrier (1995) introduisent l'utilisation d'un modèle plus complexe pour la commande d'une tour de blanchiment à l'hypochlorite. Ils utilisent ainsi un modèle composé de multiples réacteurs parfaitement agités en série pour représenter le comportement piston du réacteur.

Le réacteur de blanchiment servira donc de base aux analyses et discussions de cette thèse. L'utilisation d'une application limite d'un certain point de vue la généralité des contributions de la thèse. Par contre, cette utilisation oriente clairement les efforts de recherche vers des solutions potentiellement applicables en usine. Ainsi, les contraintes d'une telle application seront au centre du développement des idées. Cette orientation favorise donc le développement de solutions industriellement viables plutôt qu'une formulation mathématique idéale mais manquant de repère concret en terme d'application et de mise en oeuvre.

Objectifs de la thèse

L'analyse des travaux antérieurs montre que beaucoup de développements ont été accomplis dans la commande des systèmes à paramètres répartis. Intuitivement, il est possible de croire que l'utilisation d'un modèle plus raffiné permettra d'accroître les performances du système de commande. Par contre, il n'est pas évident que cet accroissement de performance justifie l'effort qui doit être mis dans la modélisation et le développement de la loi de commande. Cette problématique permet de formuler l'hypothèse de recherche suivante:

*L'utilisation d'un modèle à paramètres repartis
pour la conception d'un système de commande d'un réacteur tubulaire permet
d'accroître les performances de ce procédé*

La méthodologie adoptée pour étudier cette hypothèse consiste à développer différentes stratégies de commande sur un exemple type: le réacteur de blanchiment. Ceci permet par la suite de réaliser l'analyse comparative des performances. Les objectifs spécifiques de la thèse sont donc les suivants:

1. *Élaborer des outils de simulation efficaces.* Plusieurs outils de simulation existent pour les systèmes à paramètres répartis. Par contre, leur utilisation en ligne peut être difficile voir même impossible. Cette caractéristique est essentielle pour l'application en usine de lois de commande qui utilisent le modèle à paramètres répartis directement. Il faut donc analyser les outils existants et, au besoin, en créer de nouveaux.

2. *Adapter les stratégies de commande existantes à la problématique de la commande du blanchiment.* Pour servir de base de comparaison, deux stratégies existantes seront utilisées: la commande prédictive et l'approche par différence globale. Ces deux stratégies seront appliquées à la problématique particulière du réacteur de blanchiment soit: débit variable, perturbations mesurées de la matière première, contrôle par la frontière, cinétique de réaction mal connue. Dans le cas de la commande prédictive, une adaptation au débit variable doit être réalisée. Dans le cas de la commande par différence globale, la commande de type "frontière" dans le cas parabolique doit être abordée.

3. *Élaborer une stratégie de commande par post-approximation pour les systèmes commandés par la condition frontière.* Les stratégies de post-approximation adaptatives actuelles ne considèrent pas la commande de type frontière. Comme le procédé de blanchiment a une cinétique de réaction mal connue, l'utilisation de l'adaptation des constantes cinétiques est essentielle. Une nouvelle stratégie doit donc être élaborée.

4. *Comparer les différentes stratégies sur une application.* Une comparaison générale des performances entre plusieurs algorithmes est un problème difficile. En effet, les performances d'un régulateur sont toujours en fonction du système à commander. Cette comparaison sera donc effectuée strictement sur le procédé de blanchiment par simulation avec les limites inhérentes d'une telle approche. Les possibilités de mise en oeuvre en usine seront considérées.

Organisation de la thèse

Cette thèse est organisée en deux parties distinctes afin de séparer les aspects de modélisation et simulation de la portion commande. La première partie est composée de deux chapitres sur la modélisation et la simulation des réacteurs tubulaires décrits par des systèmes à paramètres répartis.

Le chapitre 1 décrit la modélisation à paramètres répartis des réacteurs tubulaires. De plus, il contient une présentation du procédé de blanchiment et les modèles du réacteur au dioxyde de chlore qui seront utilisés dans cette thèse.

Le chapitre 2 traite des différentes méthodes de résolution des systèmes d'EDPs paraboliques. Tout d'abord, la résolution analytique dans le cas linéaire sera présentée. Puis la résolution du système en régime permanent par une méthode de

relaxation sera abordé. Par la suite les techniques de différences finies, de collocation orthogonale et d'éléments finis sont utilisées pour résoudre les équations du procédé de blanchiment. Compte tenu des limites de ces méthodes, une nouvelle approche sera proposée: la méthode par alternance.

La seconde partie de la thèse présente les différents algorithmes de commande utilisés pour la commande d'un système à paramètres répartis parabolique. Chaque loi de commande sera appliquée aux divers modèles de blanchiment développés au chapitre I afin d'en analyser comparativement la robustesse.

Le chapitre 3 présente les algorithmes déjà connus qui ont été adaptés pour l'application au réacteur de blanchiment. L'algorithme de commande prédictive DMC sera donc présenté avec une variante qui permet de considérer la variation du débit. Par la suite, un algorithme basé sur les différences globales sera présenté sous une forme qui permet la commande par la condition frontière d'entrée. De plus, un mécanisme d'adaptation du rapport des constantes cinétiques sera ajouté.

Le chapitre 4 présente une nouvelle stratégie de commande adaptative par post-approximation pour les systèmes paraboliques avec commande frontière à l'entrée. Cette stratégie est composée de deux niveaux de régulateur. La première boucle adaptative à modèle interne permet l'identification en ligne de constantes cinétiques alors que la seconde permet le suivi du point de consigne par anticipation et rétroaction.

Enfin, le dernier chapitre de cette thèse présente l'analyse comparative de tous les algorithmes de commande présentés dans les chapitres trois et quatre. L'analyse est réalisée qualitativement par simulation sur différents modèles et quantitativement par l'utilisation d'indice de performance.

Partie I

Modélisation et simulation

CHAPITRE 1

MODÉLISATION DE RÉACTEURS À PARAMÈTRES RÉPARTIS

Pour un même réacteur tubulaire, différents types de modèles peuvent être dérivés selon les besoins. Dans le cadre de la commande de procédés, le modèle généralement le plus utilisé est du type fonction de transfert avec délai. Ce type de modèle à paramètres localisés ne tient toutefois pas compte de la nature répartie du réacteur tubulaire pour lequel l'hydrodynamique et la cinétique de réaction peuvent être caractérisées en tout point du réacteur. Cette caractéristique des réacteurs tubulaires peut être mise en évidence par l'utilisation d'un modèle à paramètres répartis. En effet, l'utilisation de bilans de matière et d'énergie mène directement à des équations aux dérivées partielles. Cette modélisation est déjà bien couverte dans les livres de base de génie chimique (Fogler, 1992; Levenspiel, 1999). L'objectif de ce chapitre n'est donc pas de présenter un nouveau modèle pour les réacteurs tubulaires, ni d'argumenter sur la validité de ce type de modèle mais plutôt de poser précisément le type de modèle sur lequel sera basé le développement de la loi de commande.

La première partie de ce chapitre présente donc le modèle piston dispersif d'un réacteur tubulaire isotherme. Les bilans de masse, les conditions frontières ainsi que certaines limites de ce modèle seront présentées. La seconde partie de ce chapitre présente l'application de ce type de modélisation à un réacteur de blanchiment. Le procédé de blanchiment sera décrit succinctement, suivi de l'identification des paramètres hydrodynamiques et des divers modèles cinétiques utilisés dans cette thèse.

1.1 Modèle général d'un réacteur tubulaire

La figure 1.1 présente le schéma d'un réacteur tubulaire. Si la géométrie de ce réacteur est simple, il peut en être tout autrement des modèles qui peuvent être développés pour le représenter. Il s'agit en fait d'un système dont l'hydrodynamique complexe peut être modélisée par les équations de Navier-Stokes (Bird *et al.*, 1960). Si le nombre de Reynolds est assez élevé, le régime d'écoulement est turbulent. L'expression des termes turbulent dans les équations d'écoulement et leur identification demeure un problème ouvert et complexe.

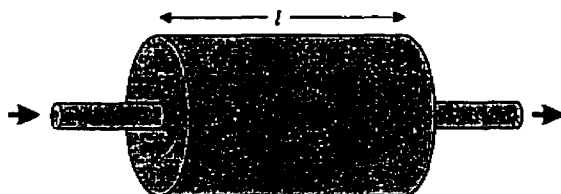


Figure 1.1 Réacteur tubulaire

L'objectif de cette thèse est d'évaluer l'utilisation de modèles à paramètres repartis pour le développement de stratégies de commande. Un modèle simple et courant qui tient compte de la nature répartie des dynamiques sera donc utilisé: le modèle piston dispersif. L'hypothèse de base du modèle est la suivante: le mélange est causé par le mouvement brownien des éléments. Donc, le mouvement turbulent causera une dispersion des éléments qui sera statistiquement assimilable à une loi normale. La modélisation de ce phénomène peut donc être faite à l'aide de la loi de Fick suivante, qui est utilisée pour modéliser la diffusion moléculaire.

$$J_A = -D \frac{\partial C_A}{\partial z} \quad (1.1)$$

Cette simplification permet d'obtenir un modèle à une seule dimension spatiale,

dans lequel tous les phénomènes de mélange, tel le rétro-mélange y seront modélisés par un seul coefficient: le taux de Dispersion D .

1.1.1 Bilan de matière

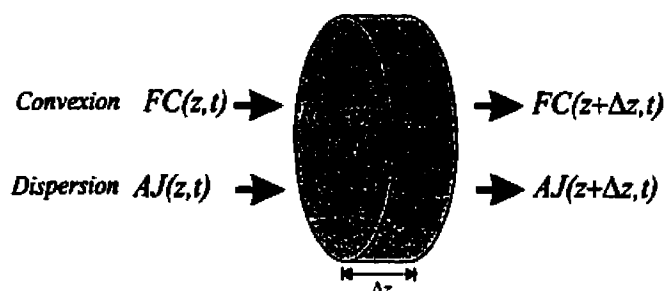


Figure 1.2 Tranche infinitésimale d'un réacteur tubulaire

Le modèle piston dispersif est obtenu en effectuant un bilan de matière sur une tranche infinitésimale du réacteur pour chacun des composants. Soit le bilan de matière général suivant:

$$\left\{ \begin{array}{c} \text{taux d'accumulation} \\ \text{du composant} \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} \text{taux d'entrée} \\ \text{du composant} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{c} \text{taux de sortie} \\ \text{du composant} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{c} \text{taux de génération} \\ \text{du composant par la réaction} \end{array} \right\} \quad (1.2)$$

La figure 1.2 présente les flux entrants et sortants sur une tranche du réacteur. Ainsi, en considérant les phénomènes de convection, de dispersion et de réaction sur cette tranche du réacteur, le bilan suivant est obtenu:

$$A\Delta z \frac{\partial C_A(z,t)}{\partial t} = FC_A(z,t) - FC_A(z+\Delta z,t) - AD \frac{\partial C_A(z,t)}{\partial z} + AD \frac{\partial C_A(z+\Delta z,t)}{\partial z} + A\Delta z r(C_A(z,t)) \quad (1.3)$$

En divisant par le volume et en utilisant la définition de la dérivée partielle, le modèle général suivant est obtenu:

$$\frac{\partial C_A(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial C_A(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 C_A(z, t)}{\partial z^2} + r(C_A(z, t)) \quad (1.4)$$

Cette équation aux dérivées partielles (EDP) est donc obtenue pour chacun des composants et elle tient compte de la nature répartie des variables du système. Ce type d'équation de deuxième ordre peut être classifié en trois catégories selon les coefficients des termes des dérivées partielles d'ordre deux (Kreyszig, 1988). Dans le cas d'un modèle piston, les équations sont de type hyperbolique alors que dans le cas d'un modèle dispersif, les équations sont de type parabolique. Cette classification a une incidence importante sur les techniques de résolution analytiques et numériques qui peuvent être utilisées.

1.1.2 Conditions frontières

Pour qu'un modèle composé d'équations aux dérivées partielles soit complet, il faut déterminer de façon exacte ses conditions frontières. Dans le cas d'un réacteur représenté par des équations hyperboliques, une seule condition frontière est requise. La concentration à l'entrée du réacteur est généralement utilisée. Dans le cas d'un réacteur représenté par des équations paraboliques, deux conditions frontières doivent être posées. Le premier à proposer des conditions frontières pour ce type de réacteur est Danckwerts (1953). Il établit la condition frontière à l'entrée à l'aide d'un bilan de flux et pose un gradient de concentration nul à la sortie. Il obtient ainsi :

$$D \frac{\partial C_A(0, t)}{\partial z} = v(C_A(0, t) - C_{Ain}(t)) \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial C_A(l, t)}{\partial z} = 0 \quad (1.6)$$

Danckwerts valide la condition à la sortie en analysant le gradient à ce niveau. Ce gradient ne peut pas être positif car la concentration passerait par un minimum dans le réacteur ce qui est impossible. Il ne peut pas non plus être négatif car un bilan des flux à l'extrémité du réacteur montrerait une concentration à la sortie plus grande que celle dans le réacteur. Ces conditions frontières sont généralement appelées conditions pour un réacteur fermé-fermé. Toutefois, la proposition de Danckwerts a suscité de nombreuses critiques. Wehner et Wilhelm (1956) ainsi que Bischoff (1961) critiquent les conditions en proposant de considérer l'impact des sections avant et après le réacteur qui ont leur dispersion propre. Pearson (1959) propose une solution intermédiaire en considérant une dispersion progressive dans les extrémités. Van Cauwenberghe (1966) montre que les conditions de Danckwerts sont fausses à la sortie dans le cas d'un réacteur piston. Cette analyse est poursuivie par Salmi et Romanainen (1995) qui propose une solution empirique pour lier les conditions de Danckwerts au modèle d'un réacteur piston en pondérant chacun des modèles selon la dispersion.

Malgré l'ensemble de ces critiques, les conditions de Danckwerts sont les plus utilisées pour le modèle piston dispersif car, somme toute, l'importance de l'erreur commise pour les systèmes faiblement dispersifs demeure relativement restreinte si les méthodes de résolutions numériques sont choisies adéquatement. Ces conditions frontières seront donc utilisées dans cette thèse.

1.1.3 Limites du modèle piston dispersif

Le modèle précédent permet de représenter un réacteur tubulaire isotherme et isobare. Le même type d'approche de modélisation peut toutefois être utilisé pour

représenter des réacteurs plus complexes en utilisant un bilan d'énergie ou de pression. Le modèle dispersif doit toutefois être utilisé avec précaution car il ne permet pas de représenter adéquatement tous les réacteurs tubulaires. Levenspiel (1999) met en garde contre son utilisation lorsque le taux de mélange devient trop élevé, soit pour un nombre de Peclet inférieur à un.

$$\text{Nombre de Peclet } Pe = \frac{vl}{D} \quad (1.7)$$

Levenspiel et Fitzgerald (1983) montrent en effet l'importance de l'hypothèse du mouvement aléatoire pour l'utilisation du modèle dispersif par rapport à un modèle convectif gaussien. Si cette hypothèse n'est pas respectée, divers modèles peuvent alors être considérés selon la nature du mélange (Nauman et Buffham, 1983). Toutefois, l'effort de modélisation doit être adapté en fonction de l'utilisation du modèle. Comme l'objectif de la modélisation dans cette thèse est d'obtenir un modèle permettant de représenter adéquatement la dynamique du réacteur. Ce modèle peut donc être adéquat dans ce sens sans être la meilleure solution pour des objectifs de conception ou de mise à l'échelle du réacteur. De plus, l'utilisation d'un modèle à paramètres répartis pour la conception d'une loi de commande représente un net progrès dans le niveau de raffinement du modèle par rapport aux fonctions de transfert avec délai généralement utilisées.

1.2 Application à un réacteur de blanchiment

Cette section présente donc tout d'abord un survol du procédé de blanchiment et de l'état actuel des connaissances de la modélisation de ce procédé. Par la suite, des modèles à paramètres répartis d'un réacteur de blanchiment par dioxyde de chlore seront proposés.

1.2.1 Procédé de blanchiment

Le blanchiment est l'une des dernières étapes du processus de mise en pâte dans le procédé papetier (Biermann, 1996). Son objectif est de réduire la coloration écrue de la pâte afin d'obtenir un niveau de blancheur désiré. Cette coloration de la pâte est principalement causée par la lignine qui est un polymère naturel complexe. Ce polymère est composé principalement de coniféraldéhyde et de composés aromatiques similaires reliés par des liens aliphatiques. Ce composé se retrouve principalement entre les fibres du bois et dans les couches extérieures des fibres.

Les techniques de blanchiment varient fortement selon la technique utilisée pour obtenir la pâte. Dans le cas d'une pâte chimique, la pâte est obtenue par dégradation chimique de la lignine. Ainsi, le blanchiment de ce type de pâte consistera principalement à éliminer directement le contenu résiduel de lignine dans les fibres. Dans le cas d'une pâte mécanique, les fibres sont séparées mécaniquement à l'aide d'un raffineur. Dans ce cas, la stratégie de blanchiment est plutôt de modifier la structure de la lignine pour la décolorer.

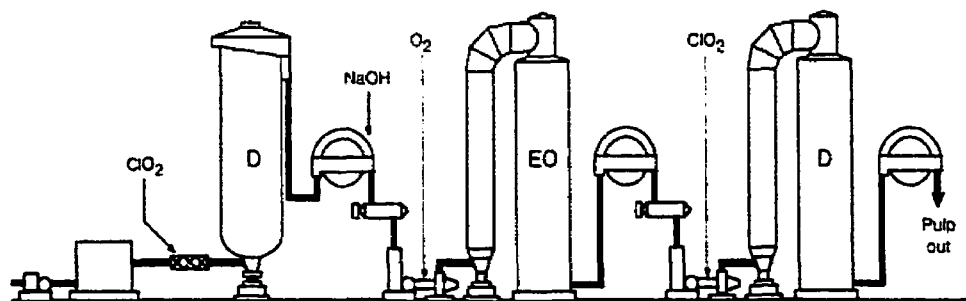


Figure 1.3 Séquence de blanchiment

Le blanchiment de la pâte n'est pas effectué dans une seule réaction. En fait, ce procédé est constitué d'une alternance d'étapes de réaction et de lavage. La figure

1.3 extraite de (Dence et Reeve, 1996) illustre l'aspect physique de ce procédé. Dans le cadre de ce travail, un seul réacteur de blanchiment sera considéré soit une tour de blanchiment au dioxyde de chlore. Ce choix a été effectué compte tenu de la disponibilité de données dans la littérature.

Le dioxyde de chlore est un puissant oxydant utilisé pour délignifier les fibres. Ce réactif permet de briser la structure de la lignine afin de former des molécules suffisamment petites pour qu'elles soient extraites de la fibre. Compte tenu de la complexité de la structure de la lignine, il est difficile d'établir un mécanisme réactionnel précis mais différents principes d'action ont toutefois été identifiés. Ainsi le chlore agit principalement par substitution et addition en milieu alcalin. Donc, si ces réactions se produisent sur la chaîne aliphatique, les macromolécules sont brisées en cet endroit. Si la réaction se produit sur un noyau aromatique, l'étape d'extraction en milieu alcalin qui suit permettra une solubilisation de la lignine par le remplacement des atomes de chlore par des groupements hydrophiles. Ainsi, l'action du dioxyde de chlore est double: éliminer immédiatement une portion de la lignine et préparer la solubilisation de lignine de l'étape suivante. Malheureusement, l'utilisation de ce réactif doit être faite de façon prudente car le dioxyde de chlore peut aussi attaquer les chaînes cellulosiques des fibres entraînant ainsi une dégradation des propriétés mécaniques des fibres (Gendron, 1997b).

1.2.2 Modèle à paramètres répartis

Un des avantages de la modélisation à paramètres répartis est de permettre l'identification distincte des paramètres hydrodynamiques et des termes cinétiques. Ainsi, une plus grande portabilité du modèle est assurée d'une mise en oeuvre à l'autre. Différents efforts de modélisation ont été mis en oeuvre en collaboration avec Nexfor. Compte tenu des ententes de confidentialité, ces résultats ne seront pas utilisés

dans cette thèse sauf dans le cas de l'hydrodynamique où des résultats normalisés sont présentés. Les paramètres du modèle présenté dans cette section sont donc basés sur les données disponibles dans la littérature.

1.2.2.1 Caractérisation de l'hydrodynamique

Dans le modèle piston dispersif, deux paramètres suffisent pour caractériser l'hydrodynamique du réacteur: le coefficient de Dispersion D et la vitesse superficielle v . En usine, l'identification de ces deux paramètres peut être réalisée à l'aide d'une étude de traceur. En effet, suite à une injection de traceur à l'entrée du réacteur, l'analyse de la présence du traceur à la sortie du réacteur permet d'obtenir la courbe de distribution des temps de séjours qui est en fait la réponse impulsionnelle du système. L'analyse de cette courbe une fois adimensionnée permet d'identifier le nombre de Peclet qui caractérise complètement l'hydrodynamique du réacteur dans le modèle piston dispersif. Cette approche permet de modéliser globalement les phénomènes de mélange dans le réacteur. Ainsi les phénomènes aux extrémités et aux parois sont négligés de même que les variations entre les phases.

Les résultats de modélisation de Pudlas et al. (1999) ont été utilisés pour obtenir une estimation du nombre de Peclet dans un réacteur de blanchiment au dioxyde de chlore. Selon les auteurs, le réacteur peut être adéquatement modélisé à l'aide d'un modèle mixte composé d'un réacteur parfaitement mélangé et d'un réacteur piston dans des proportions de 75% piston et 25% parfaitement mélangé. Une analyse comparative des réponses impulsionnelles de ce modèle mixte par rapport au modèle piston dispersif est effectuée pour déterminer le nombre de Peclet qui minimise l'erreur entre les deux réponses. La figure 1.4 montre la valeur absolue de l'erreur ainsi que l'erreur quadratique entre ces deux modèles pour différents nombres de Peclet.

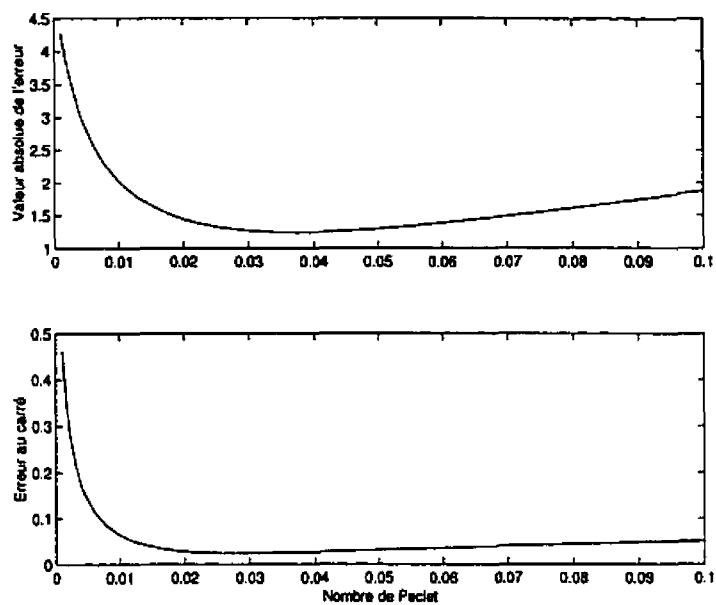


Figure 1.4 Erreur entre le modèle mixte et le modèle piston dispersif selon le nombre de Peclet

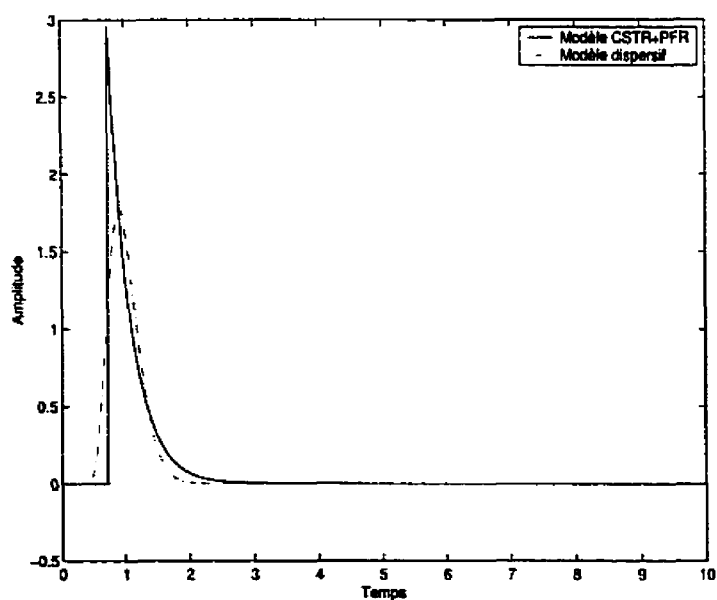


Figure 1.5 Comparaison entre le modèle mixte et le modèle piston dispersif pour $Pe = 0.003$

Un nombre de Peclet de 0.03 est donc choisi pour le modèle dispersif. La figure 1.5 montre l'adéquation entre le modèle mixte et le modèle piston dispersif pour ce choix. L'analyse de ce graphique peut mettre en doute l'utilisation d'un modèle piston dispersif pour le réacteur. En fait, l'absence de données brutes ne permet pas la caractérisation exacte du modèle. La figure 1.6 permet de bien apprécier la validité du modèle hydrodynamique par rapport à la réalité de l'usine. Cette figure présente les résultats d'une étude de traceur réalisée chez Nexfor sur un réacteur de blanchiment au dioxyde de chlore.

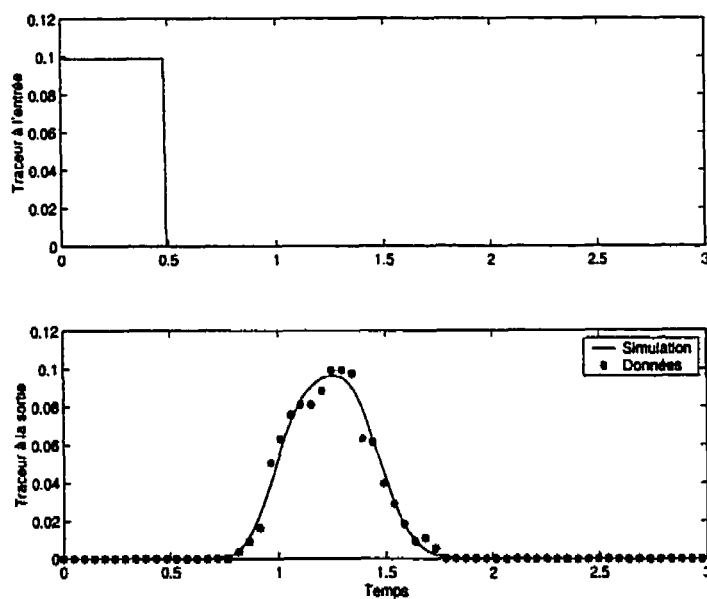


Figure 1.6 Étude de traceur chez Nexfor

Finalement, pour finir la caractérisation de l'hydrodynamique une vitesse superficielle $v = 1m/s$ et une longueur de réacteur de $\ell = 30m$ ont été choisies conformément au données de l'article de Savoie et Tessier (1997). Cette modélisation de l'hydrodynamique ne tient pas compte des variations de consistances, ainsi que du phénomène de renardage.

1.2.2.2 Caractérisation de la cinétique de réaction

L'étude des cinétiques de blanchiment a fait l'objet de plusieurs études en sciences du papier (Dence et Reeve, 1996). Peu de cinétiques basées sur des mécanismes réactionnels sont proposées compte tenu de la complexité et du nombre de réactions impliquées dans le mécanisme de blanchiment. Ni et al. (1995) ont toutefois proposé un modèle dynamique basé sur la deméthylation de la lignine. Par contre, ce type de modèle n'a pas encore été validé à l'échelle industrielle. Savoie et Tessier (Savoie et Tessier, 1997) présentent un modèle pour le blanchiment au dioxyde de chlore sous la forme d'équations algébriques. Leur modèle est basé sur des expériences en cuvée de la réaction de blanchiment. Ces données seront utilisées dans cette thèse pour obtenir une cinétique de réaction globale sous une forme standard soit de type:

$$r_L = k_L(LC)^\alpha \quad (1.8)$$

$$r_C = k_C(LC)^\beta \quad (1.9)$$

Le choix de cette structure de cinétique est arbitraire et suit la méthodologie employée par Gendron (Gendron, 1997a) chez Paprican. Afin de déterminer l'ordre des réactions, l'équation d'un réacteur en cuvée suivante est utilisée:

$$\frac{dL}{dt} = k_L(LC)^\alpha \quad (1.10)$$

$$\frac{dC}{dt} = k_C(LC)^\beta \quad (1.11)$$

Les équations suivantes sont obtenues en prenant le logarithme de chaque équation:

$$\log\left(\frac{dL}{dt}\right) = \log(k_L) + \alpha \log((LC)) \quad (1.12)$$

$$\log\left(\frac{dC}{dt}\right) = \log(k_C) + \beta \log((LC)) \quad (1.13)$$

Ainsi, en utilisant les données de l'article de Savoie et Tessier, il est possible de tracer les nuages de point de $\log(\frac{dL}{dt})$ en fonction de $\log((LC))$ et de $\log(\frac{dC}{dt})$ en fonction de $\log((LC))$. Par régression linéaire, il est alors possible d'identifier les ordres de réaction et les constantes cinétiques qui sont respectivement la pente et l'ordonnée à l'origine de la droite obtenue. Les paramètres suivants ont été obtenus:

$$\begin{aligned} k_L &= 0.002 & k_C &= 0.00054 \\ \alpha &= 2.20 & \beta &= 2.04 \end{aligned} \quad (1.14)$$

Compte tenu du peu de données disponibles et afin de simplifier le modèle les paramètres α et β obtenus sont modifiés pour obtenir des valeurs entières identiques. Par la suite, les constantes cinétiques seront ajustées par simulation afin d'obtenir la meilleure adéquation possible du modèle avec les données de base. La figure 1.9 présente les résultats de l'identification de la cinétique. Le modèle cinétique final est donc:

$$\tau_L = 0.0065(LC)^2 \quad (1.15)$$

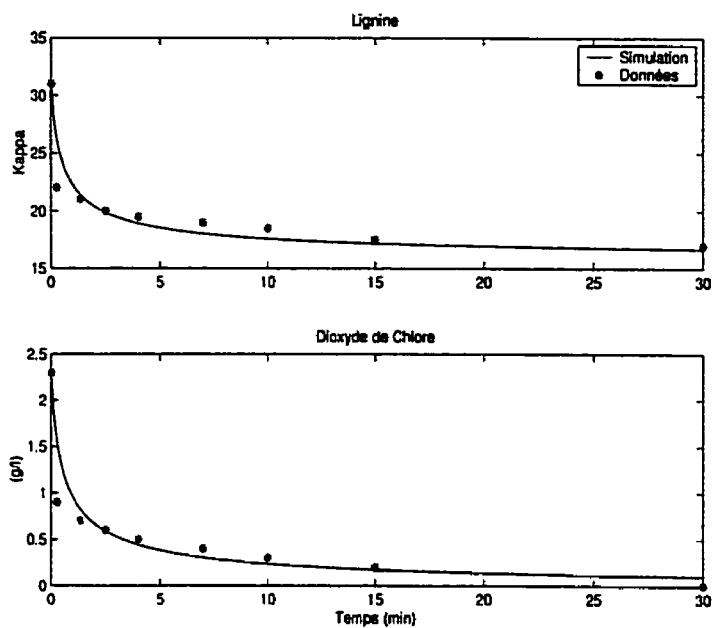
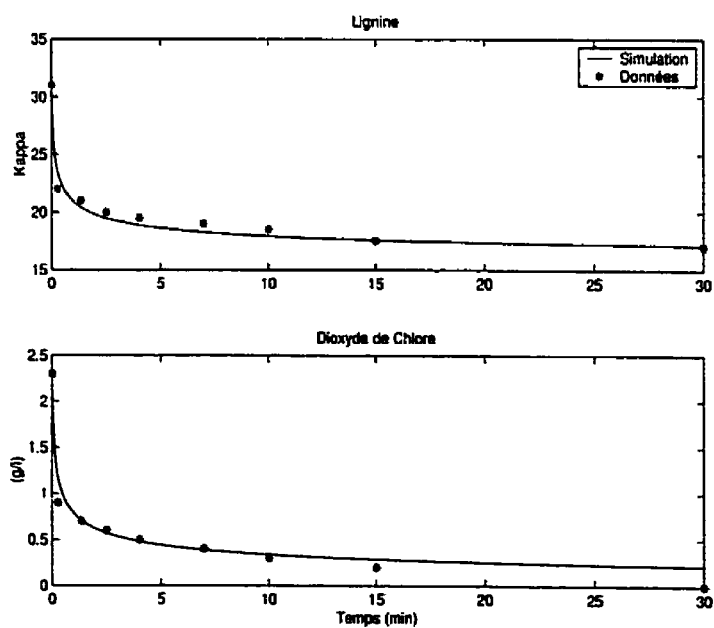
$$\tau_C = 0.001(LC)^2 \quad (1.16)$$

Afin d'analyser la robustesse des lois de commande présentées dans la seconde partie de cette thèse, deux autres modèles cinétiques ont été développés. Le premier de ces modèles est dérivé par simulation en considérant une cinétique de type $(LC)^3$. Dans ce cas, les constantes cinétiques suivantes ont été identifiées pour maximiser l'adéquation avec les données de base tel que présenté à la figure 1.8.

$$\tau_L = 0.0004(LC)^3 \quad (1.17)$$

$$\tau_C = 0.00006(LC)^3 \quad (1.18)$$

Finalement, un dernier modèle a été développé conformément aux observations

Figure 1.7 Terme cinétique de type L^2C^2 Figure 1.8 Terme cinétique de type L^3C^3

de Tessier et Savoie (1997). Ils proposent en fait que la cinétique de réaction soit séparée en deux: une première réaction instantanée à l'entrée du réacteur et une deuxième plus lente par la suite. Pour mettre en oeuvre cette proposition, le saut entre la concentration initiale et la première donnée des courbes de réaction en cuvée sera modélisée comme une réaction instantanée. Le reste des données est alors utilisé pour modéliser la réaction plus lente. Cette approche conduit donc à des sauts instantanés $L0 = 9Kappa$ et $C0 = 1.3g/l$ qui sont intégrés aux conditions frontières. La cinétique suivante forme donc un troisième modèle:

$$r_L = 0.035(LC) \quad (1.19)$$

$$r_C = 0.006(LC) \quad (1.20)$$

$$L0 = 9 \quad (1.21)$$

$$C0 = 1.3 \quad (1.22)$$

L'adéquation entre ce modèle et les données initiales est présenté à la figure 1.9.

1.2.2.3 Modèles utilisés

Les sections précédentes ont permis d'identifier tous les paramètres des modèles qui seront utilisés dans cette étude. Le modèle de base du réacteur qui sera utilisé est donc:

$$\frac{\partial C(z,t)}{\partial t} = -v \frac{\partial C(z,t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 C(z,t)}{\partial z^2} - k_C(LC)^\alpha \quad (1.23)$$

$$\frac{\partial L(z,t)}{\partial t} = -v \frac{\partial L(z,t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 L(z,t)}{\partial z^2} - k_L(LC)^\alpha \quad (1.24)$$

$$D \frac{\partial C(0,t)}{\partial z} = v(C(0,t) - C_{in}(t) - C0) \quad (1.25)$$

$$D \frac{\partial L(0,t)}{\partial z} = v(L(0,t) - L_{in}(t) - L0) \quad (1.26)$$

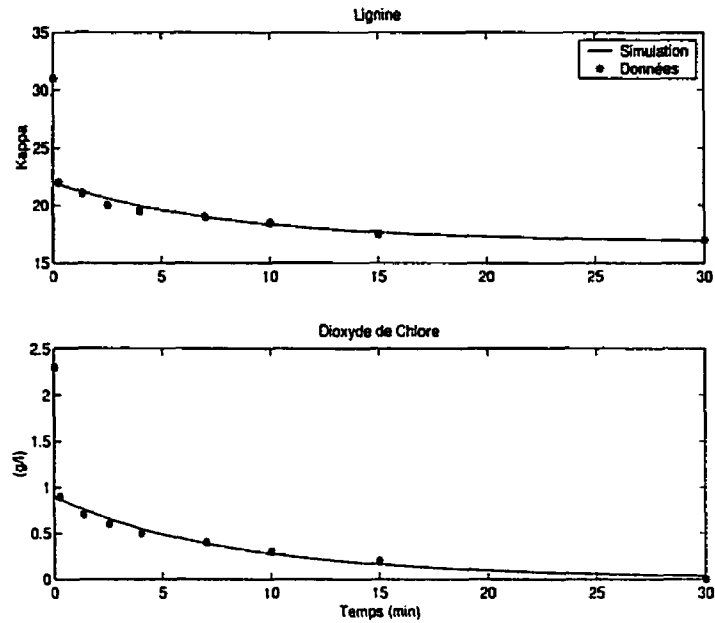


Figure 1.9 Terme cinétique de type LC

$$\frac{\partial C(\ell, t)}{\partial z} = 0 \quad (1.27)$$

$$\frac{\partial L(\ell, t)}{\partial z} = 0 \quad (1.28)$$

Le tableau 1.1 donne les différents paramètres nominaux utilisés dans le cas de chacune des variantes du modèle. Le modèle M1 sera utilisé pour la conception de toutes les lois de commandes alors que les modèles M2 et M3 seront utilisés pour des analyses de robustesse. Le modèle initialement proposé par Gendron (1997a) sera utilisé pour l'analyse des méthodes numériques au chapitre 2.

Tableau 1.1 Paramètres de modèles

Paramètre	M1	M2	M3	Gendron
α	2	3	1	3
k_C	0.001	0.00006	0.006	0.000055
k_L	0.0065	0.0004	0.035	0.00000057
$C0$	0	0	1.3	0
$L0$	0	0	9	0

CHAPITRE 2

RÉSOLUTION D'ÉQUATIONS AUX DÉRIVÉES PARTIELLES

Les modèles présentés au chapitre précédent sont relativement simples à obtenir. Il en va tout autrement de leur résolution. À ce jour, il n'existe pas de solution analytique pour les modèles non linéaires du réacteur de blanchiment présentés au chapitre 1. De plus, même la solution en régime permanent de ces systèmes d'équations ne peut être exprimée sous une forme analytique. Toutefois, dans le cas d'un système linéaire, la théorie des systèmes de dimension infinie fournit les outils pour résoudre les équations de type parabolique (Curtain et Zwart, 1995). Ainsi, la résolution analytique dans le cas d'un réacteur piston dispersif avec une cinétique de premier ordre a été présentée par Winkin, Dochain et Ligarius (2000).

La résolution numérique des bilans décrivant la dynamique d'un réacteur chimique n'est pas un sujet neuf, plusieurs ouvrages y sont consacrés tel (Varma et Morbidelli, 1997) et (Hanna et Sandall, 1995). Ce sujet demeure tout de même d'actualité car aucune des méthodes actuelles ne permet de solutionner l'ensemble des problèmes efficacement. En fait, les méthodes classiques doivent souvent être ajustées ou même modifiées pour tenir compte des particularités d'un problème donné. Dans le cas d'un système d'équations paraboliques, trois méthodes de base sont souvent utilisées : les différences finies (Gerald et Wheatley, 1990), la collocation orthogonale (Villadsen et Michelsen, 1978) et les éléments finis (Reddy, 1993). Ces méthodes permettent généralement d'obtenir des résultats adéquats. Par contre, elles sont peu adaptées pour une utilisation en ligne dans le cadre d'une stratégie de commande. Différentes heuristique sont aussi proposées dans la littérature tel les travaux de Patenkar (1984)

Ce chapitre présente donc les différentes méthodes utilisées pour résoudre des systèmes d'équations aux dérivées partielles non linéaires. La première partie présente les éléments disponibles pour la résolution analytique d'équations aux dérivées partielles paraboliques. La deuxième partie du chapitre présente les méthodes numériques classiques qui ont été utilisées pour la résolution en régime transitoire. Finalement, la dernière portion du chapitre présente une approche originale pour la solution d'un système faiblement dispersif, adaptée pour une utilisation en ligne.

2.1 Solution analytique

La solution analytique des systèmes à paramètres répartis peut être abordée à l'aide de la théorie des systèmes de dimension infinie. Ce cadre de travail a été bien établi pour les systèmes linéaires comme le présentent Curtain et Zwart (1995). Cette approche sera donc utilisée pour résoudre un exemple simple qui permettra de valider les approches numériques. Le système linéaire suivant est utilisé à cette fin:

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial x(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2} - kx(z, t) \quad (2.1)$$

$$D \frac{\partial x(0, t)}{\partial z} = v(x(0, t) - x_{in}(t)) \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial x(1, t)}{\partial z} = 0 \quad (2.3)$$

$$x(z, 0) = x_0(z) \quad (2.4)$$

Les paramètres de ce système sont:

$$\begin{aligned} v &= 0.05 \text{ m/min} & D &= 0.05 \text{ m}^2/\text{min}^2 \\ k &= 0.057 \text{ min}^{-1} & x_{in} &= 1 \text{ g/l} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Pour utiliser la théorie des systèmes de dimension infinie, ce système doit être formulé dans un espace d'état de Hilbert de dimension infinie. L'espace $H = L^2(0, 1)$ des fonctions réelles mesurables de carré intégrable, i.e. tel que $\int_0^1 \|f(z)\|^2 dz$, est donc choisi. Dans cet espace, le produit scalaire et la norme suivante sont définis pour toute fonction f, g appartenant à H :

$$\langle f, g \rangle_2 = \int_0^1 f(z)g(z)dz \quad (2.6)$$

$$\|f\|_2 = \sqrt{\langle f, f \rangle_2} \quad (2.7)$$

Comme le système linéaire est commandé par la frontière, il peut être écrit sous la forme du modèle de Fattorini (Fattorini, 1968) suivant:

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + Bx_{in} \quad (2.8)$$

$$A = D \frac{\partial^2}{\partial z^2} - v \frac{\partial}{\partial z} - k \quad (2.9)$$

$$B = v\delta(z) \quad (2.10)$$

Le domaine de définition de A inclut alors les conditions frontières de l'équation aux dérivées partielles initiale de la façon suivante:

$$\begin{aligned} D(A) = & \{x \in L^2(0, 1) : x, \frac{dx}{dz} \in L^2(0, 1) \text{ absolument continues,} \\ & \frac{d^2x}{dz^2} \in L^2(0, 1), \frac{dx}{dz}(1) = 0, D \frac{dx}{dz}(0) - vx = 0\} \end{aligned} \quad (2.11)$$

Winkin et al (2000) montrent que A est un opérateur spectral de Riesz et le générateur d'un semi-groupe C_0 exponentiellement stable $(T(t))_{t \geq 0}$ sur l'espace de Hilbert H . De plus, l'opérateur B est en pratique appliqué sur une mince couche d'épaisseur w ce qui permet de le considérer comme un opérateur borné. Ces deux propriétés du système de dimension infinie permettent de mettre en évidence l'existence d'une solution faible du système au problème de Cauchy qui est telle que:

$$x(t) = T(t)x_0 + \int_0^t T(t-s)Bu(s)ds \quad (2.12)$$

Comme A est un opérateur spectral de Riesz, le système admet une décomposition spectrale qui permet le calcul de la solution à partir des valeurs propres λ_n et des vecteurs propres ψ_n . Les équations suivantes permettent leurs calculs:

$$\lambda_n = -\frac{s_n^2 + v^2}{4D} - k \quad (2.13)$$

$$\text{avec } 0 < s_n < s_{n+1} \text{ solution de } \tan\left(\frac{L}{2D}s\right) = \frac{2vs}{s^2 - v^2} \quad (2.14)$$

$$\phi_n(z) = K_n e^{\frac{v}{2D}z} \left[\cos\left(\frac{s_n}{2D}z\right) + \frac{v}{s_n} \sin\left(\frac{s_n}{2D}z\right) \right] \quad (2.15)$$

$$\psi_n(z) = M_n \phi_n(L - z) \quad (2.16)$$

Les coefficients K_n et M_n sont choisis de sorte que $\|\phi_n\|_2 = 1$ et que $\int_0^L \phi_n \psi_n dz = 1$. À partir de la décomposition spectrale, l'application du semi-groupe $(T(t))_{t \geq 0}$ peut être exprimée sous la forme d'une suite infinie telle que:

$$(T(t)x_0)(z) = \sum_{n=1}^{\infty} [e^{\lambda_n t} \langle x_0, \psi_n \rangle \phi_n] \quad (2.17)$$

La solution du système linéaire peut maintenant être exprimée de la façon suivante:

$$x(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} [e^{\lambda_n t} \langle x_0, \psi_n \rangle \phi_n + \int_0^t e^{\lambda_n(t-s)} \langle Bu(s), \psi_n \rangle \phi_n ds] \quad (2.18)$$

L'avantage principal de la solution analytique est de fournir une solution relativement indépendante du maillage. En effet, aucune approximation fonction de l'espace n'est utilisée; la solution analytique est simplement calculée aux différents points choisis. La figure 2.1 présente la solution pour différents maillages pour $Pe = 1$ et 20 termes de série. Pour un maillage aussi faible que 5 mailles, la solution du profil du réacteur est adéquate à la sortie du réacteur mais présente de faibles variations par rapport aux autres définitions de maillage. Cette erreur peut être imputée au calcul de l'intégrale de normalisation des fonctions propres ψ_n .

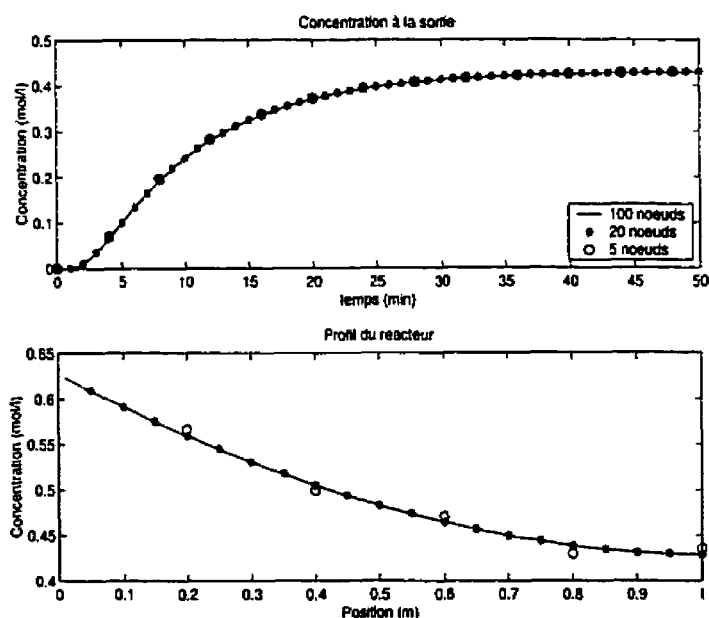


Figure 2.1 Méthode analytique: influence du maillage

La faisabilité de cette solution analytique par série dépend directement du nombre de Peclet. En effet, pour qu'une solution par série soit applicable, il doit être possible d'effectuer une troncature entre des groupes relativement distants de valeurs propres. Le tableau 2.1 présente les 15 premières valeurs propres pour différentes valeurs du nombre de Peclet. Comme la distance entre les valeurs propres devient plus ténue lorsque le nombre de Peclet augmente, il devient difficile de considérer

qu'un ensemble de valeurs propres domine le reste du spectre.

Tableau 2.1 Valeurs propres du système selon la dispersion

$Pe = 0.1$	$Pe = 1$	$Pe = 10$	$Pe = 100$
-0.10783	-0.11559	-0.20809	-1.31156
-5.09254	-0.65809	-0.29534	-1.32525
-19.8973	-2.14201	-0.46053	-1.34809
-44.5714	-4.61018	-0.71519	-1.38010
-79.1150	-8.06434	-1.06462	-1.42131
-123.528	-12.5062	-1.51096	-1.47176
-177.811	-17.9346	-2.05511	-1.53149
-241.963	-24.3499	-2.69748	-1.60055
-315.985	-31.7521	-3.43827	-1.67897
-399.877	-40.1413	-4.27759	-1.76681
-493.638	-49.5174	-5.21549	-1.86411
-597.269	-59.8805	-6.25202	-1.97091
-710.769	-71.2306	-7.38719	-2.08725
-834.139	-83.5676	-8.62103	-2.21317
-967.379	-96.8915	-9.95353	-2.34869
-1110.48	-111.202	-11.3847	-2.49384
-1263.46	-126.500	-12.9145	-2.64866
-1426.31	-142.785	-14.5431	-2.81317
-1599.03	-160.057	-16.2703	-2.98738
-1781.62	-178.315	-18.0962	-3.17131

Les figures 2.2 à 2.4 montrent les résultats de simulation pour différents nombres de Peclet. Pour $Pe = 1$, 10 termes seulement sont suffisants pour obtenir la solution du système alors que pour $Pe = 10$, 100 termes sont nécessaires. Dans le cas de $Pe = 100$ la solution diverge complètement même pour 500 termes. En pratique, la solution analytique est applicable seulement pour des systèmes fortement dispersifs. Elle sera donc utilisée pour valider les méthodes numériques pour $Pe = 1$.

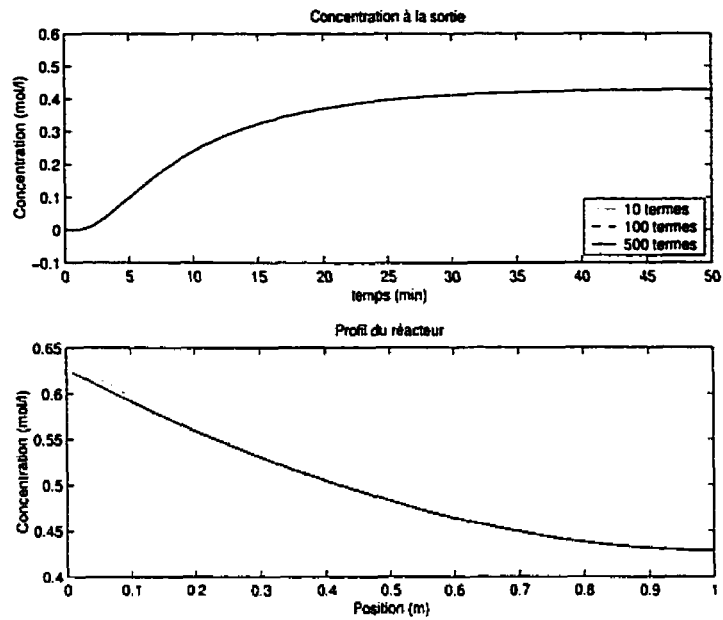


Figure 2.2 Méthode analytique: influence de n pour $Pe = 1$

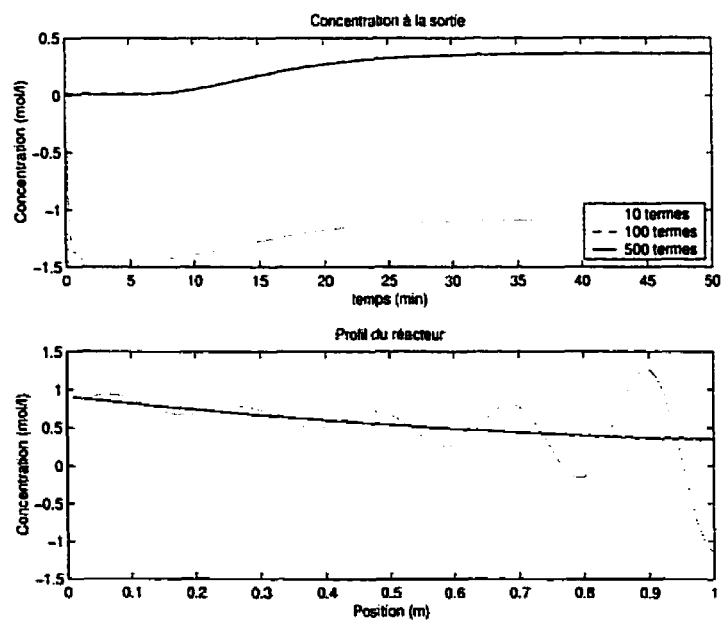


Figure 2.3 Méthode analytique: influence de n pour $Pe = 10$

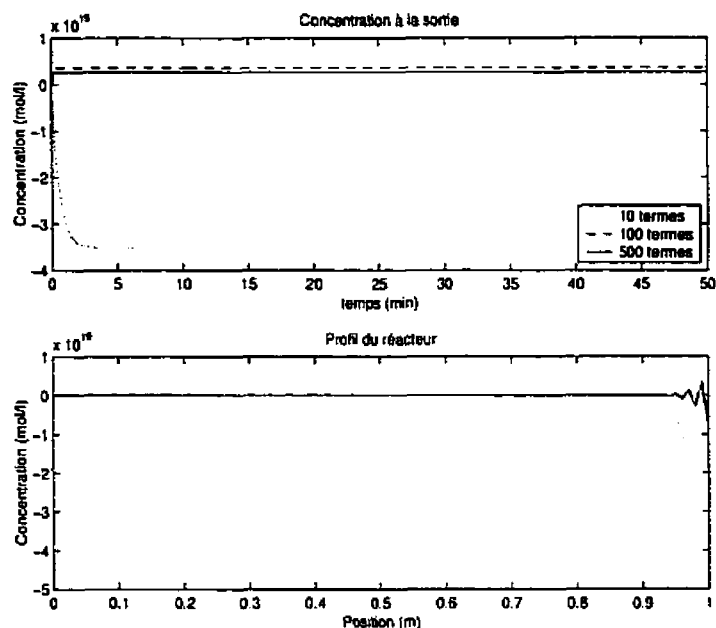


Figure 2.4 Méthode analytique: influence de n pour $Pe = 100$

2.2 Résolutions numériques classiques

La résolution numérique d'équations aux dérivées partielles fait appel à la segmentation spatiale et temporelle de la solution. Dans le cas des méthodes classiques de résolution, l'objectif est d'obtenir une approximation des EDP en équations différentielles ordinaires. Ces équations peuvent alors être résolues par d'autres méthodes numériques bien connues. Dans le cas de systèmes faiblement dispersifs, les systèmes d'EDO obtenus sont souvent mal conditionnés. Une méthode d'intégration de type estimation-correction sera donc utilisée dans tous les cas: la fonction ODE15s de Matlab. Cette fonction est basée sur l'algorithme de NDF (Numerical Differentiation Formula) et utilise un pas de temps variable.

2.2.1 Résolution par différences finies

L'approche des différences finies est basée sur l'utilisation des séries de Taylor pour obtenir des approximations par différences finies des dérivées partielles spatiales. Ces approximations peuvent être arrières, centrées ou avant selon la position des points utilisés pour réaliser l'approximation. Dans le cas d'un réacteur tubulaire, des différences arrières seront utilisées pour les termes de convection alors que des différences centrées sont utilisées pour les termes de dispersion. Ce choix est justifié par la nature même des phénomènes. En effet, l'évolution d'une variable lors de la convection est influencée par l'information qui précède le point alors que l'évolution causée par la dispersion dépend de l'information de chaque côté du point (Gerald et Wheatley, 1990). Une différence finie arrière du premier ordre est donc utilisée pour le terme convectif alors qu'une différence centrée du deuxième ordre est utilisée pour le terme dispersif. Dans ce schéma implicite, les expressions de ces approximations sont donc:

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} \approx \frac{x(z_i, t) - x(z_{i-1}, t)}{\Delta z} \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2} \approx \frac{x(z_{i+1}, t) - 2x(z_i, t) + x(z_{i-1}, t)}{(\Delta z)^2} \quad (2.20)$$

L'utilisation de différences d'ordre un et non d'ordre deux pour le terme de convection est justifiée car la condition frontière mixte à l'entrée permet difficilement l'utilisation d'une différence d'ordre deux.

2.2.1.1 Mise en oeuvre

L'application des approximations au modèle de Gendron permet d'obtenir les EDOs suivantes pour chaque point intérieur du maillage:

$$\begin{aligned} \frac{dL(z_i, t)}{dt} &= \left(\frac{D}{\Delta z^2} \right) L(z_{i+1}, t) + \left(\frac{v}{\Delta z} - \frac{2D}{\Delta z^2} \right) L(z_i, t) \\ &+ \left(-\frac{v}{\Delta z} + \frac{D}{\Delta z^2} \right) L(z_{i-1}, t) - k_L(L(z_i, t)C(z_i, t))^3 \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC(z_i, t)}{dt} &= \left(\frac{D}{\Delta z^2} \right) C(z_{i+1}, t) + \left(\frac{v}{\Delta z} - \frac{2D}{\Delta z^2} \right) C(z_i, t) \\ &+ \left(-\frac{v}{\Delta z} + \frac{D}{\Delta z^2} \right) C(z_{i-1}, t) - k_L(L(z_i, t)C(z_i, t))^3 \end{aligned} \quad (2.22)$$

Les points aux extrémités du maillage sont légèrement différents puisqu'ils permettent d'intégrer les conditions frontières qui doivent aussi être approximées par des différences finies. Les approximations suivantes des conditions limites sont donc utilisées:

$$D \frac{(L(z_0, t) - L(z_1, t))}{\Delta z} = v(L(z_0, t) - Lin(t)) \quad (2.23)$$

$$\frac{L(z_{N+1}, t) - L(z_N, t)}{\Delta z} = 0 \quad (2.24)$$

$$D \frac{(C(z_0, t) - C(z_1, t))}{\Delta z} = v(C(z_0, t) - Cin(t)) \quad (2.25)$$

$$\frac{C(z_{N+1}, t) - C(z_N, t)}{\Delta z} = 0 \quad (2.26)$$

Ce qui permet donc d'obtenir les équations suivantes pour les extrémités du maillage:

$$\begin{aligned}
\frac{dL(z_1, t)}{dt} &= \left(\frac{D}{\Delta z^2} \right) L(z_2, t) + \left(\frac{v}{\Delta z} - \frac{2D}{\Delta z^2} \right) L(z_1, t) \\
&+ \left(-\frac{v}{\Delta z} + \frac{D}{\Delta z^2} \right) \left(\frac{L(z_1, t) - vLin\Delta z}{1 - v\Delta z} \right) \\
&- k_L(L(z_1, t)C(z_1, t))^3
\end{aligned} \tag{2.27}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dC(z_1, t)}{dt} &= \left(\frac{D}{\Delta z^2} \right) C(z_2, t) + \left(\frac{v}{\Delta z} - \frac{2D}{\Delta z^2} \right) C(z_1, t) \\
&+ \left(-\frac{v}{\Delta z} + \frac{D}{\Delta z^2} \right) \left(\frac{C(z_1, t) - vCin\Delta z}{1 - v\Delta z} \right) \\
&- k_L(L(z_1, t)C(z_1, t))^3
\end{aligned} \tag{2.28}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dL(z_N, t)}{dt} &= \left(\frac{v}{\Delta z} - \frac{D}{\Delta z^2} \right) L(z_N, t) + \left(-\frac{v}{\Delta z} + \frac{D}{\Delta z^2} \right) L(z_{N-1}, t) \\
&- k_L(L(z_N, t)C(z_N, t))^3
\end{aligned} \tag{2.29}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dC(z_N, t)}{dt} &= \left(\frac{v}{\Delta z} - \frac{D}{\Delta z^2} \right) C(z_N, t) + \left(-\frac{v}{\Delta z} + \frac{D}{\Delta z^2} \right) C(z_{N-1}, t) \\
&- k_L(L(z_N, t)C(z_N, t))^3
\end{aligned} \tag{2.30}$$

2.2.1.2 Résultats

La méthode des différences finies a tout d'abord été appliquée au système linéaire pour des fins de validation. La figure 2.5 présente donc une comparaison de la résolution par la méthode analytique et des différences finies utilisées sur 100 mailles.

Comme les approximations sont basées sur des séries de Taylor, la définition du maillage est très importante dans la méthode des différences finies. Pour un Peclet faible, l'importance du maillage est moins grande comme le montre la figure 2.6. Par contre, pour un Peclet élevé, la figure 2.7 montre qu'un maillage trop faible induit deux types d'erreurs. La première est visible en régime permanent sur les courbes de profil dans le réacteur. En effet, un maillage réduit provoque un manque de précision dans les zones où la non-linéarité est très forte. L'augmentation du

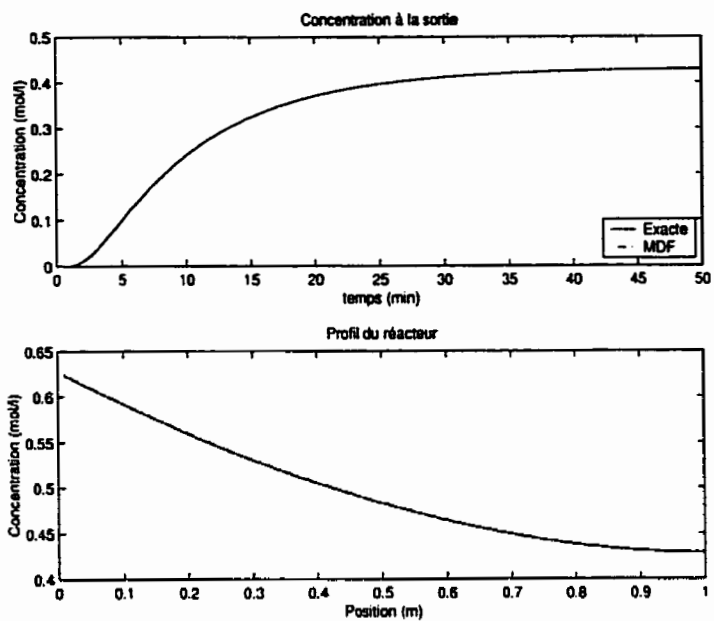


Figure 2.5 Validation de la méthode des différences finies

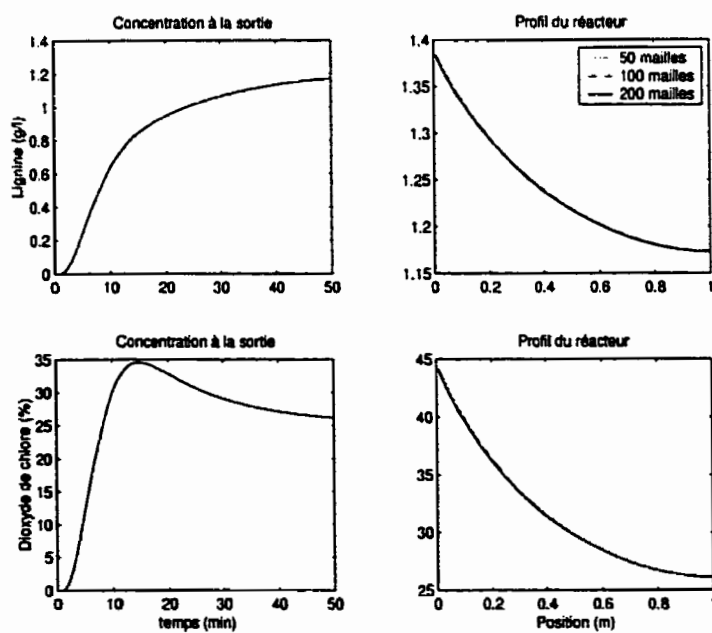


Figure 2.6 Différences finies: modèle de Gendron avec $Pe = 1$

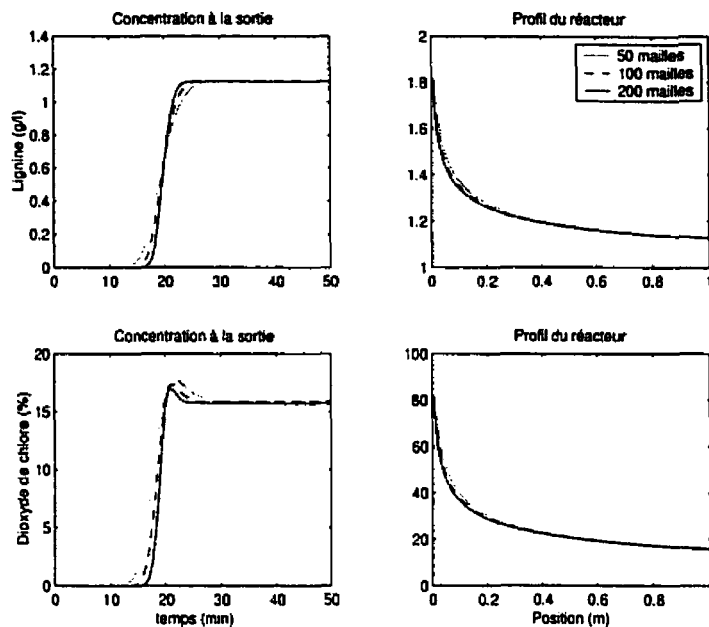


Figure 2.7 Différences finies: modèle de Gendron avec $Pe = 10^8$

raffinement du maillage permet par contre de converger vers la solution. L'autre type d'erreur est visible en transitoire sur les courbes de sortie du réacteur. En effet, un Peclet de 10^8 indique que le réacteur a un comportement piston. Toutefois, les courbes de la concentration de sortie sont lisses comme si un certain niveau de dispersion était présent. Ce phénomène est appelé diffusion numérique. L'impact de ce phénomène peut être réduit par l'utilisation d'un maillage plus fin, ce qui entraîne rapidement des temps de calcul énormes.

2.2.2 Résolution par collocation orthogonale

La collocation orthogonale fait partie de la famille des méthodes de résidus pondérés. Ces approches utilisent une approximation de la solution sous la forme suivante:

$$\tilde{x}(z, t) = \sum_{i=0}^{N+1} c_i(t) \beta_i(z) \quad (2.31)$$

Dans cette équation, les $\beta_i(z)$ sont des fonctions de base prédéterminées alors que les $c_i(t)$ seront choisis pour obtenir la meilleure solution possible. Cette approximation $\tilde{x}(z, t)$ est introduite dans les EDP originales afin de calculer les résidus R_Ω . Ces résidus seront utilisés comme mesure indirecte de l'erreur par rapport à la solution réelle du système. Le choix des $c_i(t)$ est donc fait en minimisant une pondération des résidus dans un espace fonctionnel déterminé par une base de fonction w_i ce qui correspond au problème suivant:

$$\int_{\Omega} R_\Omega w_i d\Omega = 0 \quad (2.32)$$

Le choix des fonctions de pondération w_i détermine le type de méthode des résidus pondérés qui est utilisé. Dans le cas de la collocation orthogonale, des fonctions de Dirac δ sont utilisées. Cette approche permet de minimiser la valeur des résidus en certains points du réacteur seulement. Elle a l'avantage de simplifier les calculs car l'équation (2.32) se ramène alors simplement à l'évaluation des résidus aux points de collocation. De plus, en utilisant des polynômes de Lagrange comme fonctions de base $\beta_i(z)$, il est possible de simplifier encore plus le problème. En effet, les polynômes orthogonaux ont la propriété suivante:

$$\beta_i(z = z_j) = \delta_{ij} \quad (2.33)$$

Ainsi, si les zéros de ces polynômes sont les points de collocations, la simplification suivante est possible:

$$\bar{x}(z_k, t) = \sum_{i=0}^{N+1} c_i(t) \beta_i(z_k) = c_k(t) \quad (2.34)$$

Ce qui permet d'obtenir l'approximation suivante des variables aux points de collocation:

$$\bar{x}(z_k, t) = \sum_{i=0}^{N+1} \beta_i(z_k) \bar{x}(z_k, t) \quad (2.35)$$

Aux points de collocation, il est donc maintenant possible d'approximer les dérivées partielles spatiales de la façon suivante :

$$\frac{\partial \bar{x}(z_k, t)}{\partial z} = \sum_{i=0}^{N+1} \frac{d\beta_i(z_k)}{dz} \bar{x}(z_k, t) \quad (2.36)$$

$$\frac{\partial^2 \bar{x}(z_k, t)}{\partial z^2} = \sum_{i=0}^{N+1} \frac{d^2 \beta_i(z_k)}{dz^2} \bar{x}(z_k, t) \quad (2.37)$$

2.2.2.1 Mise en oeuvre

Pour les N points de collocation, l'application des approximations au modèle de Gendron permet d'obtenir les EDO suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{dL(z_k, t)}{dt} &= -v \sum_{i=0}^{N+1} \frac{d\beta_i(z_k)}{dz} L(z_k, t) + D \sum_{i=0}^{N+1} \frac{d^2 \beta_i(z_k)}{dz^2} L(z_k, t) \\ &\quad - k_L (L(z_k, t) C(z_k, t))^3 \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC(z_k, t)}{dt} &= -v \sum_{i=0}^{N+1} \frac{d\beta_i(z_k)}{dz} C(z_k, t) + D \sum_{i=0}^{N+1} \frac{d^2 \beta_i(z_k)}{dz^2} C(z_k, t) \\ &\quad - k_L (L(z_k, t) C(z_k, t))^3 \end{aligned} \quad (2.39)$$

Les conditions frontières du modèle sont approximées ainsi:

$$D \sum_{i=0}^{N+1} \frac{d\beta_i(z_0)}{dz} L(z_0, t) = v(L(z_0, t) - Lin) \quad (2.40)$$

$$D \sum_{i=0}^{N+1} \frac{d\beta_i(z_0)}{dz} C(z_0, t) = v(C(z_0, t) - Cin) \quad (2.41)$$

$$\sum_{i=0}^{N+1} \frac{d\beta_i(L_{N+1})}{dz} l(z_{N+1}, t) = 0 \quad (2.42)$$

$$\sum_{i=0}^{N+1} \frac{d\beta_i(C_{N+1})}{dz} C(z_{N+1}, t) = 0 \quad (2.43)$$

Ce système de deux équations à deux inconnues permet donc d'obtenir la solution aux extrémités du réacteur. La formulation du système d'EDO par collocation orthogonale est donc formée de N équations différentielles et de 2 équations algébriques pour chaque EDP. Pour pouvoir utiliser cette approximation, N points de collocation doivent être déterminés. Le choix de ces points est crucial pour obtenir une solution de bonne qualité. Les zéros d'un polynôme de Jacobi P_N sont généralement utilisés et ils représentent un choix optimal selon Villadsen et Michelsen (1978). Ce polynôme peut être calculé à partir des équations suivantes où α et β sont des paramètres d'ajustement:

$$P_1 = 1 \quad (2.44)$$

$$P_N = (z - g_N)P_{N-1} + h_N P_{N-2} \quad (2.45)$$

$$g_1 = \frac{1 + \beta}{2 + \alpha + \beta} \quad (2.46)$$

$$g_N = \frac{1}{2} \left(\frac{(\alpha + \beta)(\alpha - \beta)}{(\alpha + \beta + 2N)(\alpha + \beta + 2N - 2)} \right) \quad (2.47)$$

$$h_1 = 0 \quad (2.48)$$

$$h_N = \frac{(N - 1)(N + \alpha - 1)(N + \beta - 1)(N + \alpha + \beta - 1)}{(2N + \alpha + \beta - 1)(2N + \alpha + \beta - 3)(2N + \alpha + \beta - 2)^2} \quad (2.49)$$

Finalement, à partir des zéros du polynôme de Jacobi, il est possible de construire les polynômes orthogonaux de Lagrange à partir du polynôme de départ suivant:

$$P_D = z(z - \ell)P_N \quad (2.50)$$

Les polynômes de Lagrange qui forment les fonctions de base $\beta_i(z)$ peuvent finalement être calculés à l'aide de la relation suivante:

$$\beta_i(z) = \frac{P_D}{(z - z_i) \frac{dP(z_i)}{dz}} \quad (2.51)$$

2.2.2.2 Résultats

Les paramètres N , α et β doivent être choisis pour ajuster la méthode de collocation. Intuitivement, le nombre de points N devrait être maximal pour obtenir une meilleure précision. Ce n'est pourtant pas le cas ici: un nombre de points trop élevé implique l'utilisation de polynômes de Lagrange de degré élevé ce qui peut causer rapidement d'importantes erreurs numériques lors de l'application. L'utilisation de moins de 20 points est donc impérative.

La position des points de collocation dans le réacteur est déterminée par les paramètres α et β qui doivent tous les deux être supérieurs à -1 . Il n'existe pas de règle analytique claire dictant le choix de ces paramètres. Par contre, certaines règles qualitatives peuvent être utilisées (Cho et Joseph, 1983). Ainsi, l'augmentation de α permet de rapprocher les points de l'entrée du réacteur, alors que l'augmentation de β les rapproche de la sortie. Bourrel (1996) et Tali-Maamar (1994) présentent tous deux une étude exhaustive de l'ajustement de ces paramètres par simulation. Récemment, Lefevre et al. (2000) ont présenté une analyse analytique à ce sujet. Dans le cas du réacteur de blanchiment, le choix de $\alpha = 1$ et $\beta = 1$ donne des

résultats adéquats aux conditions d'opération nominales.

La méthode de collocation orthogonale a tout d'abord été appliquée sur le système linéaire pour des fins de validation. La figure 2.8 présente donc une comparaison de la résolution par la méthode analytique et par la méthode de collocation orthogonale avec 12 points.

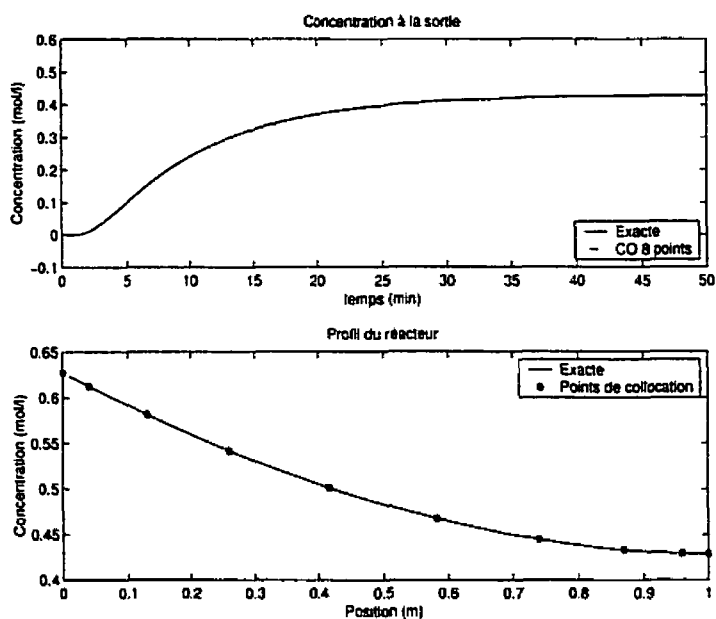


Figure 2.8 Validation de la méthode de collocation orthogonale

La figure 2.9 permet d'apprécier l'impact du nombre de points de collocation sur la résolution du modèle de Gendron. Ainsi, pour un trop faible nombre de points la solution présente des oscillations en amont et en aval de la transition dynamique. Par contre, l'utilisation de 12 points permet d'avoir une solution stable.

Le désavantage principal de la méthode de collocation est la sensibilité de l'ajustement des paramètres. La figure 2.10 présente une simulation pour laquelle le débit a été doublé et la dispersion réduite d'un ordre de grandeur. Dans ce cas, toutes les solu-

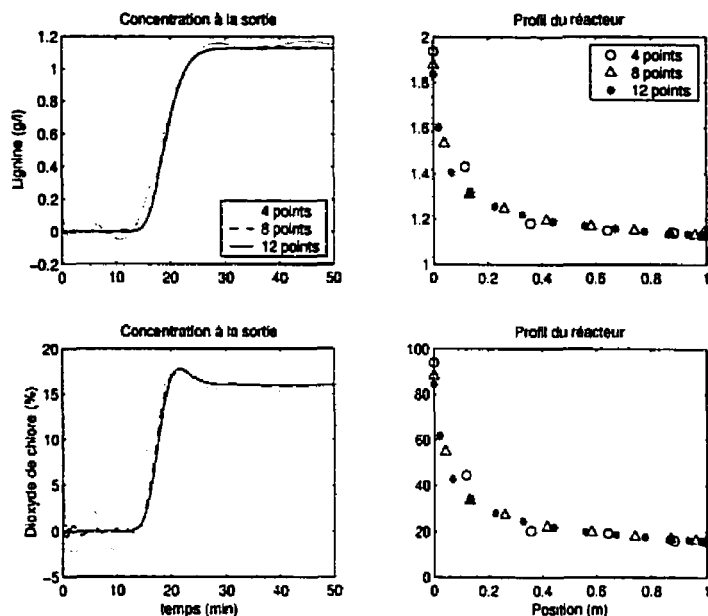


Figure 2.9 Influence du nombre de points de collocation

tions oscillent, ce qui indique clairement qu'un ajustement différent des paramètres serait nécessaire.

2.2.3 Résolution par éléments finis

Tout comme dans le cas des méthodes de résidus pondérés la solution par la méthode des éléments finis est construite à partir d'une approximation sous la forme d'une sommation de fonctions de base. Par contre, au lieu de considérer l'ensemble du domaine, la méthode des éléments finis utilise les approximations sur chacune des portions d'un maillage. Dans le cas de la méthode de Galerkin qui sera utilisée ici, les fonctions de pondération sont les mêmes que les fonctions de base.

La méthode des éléments finis utilise une formulation variationnelle de système d'EDP. Cette formulation est obtenue en multipliant les équations par une fonction

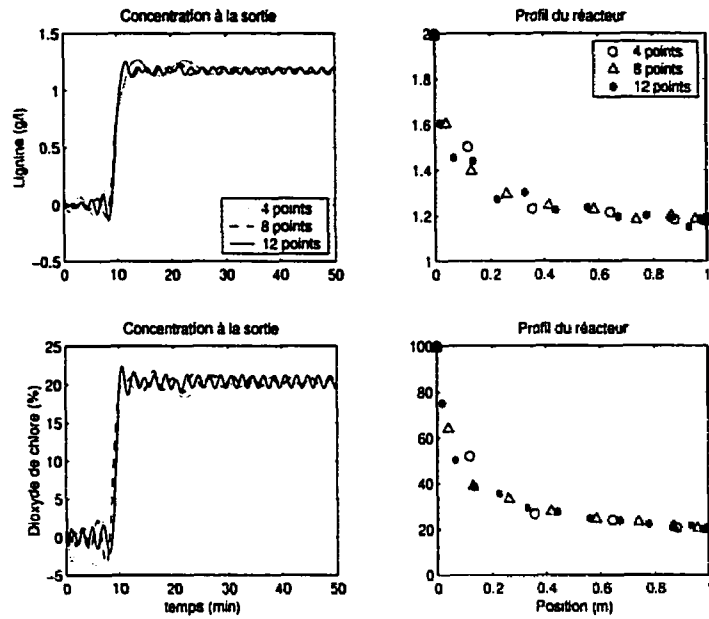


Figure 2.10 Collocation orthogonale: Modèle de Gendron avec $Pe = 100$

de pondération puis en intégrant le tout sur la longueur du réacteur de la façon suivante:

$$\int_0^\ell \phi_j(z) \left(\frac{\partial L(z,t)}{\partial t} + v \frac{\partial L(z,t)}{\partial z} - D \frac{\partial^2 L(z,t)}{\partial z^2} - k_L(L(z,t)C(z,t))^3 \right) dz = 0 \quad (2.52)$$

$$\int_0^\ell \phi_j(z) \left(\frac{\partial C(z,t)}{\partial t} + v \frac{\partial C(z,t)}{\partial z} - D \frac{\partial^2 C(z,t)}{\partial z^2} - k_C(L(z,t)C(z,t))^3 \right) dz = 0 \quad (2.53)$$

Le théorème de Green est, par la suite, appliqué sur ces équations. Cette opération permet d'obtenir une formulation faible du problème dans laquelle les contraintes de régularité sur les solutions sont amoindries. Cette approche permet aussi de faire apparaître explicitement les conditions frontières naturelles. La formulation

faible est donc:

$$\int_0^\ell \phi_j(z) \left(\frac{\partial L(z, t)}{\partial t} + v \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} + k_L(L(z, t)C(z, t))^3 \right) dz + \int_0^\ell D \frac{d\phi_j(z)}{dz} \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} dz - D\phi_j(z) \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \Big|_0^\ell = 0 \quad (2.54)$$

$$\int_0^\ell \phi_j(z) \left(\frac{\partial C(z, t)}{\partial t} + v \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} + k_C(L(z, t)C(z, t))^3 \right) dz + \int_0^\ell D \frac{d\phi_j(z)}{dz} \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} dz - D\phi_j(z) \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \Big|_0^\ell = 0 \quad (2.55)$$

Sur chacune des mailles, cette formulation demeure valable. Il est donc possible d'obtenir:

$$\int_{z_k}^{z_{k+1}} \phi_j(z) \left(\frac{\partial L(z, t)}{\partial t} + v \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} + k_L(L(z, t)C(z, t))^3 \right) dz + \int_{z_k}^{z_{k+1}} D \frac{d\phi_j(z)}{dz} \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} dz - D\phi_j(z) \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \Big|_{z_k}^{z_{k+1}} = 0 \quad (2.56)$$

$$\int_{z_k}^{z_{k+1}} \phi_j(z) \left(\frac{\partial C(z, t)}{\partial t} + v \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} + k_C(L(z, t)C(z, t))^3 \right) dz + \int_{z_k}^{z_{k+1}} D \frac{d\phi_j(z)}{dz} \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} dz - D\phi_j(z) \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \Big|_{z_k}^{z_{k+1}} = 0 \quad (2.57)$$

Les approximations suivantes des variables sont donc utilisées:

$$L(z, t) = \sum_{i=0}^N L(z_i, t) \phi_i(z) \quad (2.58)$$

$$C(z, t) = \sum_{i=0}^N C(z_i, t) \phi_i(z) \quad (2.59)$$

Ce qui permet d'obtenir les expressions suivantes:

$$\int_{z_k}^{z_{k+1}} \phi_j(z) \left(\sum_{i=0}^N \left(\phi_i(z) \frac{dL(z_i, t)}{dt} \right) + v \sum_{i=0}^N \left(L(z_i, t) \frac{d\phi_i(z)}{dz} \right) \right)$$

$$\begin{aligned}
& +k_L \left(\sum_{i=0}^N \phi_i(z)L(z_i, t) \right)^3 \left(\sum_{i=0}^N \phi_i(z)C(z_i, t) \right)^3 dz \\
& + \int_{z_k}^{z_{k+1}} D \frac{d\phi_j(z)}{dz} \sum_{i=0}^N \left(L(z_i, t) \frac{d\phi_i(z)}{dz} \right) dz - D\phi_j(z) \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \Big|_{z_k}^{z_{k+1}} = 0 \quad (2.60) \\
& \int_{z_k}^{z_{k+1}} \phi_j(z) \left(\sum_{i=0}^N \left(\phi_i(z) \frac{dC(z_i, t)}{dt} \right) + v \sum_{i=0}^N \left(C(z_i, t) \frac{d\phi_i(z)}{dz} \right) \right. \\
& \left. + k_C \left(\sum_{i=0}^N \phi_i(z)L(z_i, t) \right)^3 \left(\sum_{i=0}^N \phi_i(z)C(z_i, t) \right)^3 \right) dz \\
& + \int_{z_k}^{z_{k+1}} D \frac{d\phi_j(z)}{dz} \sum_{i=0}^N \left(C(z_i, t) \frac{d\phi_i(z)}{dz} \right) dz - D\phi_j(z) \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \Big|_{z_k}^{z_{k+1}} = 0 \\
\end{aligned} \quad (2.61)$$

La formulation complète sur une maille est donc composée des équations précédentes qui sont exprimées pour chacune des fonctions de pondération. En utilisant les propriétés des polynômes orthonormaux aux frontières, la formulation matricielle suivante est obtenue:

$$\begin{bmatrix} P & 0 \\ 0 & P \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{dL_1(t)}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dL_N(t)}{dt} \\ \frac{dC_1(t)}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dC_N(t)}{dt} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} Q & 0 \\ 0 & Q \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_1(t) \\ \vdots \\ L_N(t) \\ C_1(t) \\ \vdots \\ C_N(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_L R \\ k_C R \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -D\phi_j \frac{dL_1(t)}{dz} \Big|_z \\ 0 \\ D\phi_j \frac{dL_N(t)}{dz} \Big|_{z+1} \\ -D\phi_j \frac{dC_1(t)}{dz} \Big|_z \\ 0 \\ D\phi_j \frac{dC_N(t)}{dz} \Big|_{z+1} \end{bmatrix} \quad (2.62)$$

Pour simplifier les calculs des différentes intégrales, un changement de variable est appliqué. Ce changement permet de normaliser le calcul en considérant une maille unitaire. En considérant h la longueur de la maille originale, les équations suivantes permettent d'effectuer le changement de variable:

$$z = z_i + hx \quad (2.63)$$

$$dz = h dx \quad (2.64)$$

$$\phi(z) = \hat{\phi}(x) \quad (2.65)$$

$$\frac{d\phi(z)}{dz} = \frac{1}{h} \frac{d\hat{\phi}(x)}{dx} \quad (2.66)$$

Les éléments de l'équation matricielle sont donc maintenant:

$$P(j, i) = h \int_0^1 \hat{\phi}_j(x) \hat{\phi}_i(x) dx \quad (2.67)$$

$$Q(j, i) = \int_0^1 \left(v \hat{\phi}_j(x) \frac{d\hat{\phi}_i(x)}{dx} + \frac{D}{h} \frac{d\hat{\phi}_j(x)}{dx} \frac{d\hat{\phi}_i(x)}{dx} \right) dx \quad (2.68)$$

$$R(j) = -h \int_0^1 \hat{\phi}_j(z) \left(\sum_{i=0}^N \hat{\phi}_i(z) L(z_i, t) \right)^3 \left(\sum_{i=0}^N \hat{\phi}_i(z) C(z_i, t) \right)^3 dx \quad (2.69)$$

La formulation complète du problème est obtenue en assemblant l'équation matricielle de chacune des mailles dans une équation matricielle générale. Par la suite, il suffit d'intégrer directement les conditions frontières du problème pour obtenir un système d'équations différentielles ordinaires qui finalement est l'approximation par éléments finis du modèle de Gendron.

2.2.3.1 Résultats

La méthode des éléments finis a tout d'abord été appliquée sur le système linéaire pour des fins de validation. La figure 2.11 présente donc une comparaison de la résolution par la méthode analytique et par la méthode des éléments finis pour 20 éléments.

La méthode des éléments finis de type Galerkin peut être ajustée à l'aide de deux paramètres: l'ordre de l'approximation N et le nombre d'éléments. L'ordre d'approximation 1 a été utilisé car l'utilisation d'un ordre supérieur complique forte-

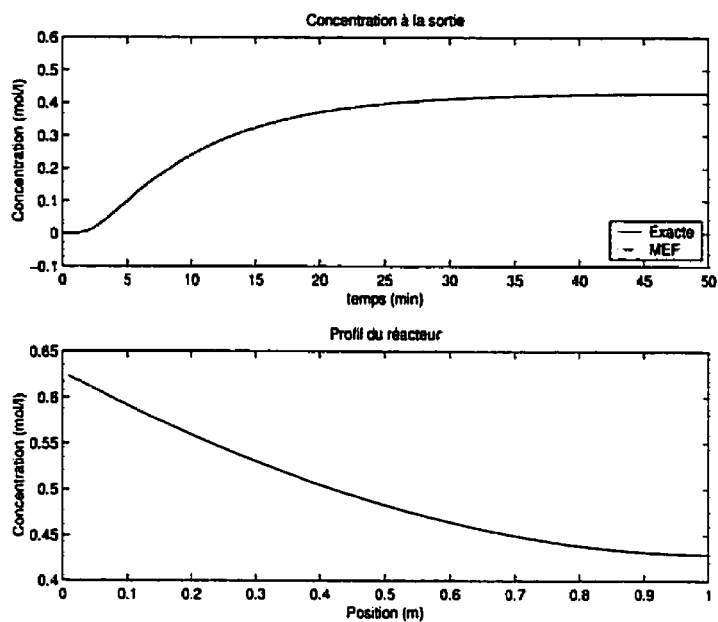


Figure 2.11 Validation de la méthode des éléments finis

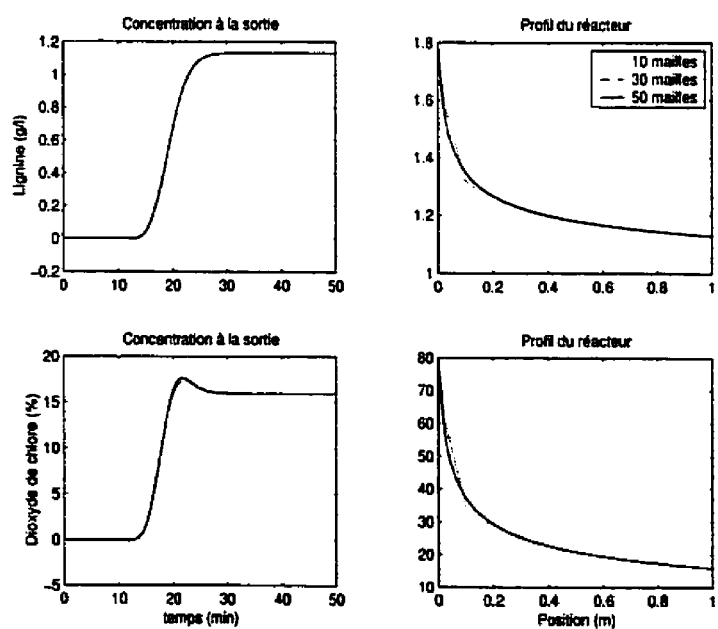


Figure 2.12 Éléments finis: Influence du maillage

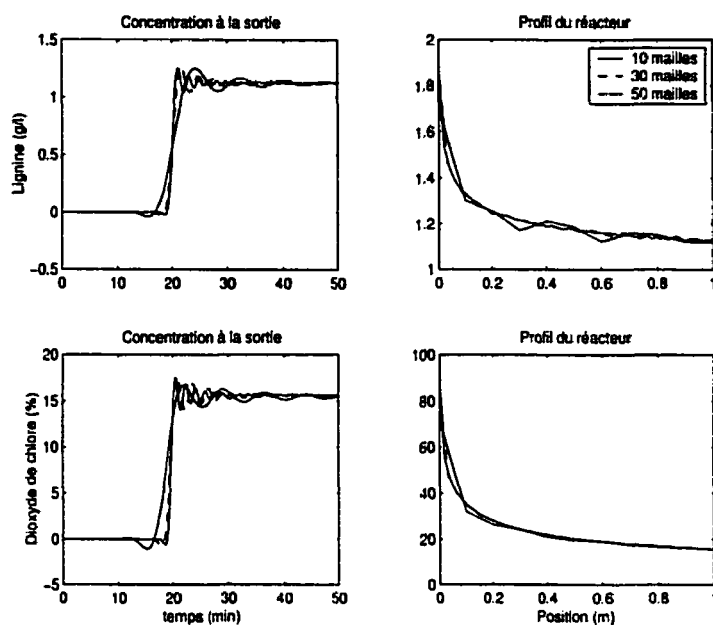


Figure 2.13 Éléments finis: Résolution pour $Pe = 2000$

ment l'expression des ODE compte tenu de l'ordre élevé de la cinétique de réaction. La figure 2.12 présente les résultats de simulations pour un Peclet de 20. Ainsi pour un système suffisamment dispersif, la méthode des éléments finis est suffisamment précise pour un nombre d'éléments inférieur à la méthode des différences finies. Par contre, la méthode des éléments finis ne permet pas de résoudre des problèmes où la convection est largement dominante. En effet, la figure 2.13, qui présente des résultats de simulation pour le cas d'un nombre de Peclet égal à 2000, montre bien que la réponse devient rapidement oscillatoire si la convection domine. De plus, pour un maillage trop faible, des problèmes de diffusion numérique apparaissent.

2.3 Méthode de résolution numérique par alternance

L'utilisation d'un modèle à paramètres répartis dans une stratégie de commande peut faire appel à sa résolution en ligne. Malheureusement, les méthodes numériques classiques sont peu adaptées à ce type d'utilisation. En effet, la priorité principale de ces algorithmes est d'obtenir la solution la plus précise possible. Ainsi, la robustesse à l'ensemble des variations industrielles et la rapidité d'exécution sont des objectifs secondaires. De plus, dans le cas de systèmes faiblement dispersifs, la résolution en transitoire est affectée par le problème de diffusion numérique. Ces observations motivent donc le développement d'un nouvel algorithme de simulation mieux adapté pour une utilisation dans un contexte industriel sur des systèmes faiblement dispersifs.

Cette section présente donc une méthode de résolution numérique conçue pour une application en ligne. La précision n'est donc pas la seule préoccupation considérée lors du développement de cet algorithme. En effet, la stabilité du schéma, la simplicité, le temps de calcul et la réponse en fréquence du modèle numérique sont aussi des facteurs importants. Cette nouvelle approche est basée sur l'organisation en séquence des phénomènes dans le temps plutôt que sur une formulation variationnelle. Ainsi, chacun des phénomènes, soit la convection, la diffusion et la réaction, est appliqué de façon successive à chaque pas de temps. Cette approche relativement simple permet d'obtenir un schéma numérique stable et rapide. De plus, la réponse en fréquence du modèle numérique est améliorée par le traitement indépendant de la convection.

2.3.1 Description de la méthode par alternance

Soit le système d'EDP général suivant qui décrit un réacteur tubulaire:

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial x(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2} - r(x(z, t)) = 0 \quad (2.70)$$

$$D \frac{\partial x(0, t)}{\partial z} = v(x(0, t) - x_{in}(t)) \quad (2.71)$$

$$\frac{\partial x(l, t)}{\partial z} = 0 \quad (2.72)$$

$$x(z, 0) = x_0(z) \quad (2.73)$$

Les méthodes numériques classiques approchent la résolution de cette équation en utilisant des approximations dans l'espace ce qui permet d'obtenir des équations différentielles qui seront, par la suite, résolues. La méthode de résolution par alternance utilise plutôt le comportement dans le temps du système comme cadre de travail. Dans un système décrit par des équations paraboliques, trois phénomènes se produisent à chaque pas de temps: la convection, la dispersion et la réaction. Si le pas de temps est suffisamment petit, il est possible de considérer que chacun des phénomènes est indépendant et qu'ils se produisent successivement. De cette façon, il est possible de formuler simplement les équations et les conditions frontières de chacun des sous-systèmes ainsi que de les résoudre. Cette vision est à la base de l'algorithme de la méthode par alternance (MA) qui consiste donc à passer la solution du pas de temps précédant à travers des sous-systèmes de convection, de diffusion et de réaction afin obtenir la réponse au pas de temps actuel, la solution d'un sous-système devenant la condition initiale du prochain sous-système à chaque transition. Mathématiquement, cet algorithme peut être décrit de la façon suivante:

1. Soit $x_0(z)$ le profil initial du réacteur
2. Le profil initial est utilisé comme condition initiale du sous-système de con-

vection suivant:

$$\frac{\partial x^*(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial x^*(z, t)}{\partial z} \quad (2.74)$$

$$x^*(0, t) = x_{in}(t) \quad (2.75)$$

$$x^*(z, t) = x_0(z) \quad (2.76)$$

Ce sous-système est résolu pour un pas de temps Δt .

3. Le profil obtenu après la résolution de l'étape de convection soit $x_{\Delta t}^*(z) = x^*(z, \Delta t)$ devient la condition initiale du sous-système de diffusion suivant:

$$\frac{\partial x^{**}(z, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 x^{**}(z, t)}{\partial z^2} \quad (2.77)$$

$$\frac{\partial x^{**}(0, t)}{\partial z} = 0 \quad (2.78)$$

$$\frac{\partial x^{**}(l, t)}{\partial z} = 0 \quad (2.79)$$

$$x^{**}(z, 0) = x_{\Delta t}^*(z) \quad (2.80)$$

Ce sous-système est résolu pour un pas de temps Δt .

4. Le profil obtenu après la résolution de l'étape de diffusion soit $x_{\Delta t}^{**} = x^{**}(z, \Delta t)$ devient la condition initiale du sous-système de réaction suivant:

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = -r(x(z, t)) \quad (2.81)$$

$$x(z, 0) = x_{\Delta t}^{**}(z) \quad (2.82)$$

Ce sous-système est résolu pour un pas de temps Δt .

Cet algorithme permet donc d'obtenir la solution du problème de base pour un pas de temps Δt . Ce processus peut être répété pour toute la durée de la simulation. Ainsi, à chaque pas de temps, le contenu du réacteur est poussé vers la sortie du réacteur selon la vitesse superficielle. La dispersion est ensuite appliquée sur tout le réacteur et finalement, la réaction est réalisée sur chacun des points selon les concentrations en présence. Cette approche peut être utilisée aussi bien sur les équations hyperboliques que paraboliques sans modification de la définition des conditions frontières et sans modifier un paramètre de réglage quelconque en fonction du nombre de Peclet.

2.3.2 Résolution des sous-problèmes

Pour un pas de temps Δt , N éléments de dimension Δz sont utilisés pour définir le maillage. Les discrétisations suivantes sont donc utilisées:

$$\Delta z = l/N \quad (2.83)$$

$$\Delta t = \Delta z/v \quad (2.84)$$

Selon ce choix, la précision du maillage détermine le raffinement de la solution dans l'espace et le temps. Cette approche impose l'utilisation d'un maillage régulier mais l'utilisation d'un maillage asymétrique peut aussi être envisagée. De plus, le pas de temps peut être modifié directement pour tenir compte d'un débit variable.

La résolution du sous-système de convection est la partie la plus simple de l'algorithme car il s'agit d'un simple système avec délai. Donc, à chaque pas de temps, il suf-

fit de faire progresser les concentrations d'un pas vers la sortie dans le maillage. Ainsi, la concentration qui était à la sortie est éliminée et la concentration présente à l'entrée du réacteur est ajoutée sur le premier noeud du maillage.

Le sous-système de dispersion peut être résolu de différentes façons. En effet, la méthode des différences finies et celle des éléments finis sont toutes deux efficaces et stables pour résoudre ce type d'équation. Les différences finies ont l'avantage d'une formulation plus simple alors que les éléments finis traitent plus efficacement les conditions frontière de Neumann. Dans le cas de ces deux approches, le problème de dispersion se ramène à:

$$\frac{\partial x^{**}(z, t)}{\partial t} = Mx^{**}(z, t) \quad (2.85)$$

$$x^{**}(z, 0) = x_{\Delta t}^*(z) \quad (2.86)$$

Pour les résultats de cette thèse, la méthode des différences finies est utilisée avec la définition de différence centrée suivante:

$$\frac{\partial^2 x^{**}(z, t)}{\partial z^2} \approx D \frac{x^{**}(z_{i+1}, t) - 2x^{**}(z_i, t) + x^{**}(z_{i-1}, t)}{(\Delta z)^2} \quad (2.87)$$

Le système matriciel suivant est donc obtenu:

$$\begin{pmatrix} \dot{x}^{**}(\Delta z, t) \\ \dot{x}^{**}(2\Delta z, t) \\ \dot{x}^{**}(3\Delta z, t) \\ \vdots \\ \dot{x}^{**}(N\Delta z, t) \end{pmatrix} = \frac{D}{(\Delta z)^2} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & -0 & \dots & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^{**}(\Delta z, t_i) \\ x^{**}(2\Delta z, t_i) \\ x^{**}(3\Delta z, t_i) \\ \vdots \\ x^{**}(N\Delta z, t_i) \end{pmatrix} \quad (2.88)$$

Comme ce système est linéaire, il peut être solutionné pour un Δt donné en utilisant

la matrice de transition suivante (Rugh, 1993):

$$x^{**}(z, \Delta t) = \exp\left(-\frac{D}{(\Delta z)^2} M * \Delta t\right) * x^{**}(z, 0) \quad (2.89)$$

Le calcul de la matrice exponentielle peut être fait au préalable. La résolution du sous-système de dispersion se ramène donc à une simple multiplication entre une matrice et un vecteur.

La résolution du sous-système de réaction est généralement la portion la plus lente de l'algorithme de résolution par alternance. En effet, l'équation de réaction doit être résolue à chaque point du maillage ce qui génère un nombre important d'EDO indépendantes. Ces équations peuvent être résolues par séparation de variable de la façon suivante:

$$\int_{x_0}^x \frac{1}{-r(x(z, t))} dx = \int_0^{\Delta t} dt \quad (2.90)$$

Cette approche permet d'obtenir la relation:

$$f(x, x_0, \Delta t) = 0 \quad (2.91)$$

S'il est possible d'exprimer x comme une fonction de t et de x_0 , la solution est alors simple et rapide. Par contre, si la réaction implique plusieurs réactifs et des cinétiques non linéaires, cette approche risque de mener à une relation transcendante insoluble analytiquement. Dans ce cas, deux approches sont possibles: résoudre numériquement cette relation ou résoudre directement les équations différentielles.

L'algorithme de résolution par alternance est donc simple à mettre en oeuvre et plusieurs variations peuvent être mises en place pour raffiner la solution selon le type de problème. La résolution ne nécessite pas une attention particulière au nombre de Peclet. Ainsi cette approche est bien adaptée aux procédés pour lesquels les conditions d'opération sont variables. Par exemple, il est possible de simuler en

utilisant cette approche un système dans lequel le terme dispersif est négligeable ou non selon les conditions d'opération.

2.3.3 Analyse de la méthode par alternance

Pour valider la méthode par alternance, le système linéaire et sa solution analytique seront encore une fois utilisés. De plus, la méthode des différences finis (MDF) sera utilisée pour une validation à des nombres de Peclet élevés. Un maillage de 100 noeuds est utilisé pour toutes les simulations et des nombre de Peclets de 1, 10^4 et 10^8 seront considérés.

La simulation selon la méthode par alternance est réalisée selon l'algorithme présenté précédemment et le code de simulation est présenté à la figure 2.14. Comme la cinétique est de premier ordre, le sous-système de réaction peut être solutionné à l'aide de la solution analytique ci-dessous:

$$x(t, z) = \exp(-k * \Delta t) * x_0^{**}(z) \quad (2.92)$$

Les figures 2.15-2.17 montrent la concentration à la sortie et le profil du réacteur obtenus lors de la résolution du système linéaire pour différents nombres de Peclet et différents maillages. Dans le cas de $Pe = 1$ la solution analytique est aussi présentée. Une première analyse des résultats montre que toutes les méthodes numériques permettent d'avoir une idée générale du comportement du réacteur. Toutefois deux problèmes subsistent: la méthode des différences finies représente difficilement un réacteur piston et la méthode par alternance commet une erreur sur le profil à l'entrée dans le cas de réacteur fortement dispersif.

Dans le cas d'un réacteur piston, la MA donne la réponse exacte tout comme la

```

% Initialisation
v = 0.05;      % superficial velocity
k = 0.057;    % kinetic parameter
D = 0.05;     % Dispersion for Pe=1
N = 100;      % Mesh definition
dz = 1/N;     % Space step
dt = h/v;     % Time step
t = 0:dt:50;  % Time span

% Results initialisation

result = zeros(N, length(t));

% Input

x_in = ones(1, length(t));

% Diffusion matrix calculation

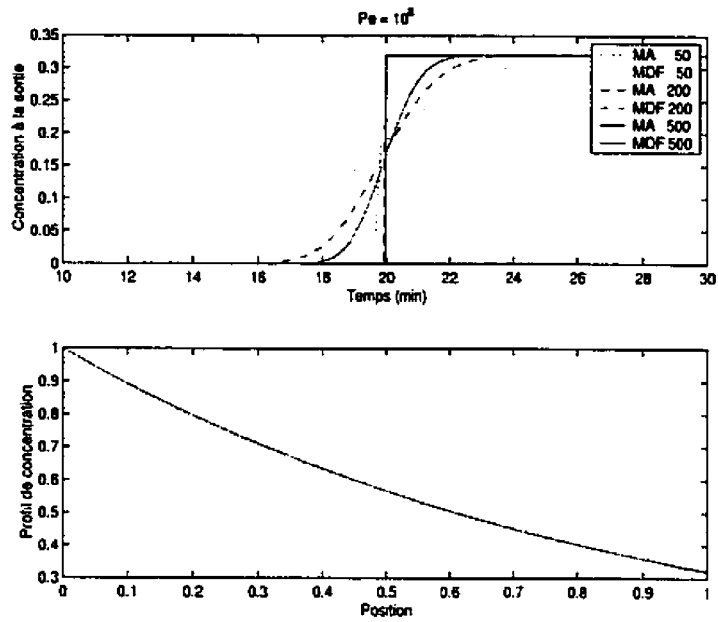
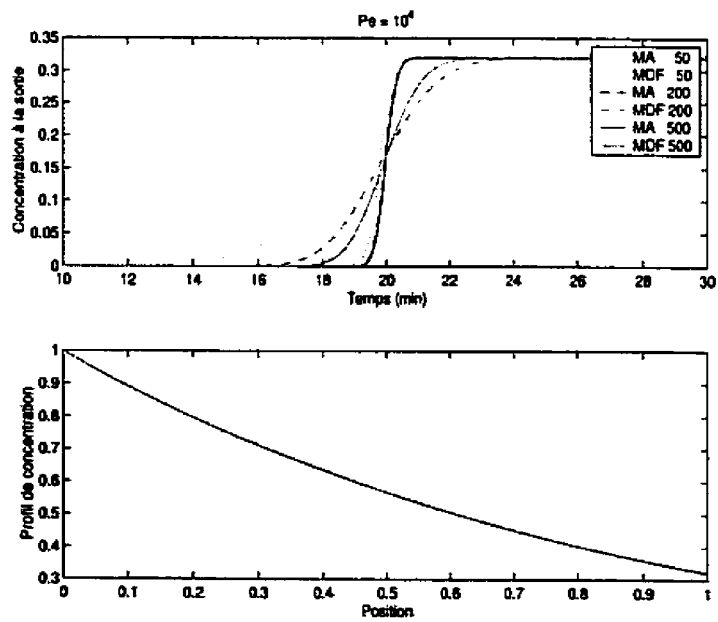
matexp = -2/dz^2*eye(N);
for i=1:N-1
    matexp(i, i+1)=1/dz^2;
    matexp(i+1, i)=1/dz^2;
end;
matexp(1,1)= -1/dz^2;
matexp(N,N)= -1/dz^2;
matexp = expm(matexp*D*dt);

% Simulation loop

for i=2:length(t)
% Convection
    result(:, i) = [Lin(i-1); result(1:N-1, i-1)];
% Reaction
    result(:, i) = exp(-kl*dt).* result(:, i);
% Diffusion
    result(:, i) = matexp*result(:, i);
end;

```

Figure 2.14 Programme Matlab[©] dans le cas linéaire

Figure 2.15 Solution du système linéaire pour $Pe = 10^8$ Figure 2.16 Solution du système linéaire pour $Pe = 10^4$

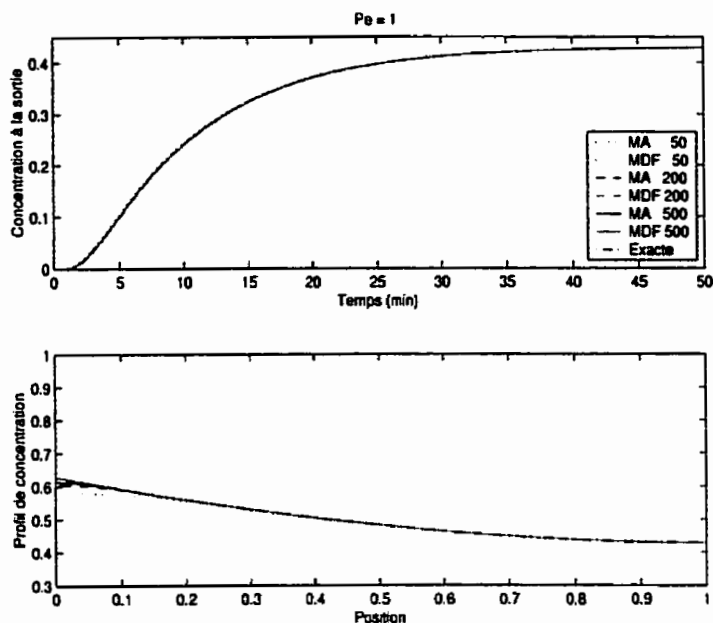


Figure 2.17 Solution du système linéaire pour $Pe = 1$

méthode des caractéristiques car le problème est dégénéré au cas hyperbolique. Par contre, la MDF induit une diffusion numérique dans les cas de $Pe = 10^8$ et $Pe = 10^4$ tel que le montrent les figures 2.15 and 2.16 . Par sa formulation, la MDF ne peut tenir compte des variations abruptes des entrées car elle correspond en fait au modèle bien connu des réacteurs parfaitement mélangés en série. La MDF génère des équations du type suivant:

$$\frac{\partial A(t, z_i)}{\partial t} \approx D \frac{A(t, z_{i+1}) - 2A(t, z_i) + A(t, z_{i-1}))}{(\Delta z)^2} - v \frac{A(t, z_i) - A(t, z_{i-1}))}{\Delta z} - kA(t, z) \quad (2.93)$$

L'application de la transformée de Laplace à cette équation permet d'obtenir l'équation

suivante:

$$\begin{aligned}
 A(s, z_i) = & \frac{D/(\Delta z)^2 + v/\Delta z}{s + 2D/(\Delta z)^2 + v/\Delta z + k} A(s, z_{i-1}) \\
 & + \frac{D/(\Delta z)^2}{s + 2D/(\Delta z)^2 + v/\Delta z + k} A(s, z_{i+1}) \quad (2.94)
 \end{aligned}$$

Cette équation permet de voir que chaque portion du maillage agit en fait comme un filtre passe-bas dont la fréquence de coupure est fonction des éléments suivants: le facteur de dispersion, la vitesse superficielle, la constante cinétique et la définition du maillage. Pour mettre ce phénomène en évidence, la figure 2.18 présente les diagrammes de Bode des approximations par MA et MDF pour différents maillages. Pour un nombre de Peclet faible, les réponses en fréquence sont similaires car le facteur de dispersion est dominant et limite donc la largeur de bande. Par contre, pour un nombre de Peclet élevé, c'est l'approximation numérique qui limite la largeur de bande dans le cas de la MDF. Pour la MA, la définition du maillage détermine directement la largeur de bande.

L'analyse fréquentielle permet aussi de voir que le temps de simulation peut être relié directement au contenu fréquentiel de l'entrée du réacteur comme le montre la figure 2.19. Ainsi, le temps de simulation par la méthode MA ne varie pas en fonction de la fréquence de l'entrée car il s'agit d'une méthode à pas fixe. Par contre, le temps de résolution par la MDF croît exponentiellement avec la fréquence de l'entrée. Cette observation peut s'expliquer simplement par l'utilisation d'une méthode à pas variable d'intégration des ODE. Cette utilisation est essentielle pour assurer la stabilité du schéma numérique. Finalement, le temps de simulation pour la méthode MA est aussi indépendant du nombre de Peclet.

Dans le cas d'un nombre de Peclet élevé, les figures 2.15-2.16 montrent que les solutions obtenues par la MDF sont toujours légèrement plus élevées que celles

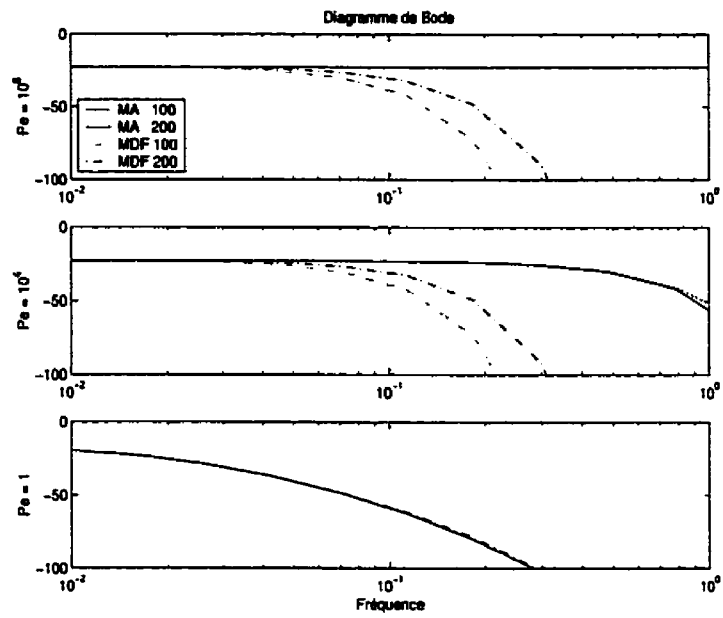


Figure 2.18 Analyse en fréquence

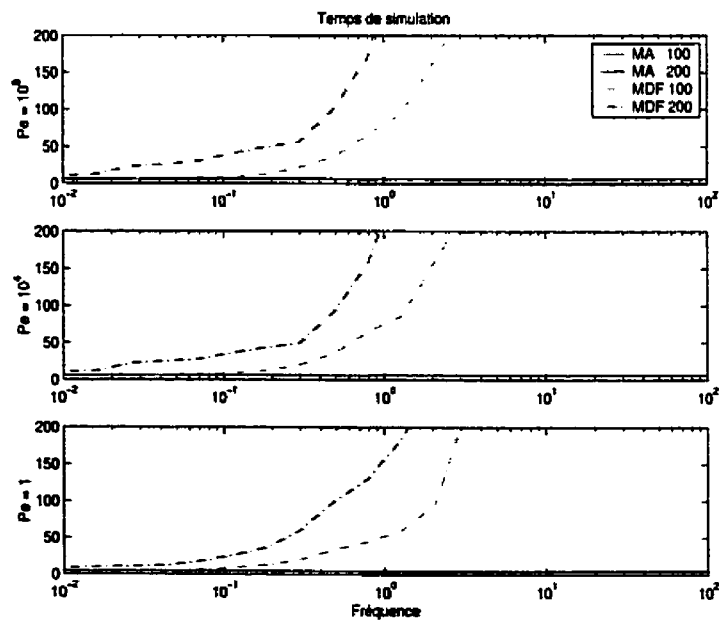


Figure 2.19 Analyse du temps de simulation

obtenues par la MA. En fait, la MDF conduit à une erreur en régime permanent. Il est possible de le démontrer en analysant le cas d'un réacteur piston en régime permanent comme suit:

$$\frac{dx(z)}{dz} = -\frac{k}{v}x(z) \quad (2.95)$$

La solution analytique de cette équation est:

$$x(z) = e^{az}x(0), \quad a = \frac{k}{v} \quad (2.96)$$

En utilisant la MDF la solution est plutôt:

$$x(z) = (1 - az/n)^n x(0) \quad (2.97)$$

Il est possible d'obtenir l'expression analytique de l'erreur entre les deux solutions en utilisant les développements en série suivant:

$$e^{-az} = 1 + \frac{-az}{1!} + \frac{-az^2}{2!} + \frac{-az^3}{3!} + \dots$$

$$(1 - az/n)^n = 1 + \frac{-az}{1!} + \frac{-az^2}{2!} \frac{(n-1)}{n} \quad (2.98)$$

$$+ \frac{-az^3}{3!} \frac{(n-1)(n-2)}{n^2} + \dots \quad (2.99)$$

L'équation d'erreur est donc:

$$error = \sum_{b=2}^n \frac{(-az)^b}{b!} \left(1 - \frac{n!}{n^b(n-b)!} \right) + \sum_{b=n+1}^{\infty} \frac{-az^b}{b!} \quad (2.100)$$

Cette équation d'erreur est une fonction monotone décroissante de n . Elle permet donc d'expliquer la surestimation systématique de la valeur en régime permanent de la MDF par rapport à la MA pour des nombres de Peclet élevés.

Pour $Pe = 1$, les deux méthodes numériques peuvent être comparées à la solution

exacte. La figure 2.17 montre que la solution à la sortie du réacteur est calculée adéquatement par les deux algorithmes. Par contre, la MA arrive difficilement à obtenir la solution exacte du profil à l'entrée du réacteur. Cette lacune de la méthode MA peut être expliquée par les conditions frontières qui sont modifiées par le découplage en sous-systèmes. En effet, cette séparation cause la perte de l'information sur le gradient à l'entrée qui est apportée par les conditions originales de Danckwerts. Pour retrouver ce gradient, le maillage doit être fortement raffiné à l'entrée du réacteur. Ainsi, dans ce cas, l'utilisation d'un maillage non-uniforme peut être avantageux. La figure 2.20 présente la variation de l'intégrale de la valeur absolue de l'erreur pour la MDF et la MA par rapport à la définition du maillage. Ces courbes montrent que la MA cause une erreur plus importante que la MDF. Toutefois, l'erreur est du même ordre de grandeur pour les deux méthodes et elle a des propriétés de consistance intéressante. Après la condition frontière à l'entrée du réacteur, la source principale d'erreur dans la méthode par alternance est évidemment la séparation en sous-systèmes et leur ordre de résolution. Pour un système linéaire, les phénomènes de dispersion et de réaction sont commutatifs. Leur ordre de résolution n'est donc pas important. La convection, par contre, doit être appliquée en premier lieu pour éviter une surestimation de la conversion. Heureusement, la propriété apparente de consistance de la MA permet de bien contrôler l'erreur en réduisant le maillage.

2.3.4 Application au modèle de Gendron

L'application de la méthode par alternance au modèle de Gendron est réalisée en utilisant un maillage de 200 noeuds et les résultats de la MA sont comparés à ceux de la MDF. La figure 2.21 présente les entrées qui sont utilisées pour les simulations. Les figures 2.22 à 2.24 montrent les résultats de simulation obtenus

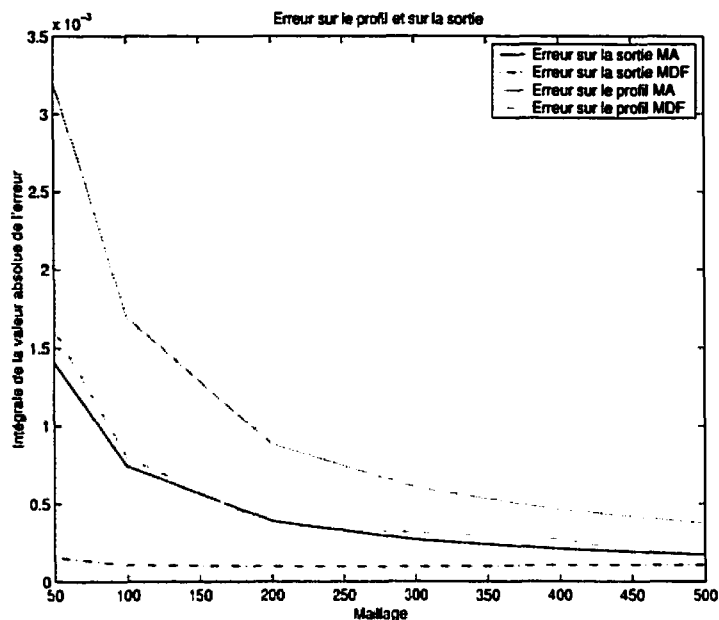


Figure 2.20 Analyse de l'erreur

pour différents nombres de Peclet. Elles montrent que les caractéristiques des méthodes numériques observées dans le cas linéaire se retrouvent aussi dans le cas non linéaire. Ainsi la MDF est limitée par sa faible bande passante et la MA ne permet pas de solutionner adéquatement le profil à l'entrée du réacteur.

Comme le sous-système de réaction est non-linéaire, les sous-système de dispersion et de réaction ne sont plus commutatifs. L'influence de l'ordre de résolution doit donc être étudiée. Les figures 2.22-2.23 montrent que l'ordre de résolution n'est pas important pour les systèmes faiblement dispersifs. Par contre, la figure 2.24 montre que la solution avec l'ordre convection-réaction-dispersion (CRD) plutôt que convection-dispersion-réaction (CDR) cause une erreur importante. L'amplitude de cette erreur est en partie attribuable à l'ordre élevé de la cinétique de réaction. La figure 2.25 montre l'intégrale de la valeur absolue de l'erreur entre les solutions CRD et CDR pour différents nombres de Peclet et différentes définitions du mail-

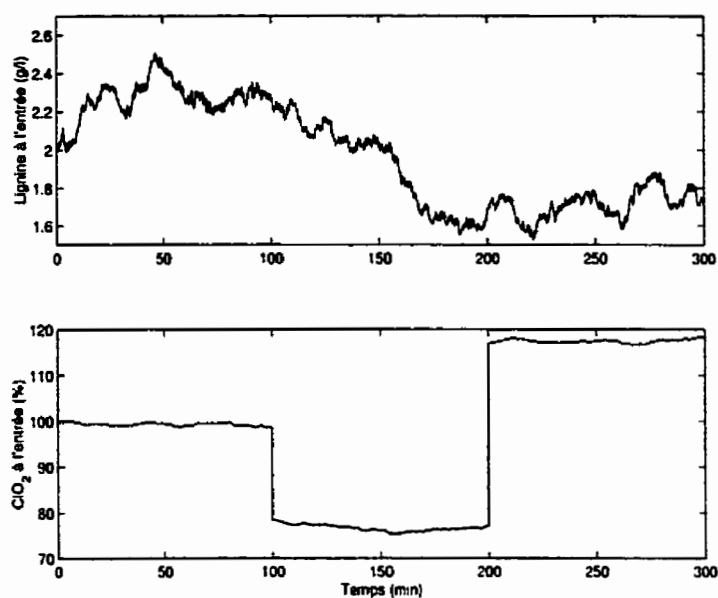
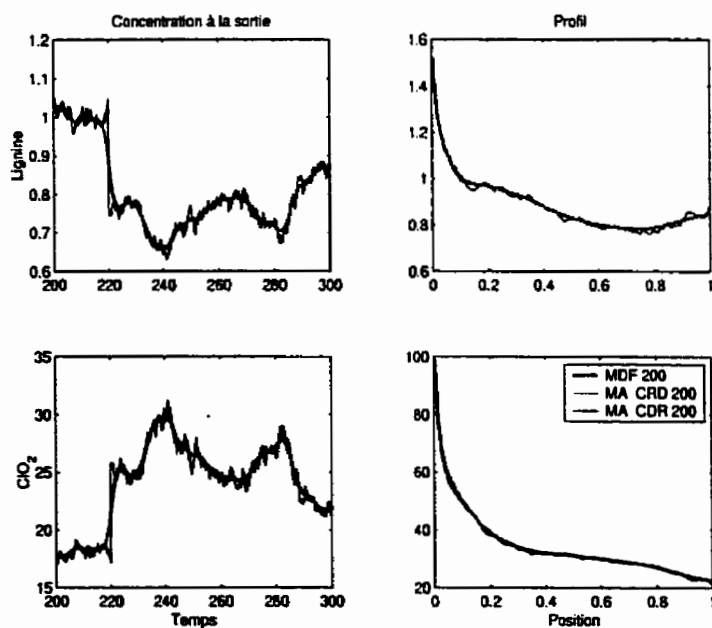


Figure 2.21 Entrées du réacteur

Figure 2.22 Modèle de Gendron: simulation pour $Pe = 10^8$

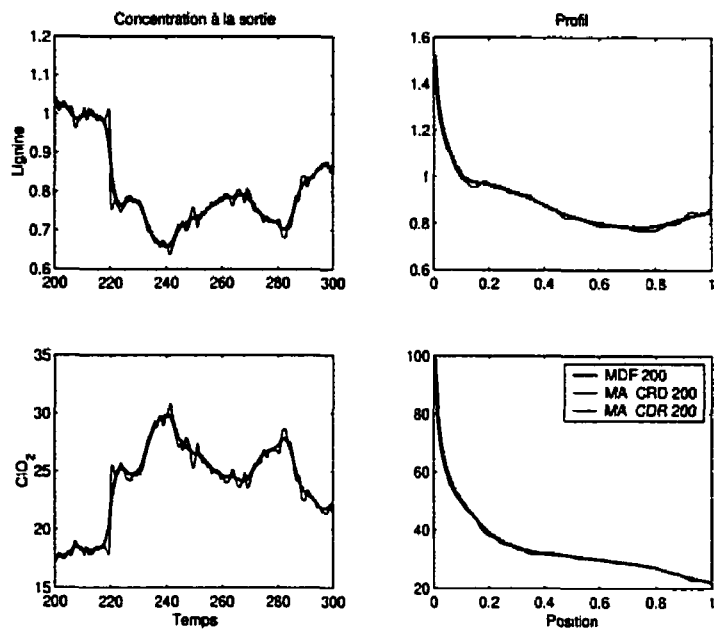


Figure 2.23 Modèle de Gendron: simulation pour $Pe = 10^4$

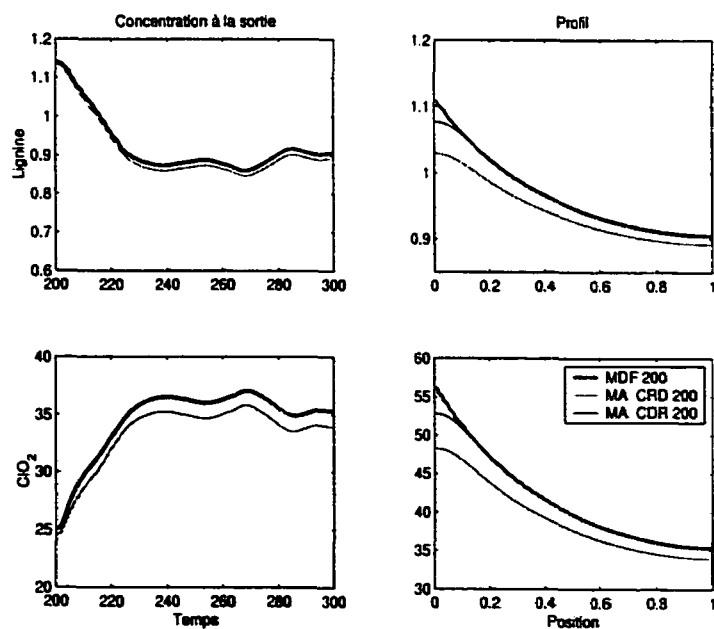


Figure 2.24 Modèle de Gendron: simulation pour $Pe = 1$

lage. Même si l'erreur est consistante par rapport au maillage, le nombre de Peclet est le facteur dominant pour la qualité de la solution. L'utilisation d'un maillage de dimension variable qui serait fonction de la vitesse de réaction est probablement une façon efficace de réduire l'erreur si le nombre de Peclet est faible.

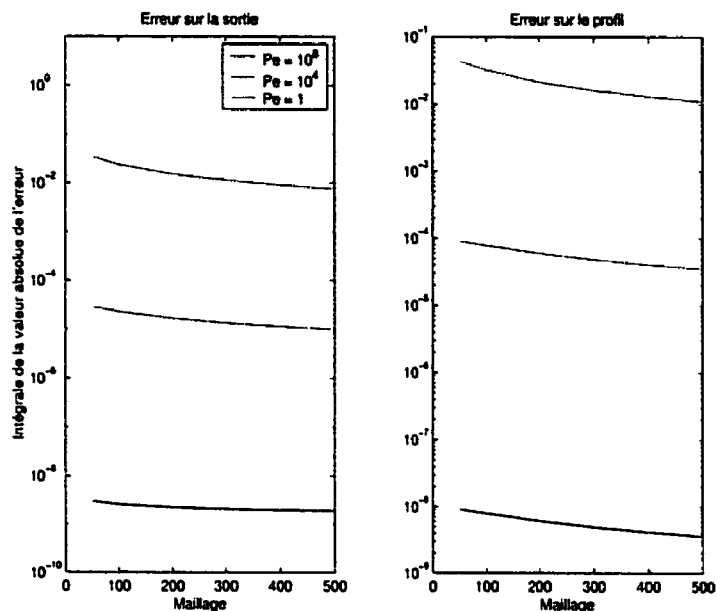


Figure 2.25 Erreur entre la MA avec CDR et la MA avec CRD

2.4 Synthèse des résultats

Ce chapitre a présenté différentes méthodes numériques qui permettant de solutionner un système à paramètres répartis de type convection-diffusion-réaction. Le tableau 2.2 suivant résume les avantages et inconvénients de chaque méthode.

Tableau 2.2 Synthèse des caractéristiques des méthodes numériques utilisées

Méthode	Avantages	Désavantages
Méthode des différences finies	- Mise en oeuvre simple	- Nombre important d'EDO - Diffusion numérique - Simulation correcte d'un réacteur piston impossible - Traitement approximatif des conditions frontières
Méthode de collocation orthogonale	- Nombre réduit d'EDO - Simulation rapide	- Choix difficile des point de collocations - Peu robuste aux variations des paramètres du modèle
Méthode des éléments finis	- Traitement exact des conditions frontières	- Mise en oeuvre complexe - Oscillation en transitoire dans le cas de systèmes dominées par la convection
Méthode par alternance	- Mise en oeuvre simple - Méthode à pas fixe - Pas de diffusion numérique - Simulation exacte d'un comportement piston - Robuste aux perturbations des paramètres	- Méthode heuristique - Erreur plus importante dans le cas de systèmes dispersifs - Conditions frontières à l'entrée inexactes

Partie II

Commande d'un système à paramètres répartis

CHAPITRE 3

PROBLÉMATIQUE, COMMANDE PRÉDICTIVE ET COMMANDE PAR PRÉ-APPROXIMATION

Les opérateurs des usines de pâte peuvent assurer le fonctionnement des tours de blanchiment sans l'aide d'algorithme de commande ou de modèles. Par contre, l'opération manuelle a ses limites: variabilité importante du produit, utilisation excessive de réactif chimique, etc. Plusieurs algorithmes de commande ont donc été mis en place pour optimiser le rendement du procédé de blanchiment. Industriellement, l'algorithme de blancheur compensé ("compensated brightness") peut être vu comme un standard. Depuis, l'application de la commande adaptative a permis d'augmenter les performances du procédé. Par exemple, Gendron et al. ont présenté un régulateur adaptatif à modèles pondérés qui est maintenant appliqué dans plusieurs usines. Dans le cadre de la problématique de cette thèse, Hamelin (1999) a présenté l'application de cet algorithme au modèle de Gendron et propose d'y ajouter une composante anticipative pour réduire l'impact des perturbations. De plus, Crête (2000) a présenté l'utilisation de la commande prédictive de type DMC sur le même modèle. Les résultats de ces travaux ne seront pas présentés directement dans cette thèse quoi qu'il fassent partie intégrante du projet. Ainsi seule une variante de l'algorithme DMC présenté par Renou et al (2000b) sera utilisé afin de servir de base de comparaison avec les algorithmes basés sur le modèle à paramètres répartis.

L'objectif de ce chapitre est de présenter l'application et l'adaptation d'algorithmes connus au problème de commande d'un réacteur de blanchiment. La première partie du chapitre présente donc la problématique de la commande d'un réacteur de

blanchiment ainsi que les principales hypothèses de simulation. La seconde présente le comportement en boucle ouverte du réacteur en réponse aux diverses perturbations et variations du point de fonctionnement. La troisième partie présente une adaptation de l'algorithme de commande prédictive avec matrice dynamique qui permet de tenir compte efficacement de la variation du débit. Finalement, la dernière portion du chapitre présente l'utilisation des différences globales dans une approche de pré-approximation pour la commande de la tour de blanchiment.

3.1 Problématique générale de commande

Le problème de commande d'une tour de blanchiment est principalement caractérisé par le temps de résidence important du réacteur et la non-linéarité de la cinétique. De plus, la complexité du problème est accentuée par la mauvaise qualité de l'identification des cinétiques, les nombreuses perturbations qui influencent le procédé et le peu de capteurs disponibles sur le procédé. Cette section présente donc les différentes hypothèses qui sont utilisées pour simuler le comportement du réacteur et étudier les performances des systèmes de commande proposés. L'objectif n'est donc pas de reproduire exactement le comportement du réacteur, mais bien d'avoir une idée générale de son comportement sous l'influence de variations bien contrôlées.

La configuration de l'instrumentation d'un réacteur de blanchiment n'est pas uniforme entre les différentes usines et ce, même au sein d'une même compagnie. La figure 3.1 présente la configuration du réacteur qui a été choisie.

Ainsi, une mesure de la lignine en amont du procédé est réalisée ainsi qu'une mesure en aval. Le dioxyde de chlore, qui est la variable manipulée du procédé, est aussi mesuré à la sortie du réacteur. Les hypothèses suivantes sur l'utilisation des

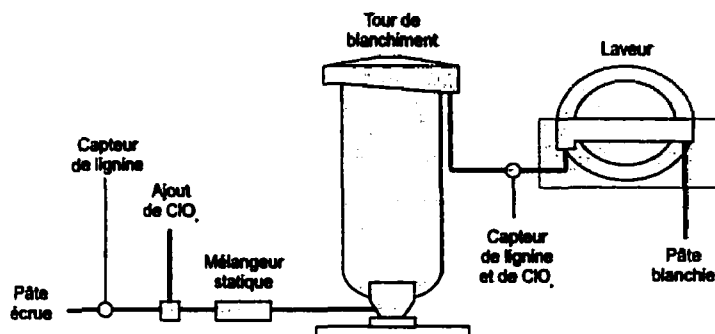


Figure 3.1 Schéma du réacteur de blanchiment

capteurs sont considérées:

1. *La pâte a des propriétés uniformes.* La pâte, lors du blanchiment, a généralement une consistance élevée. Ainsi, le mélange avec les réactifs n'est probablement pas uniforme. De plus, la lignine n'est pas répartie uniformément dans les fibres. Ces constatations peuvent, par contre, difficilement être prises en compte lors de l'élaboration de la stratégie de commande. Cette variabilité causée par la mesure est probablement inférieure à la variabilité naturelle des fibres. Elle sera donc négligée.
2. *Les mesures prises sont en conformité avec le modèle.* La mesure de la lignine est faite en Kappa. Cette mesure découle d'un test standard qui relie une expérience de laboratoire au taux réel de lignine. Comme la réaction globale est mal connue, ce test ne permet pas d'avoir une mesure précise de la lignine effectivement extraite des fibres ou encore de celle qui sera extraite après le lavage. Pour simplifier l'analyse, cette étude assume donc que le modèle est consistant i.e. que le taux de lignine est bien la variable contrôlée et que les mesures en Kappa reflètent bien ce taux de lignine.
3. *Les mesures sont prises en ligne.* Industriellement, peu de capteur de lignine

sont disponibles en ligne pour le moment. Les taux de lignine sont donc généralement calculés suite à des tests en laboratoires effectués à toutes les heures. Par contre, certaines usines utilisent maintenant des capteurs de lignine en ligne à l'entrée de la tour. Cette étude assume que les mesures sont prises en ligne aux deux extrémités et que la fréquence d'échantillonnage est suffisante.

L'élaboration d'un système de commande, pour le procédé de blanchiment, doit prendre en considération la présence de plusieurs perturbations causées tant par l'opération du procédé que par la matière première. Ainsi, la pâte a des propriétés physico-chimiques et une composition qui varie fortement au cours du temps. Cette variation est issue de diverses sources telles que: l'espèce du bois, les conditions d'entreposage, les étapes précédentes du procédé de mise en pâte, etc. De plus, le fonctionnement de l'unité de blanchiment est aussi une source de perturbation importante. En effet la température, le pH et d'autres conditions de fonctionnement peuvent varier. Tenir compte directement de toutes ces perturbations dans le modèle mènerait rapidement à un modèle de dimension importante difficile à identifier. Donc, pour tenir compte de toutes ces perturbations, les modèles suivants de perturbation seront utilisés:

1. *La lignine à l'entrée varie de façon stochastique.* Les différentes variations de la matière première ainsi que les procédés utilisés en amont causent une variabilité importante de la lignine. Cette variation est observable dans les données d'usines. Le modèle utilisé sera donc la valeur nominale de la lignine auquel sera ajouté la somme cumulée d'une variable aléatoire de faible amplitude.
2. *Le débit et le point de consigne varient subitement.* Ce modèle n'est pas conforme à la réalité car généralement la variation du débit de production

ainsi que les changements de point de consigne sont faits de façon progressive en usine. Toutefois, cette approche est de type "pire cas" et permet d'assurer et d'imposer une certaine robustesse aux algorithmes de commande.

3. *Les paramètres cinétiques varient subitement.* Les paramètres physico-chimiques de fonctionnement de la tour influencent directement la réaction chimique. Ses variations seront donc modélisées par une approche pire cas qui consiste à varier subitement les constantes cinétiques. Des perturbations échelons des deux constantes cinétiques seront donc utilisées. De plus, ce modèle permet de tenir compte de la réactivité variable de la matière première sans considérer toutefois un modèle réparti de ce type de perturbation.
4. *Différentes cinétiques sont possibles.* L'identification du modèle cinétique pour ce type de réaction est difficile. De plus, cette cinétique peut varier en fonction de la matière première. Les différents modèles cinétiques identifiés au chapitre 1 donnent donc une gamme de cinétiques possibles.

Sur la base de ces hypothèses, le problème de commande consiste donc à maintenir la lignine à la sortie du réacteur (la variable commandée) à son point de consigne en variant la concentration de dioxyde de chlore à l'entrée du réacteur (la variable manipulée). L'élaboration des stratégies de commande doit tenir compte des variations stochastiques de lignine à l'entrée et des perturbations de type échelon sur les constantes cinétiques. De plus, l'algorithme doit être robuste par rapport à divers modèles cinétiques.

3.2 Comportement en boucle ouverte

Avant de développer différents algorithmes de commande, il est important d'avoir une idée de la sensibilité du procédé. En effet, la performance d'un régulateur

est toujours relative à son comportement en boucle ouverte. Les figures 3.2 à 3.5 donnent une idée de la sensibilité du modèle M1 présenté au chapitre 1.

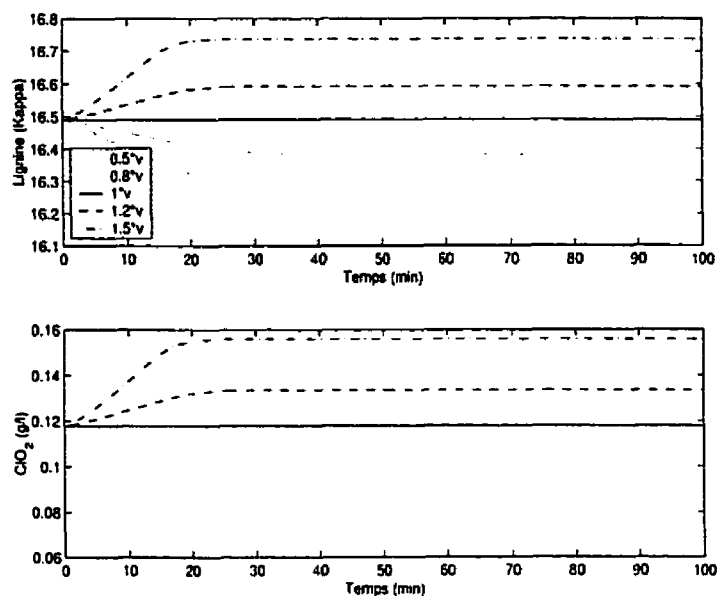


Figure 3.2 Effet de la variation du débit en boucle ouverte

Ces figures permettent d'apprécier le comportement non linéaire du procédé. En effet, la non-symétrie par rapport aux valeurs nominales est évidente dans le cas d'une variation des constantes cinétiques. Cette caractéristique est aussi présente plus faiblement dans le cas de la variation de la lignine à l'entrée et d'une variation du débit. Ces observations déterminent donc le niveau des perturbations qui seront appliquées lors des analyses subséquentes. Les perturbations sur les paramètres cinétiques seront donc de l'ordre de 20% de leur valeur nominale alors que celles sur le débit seront de 50% de la valeur nominale. Ces niveaux de perturbations permettront donc de pousser le procédé hors de la zone linéaire autour du point de fonctionnement. La variation du niveau de lignine à l'entrée est choisie en fonction des données industrielles disponibles. Ainsi une distribution normale de moyenne nulle et de variance 0.05 sera cumulée à chaque pas de temps et ajouté à la valeur

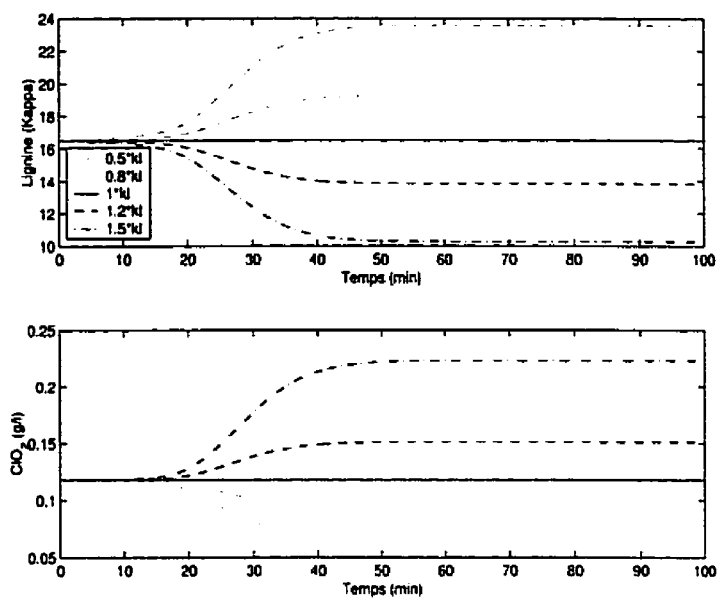


Figure 3.3 Effet de la variation de k_L en boucle ouverte

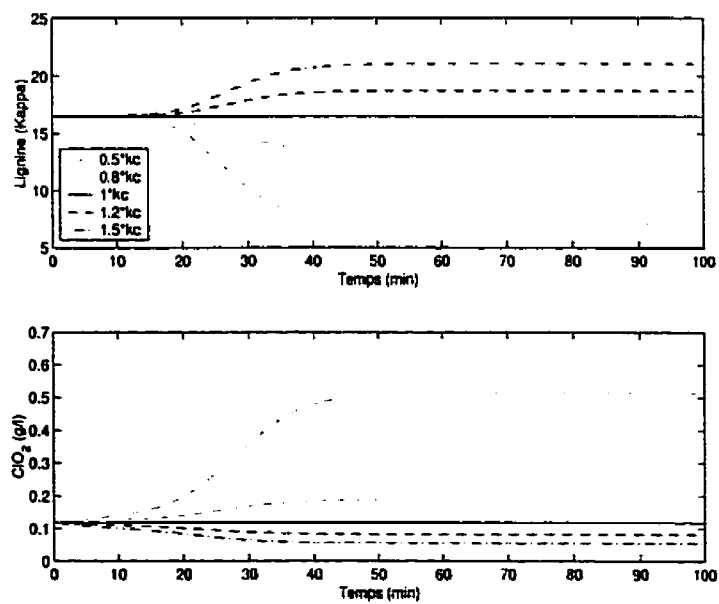


Figure 3.4 Effet de la variation de k_C en boucle ouverte

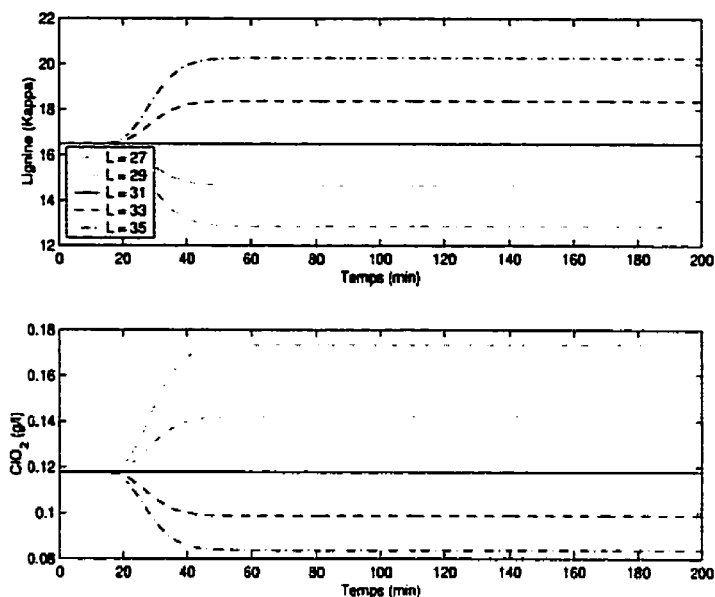


Figure 3.5 Effet de la lignine à l'entrée en boucle ouverte

nominale de l'entrée.

Les modèles M2 et M3 du chapitre seront utilisés pour l'étude de robustesse. Comme les perturbations des constantes cinétiques seront aussi appliquées sur ces modèles, leurs variations doivent être ajustées pour tenir compte du changement d'ordre de la cinétique. La figure 3.6 montre l'adéquation des variations en boucle ouverte pour les variations équivalentes des constantes cinétiques présentées au tableau 3.1

Tableau 3.1 Équivalence de la variation des constantes cinétiques

Paramètre	M1	M2	M3
k_L	+20%	+25.5%	+43%
k_L	+20%	+25.5%	+43%
k_C	-20%	-22%	+42.5%

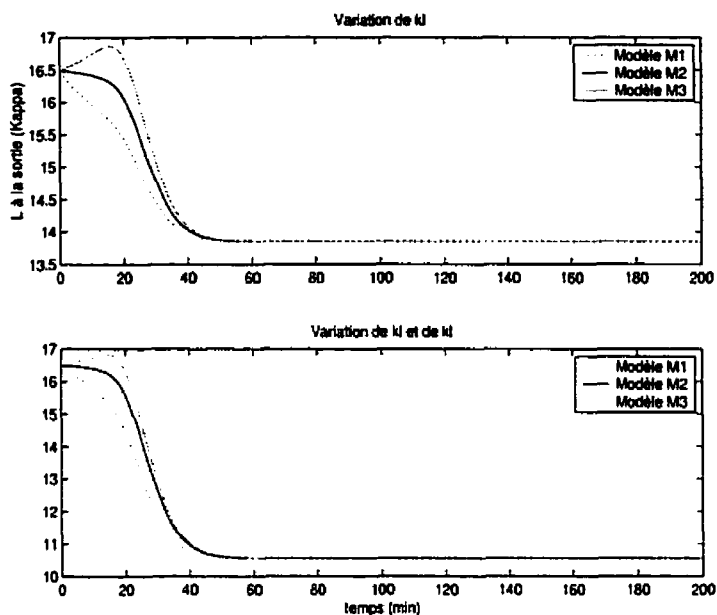


Figure 3.6 Équivalence de la variation en boucle ouverte des variations des constantes cinétiques

3.3 Commande prédictive

La commande prédictive apparaît sous diverses formes dans la littérature compte tenu que ses origines sont principalement industrielles. L'idée de base est généralement attribuée à Cutler et Ramaker (1979) ou à Richalet et al. (1978). Le principe de base de cet algorithme est d'utiliser un modèle pour bâtir une prédiction du comportement futur du procédé dans le cas où la commande n'est pas modifiée. Cette prédiction est comparée au comportement désiré, ce qui permet de déterminer les modifications de la commande à effectuer sur un certain horizon pour atteindre la référence. À chaque itération, seule la première action de commande calculée est appliquée au procédé. De plus, la trajectoire prédite est adaptée en fonction de l'évolution du procédé afin de tenir compte des perturbations. La figure 3.7 résume les éléments principaux de cette stratégie.

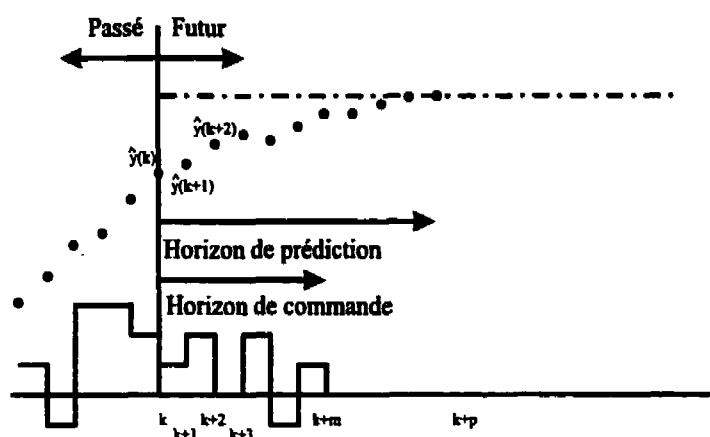


Figure 3.7 Principe de la commande prédictive

3.3.1 Mise en oeuvre

L'algorithme DMC (Dynamic Matrix Control) présenté, par exemple, dans (Ogunnaike et Ray, 1994) est utilisé ici. Cet algorithme utilise une formulation discrète de la réponse à l'échelon sous la forme d'une matrice. Soit le vecteur suivant:

$$\beta = [\beta(1) \ \beta(2) \ \dots \ \beta(N)] \quad (3.1)$$

Les $\beta(i)$ représentent la valeur en variable de déviation de la sortie du procédé en réponse à l'échelon jusqu'à $\beta(N)$ qui est la valeur en régime permanent. En assumant un horizon de prédiction de dimension p et un horizon de commande m , il est possible de construire la matrice suivante:

$$\beta = \begin{bmatrix} \beta(1) & 0 & \dots & 0 \\ \beta(2) & \beta(1) & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \beta(p) & \beta(p-1) & \dots & \beta(p-m+1) \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

Cette formulation matricielle permet de construire la prédiction de l'évolution de la sortie après l'application de l'horizon de commande de la façon suivante:

$$\hat{\mathbf{y}}(k+1) = \hat{\mathbf{y}}^0(k) + \beta \Delta \mathbf{u}(k) + \mathbf{w}(k) \quad (3.3)$$

Dans cette équation, le vecteur $\hat{\mathbf{y}}^0(k)$ de dimension p représente la prédiction du comportement sans action de commande, le vecteur $\Delta \mathbf{u}(k)$ de dimension m représente les variations de commande et finalement le vecteur $\mathbf{w}(k)$ de dimension p représente la différence entre la prédiction et la sortie réelle du procédé à l'instant k . Les paramètres p et m sont les paramètres d'ajustement de l'algorithme.

Si la trajectoire désirée sur l'horizon de prédiction est représentée par le vecteur $\mathbf{y}^*(k)$, le problème de commande consiste donc à trouver $\Delta \mathbf{u}(k)$ de sorte que l'équation suivante soit vérifiée:

$$\hat{\mathbf{y}}^*(k+1) = \hat{\mathbf{y}}^0(k) + \beta \Delta \mathbf{u}(k) + \mathbf{w}(k) \quad (3.4)$$

Il n'existe évidemment pas de solution à cette équation sauf dans certains cas particuliers. Toutefois, il est possible de reformuler ce problème comme un problème d'optimisation en définissant l'équation d'erreur suivante:

$$\mathbf{e}(k+1) = \hat{\mathbf{y}}^*(k+1) - \hat{\mathbf{y}}^0(k) - \mathbf{w}(k) \quad (3.5)$$

L'erreur en fonction de l'action de commande est donc:

$$\mathbf{e}(k+1) = \beta \Delta \mathbf{u}(k) \quad (3.6)$$

Ce qui permet de formuler le problème d'optimisation suivant:

$$\min_{\Delta \mathbf{u}(k)} (\mathbf{e}(k+1) - \beta \Delta \mathbf{u}(k))^T (\mathbf{e}(k+1) - \beta \Delta \mathbf{u}(k)) \quad (3.7)$$

La solution bien connue de ce problème classique de moindre carré est donc:

$$\Delta \mathbf{u}(k) = \beta^+ \mathbf{e}(k+1) \quad (3.8)$$

$$\beta^+ = (\beta^T \beta)^{-1} \beta^T \quad (3.9)$$

Cet algorithme peut être aussi bien formulé dans le cas monovarié que dans le cas multivarié. En utilisant la formulation multivarié dans le cas du réacteur de blanchiment, il est possible d'obtenir une formulation qui inclut une composante anticipative. Toutefois, cette composante ne modifie pas la loi de commande directement. En effet, l'effet anticipatif apparaît dans la prédiction ce qui influencera par la suite l'effort de commande. En utilisant la matrice dynamique β_{LL} qui représente l'impact d'une variation de lignine à l'entrée sur la sortie, la prédiction devient donc:

$$\hat{\mathbf{y}}(k+1) = \hat{\mathbf{y}}^0(k) + \beta \Delta \mathbf{u}(k) + \beta_{LL} \Delta \mathbf{Lin}(k) + \mathbf{w}(k) \quad (3.10)$$

La commande prédictive DMC est relativement sensible à une variation du débit. En effet, l'utilisation d'un modèle fixe peut provoquer des oscillations si les délais du modèle et du système sont trop différents car cette différence introduit un délai dans l'application de l'action de commande. Afin de compenser cette lacune, une mise à l'échelle temporelle est utilisée. Dans cette approche, l'intervalle de temps Δt du modèle discret est considéré variable. Il peut donc être ajusté pour tenir compte des variations du débit, ce qui permet d'ajuster le délai du modèle au délai du réacteur et d'éviter un comportement oscillatoire. Toutefois, l'algorithme DMC avec mise à l'échelle temporelle ne tient pas compte de la variation de la conversion

dans le réacteur causée par une variation de débit.

Cette approche peut être directement appliquée en simulation si la méthode par alternance est utilisée. Comme le pas de temps de cette méthode de simulation est modifié directement en fonction du débit, la programmation directe du DMC permet la mise en oeuvre de cette approche. Par contre, l'application dans un contexte industriel est plus complexe. En effet, pour s'insérer dans un système distribué ou le temps d'application des efforts de commande est fixe, des mécanismes d'interpolation entre les points du modèle et de la prédiction doivent être utilisés.

3.3.2 Résultats de simulation

Les matrices dynamiques β et β_{LL} sont construites en effectuant des variations de 10% des entrées nominales sur le modèle M1 du chapitre 1. L'horizon de prédiction p choisi est égal à la dimension des réponses à l'échelon soit $p = 234$ alors que l'horizon de contrôle est minimal avec $m = 1$. Ces choix permettent de maximiser la robustesse de l'algorithme. Les simulations sont effectuées en utilisant la méthode par alternance avec un maillage de 100 noeuds pour le modèle M1.

La figure 3.8 présente les performances de la commande prédictive avec mise à l'échelle temporelle à des variations du débit. Cet algorithme permet un retour adéquat à la référence sans oscillation ou dépassement. Le comportement, suite à des variations de consigne, est présenté à la figure 3.9. Encore une fois, la commande prédictive permet d'atteindre le point de consigne sans aucun dépassement dans un temps similaire à celui du temps de résidence du réacteur. Ce comportement est largement imputable au choix conservateur des paramètres d'ajustement. Les figures 3.8 et 3.9 permettent d'apprécier la qualité de la composante d'anticipation. En effet, les perturbations de la lignine à l'entrée du réacteur n'affectent aucune-

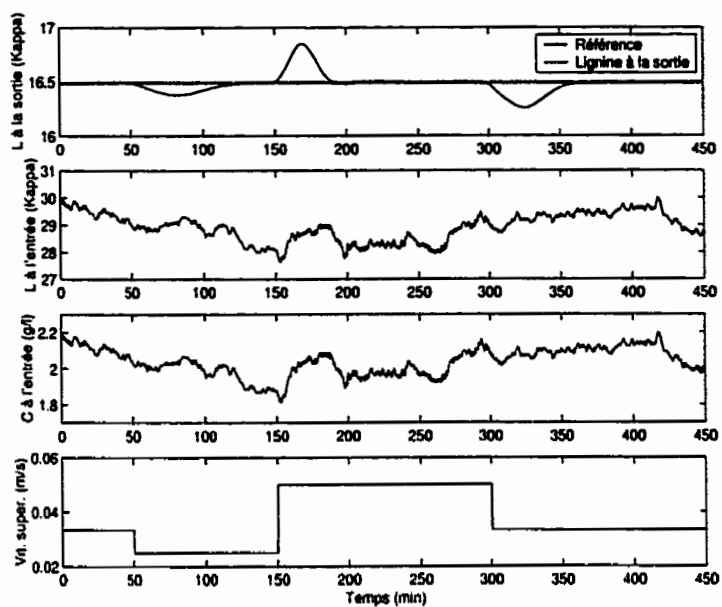


Figure 3.8 Commande prédictive : variation du débit

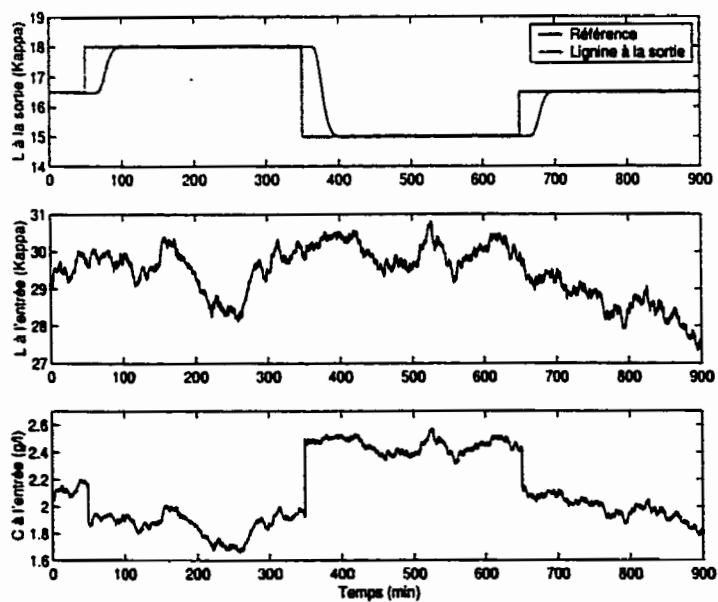


Figure 3.9 Commande prédictive : variation du point de consigne

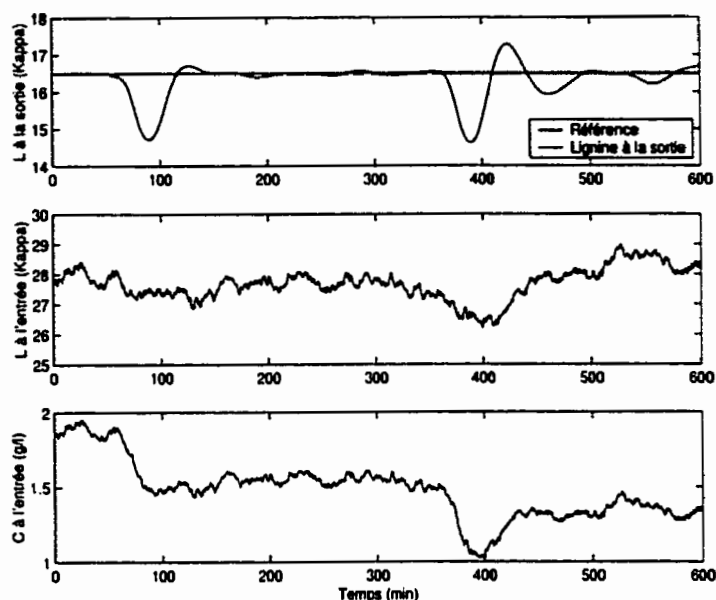


Figure 3.10 Commande prédictive : variation des constantes cinétiques

ment la sortie du réacteur. La figure 3.10 montre la performance de l'algorithme lors de perturbations échelon des constantes cinétiques. Une perturbation échelon de +20% sur k_L est appliquée à 50 minutes puis une perturbation échelon de -20% est appliqué sur k_C à 350 minutes. Suite à ces perturbations, l'algorithme de commande n'arrive plus à compenser adéquatement les variations de la lignine à l'entrée.

Afin de tester la robustesse de la commande prédictive avec ajustement de l'échelle de temps, le régulateur, conçu à partir du modèle M1, est appliqué sur les modèles M2 et M3 du chapitre 1 . Une série de perturbations qui éloigne progressivement le système de son point de fonctionnement nominale est appliquée. Ces perturbations sont présentées à la figure 3.11. Les résultats de simulation de la figure 3.12, permettent de constater que la commande prédictive est relativement robuste par rapport au modèle du système. Toutefois, l'effet des perturbations de lignine devient de

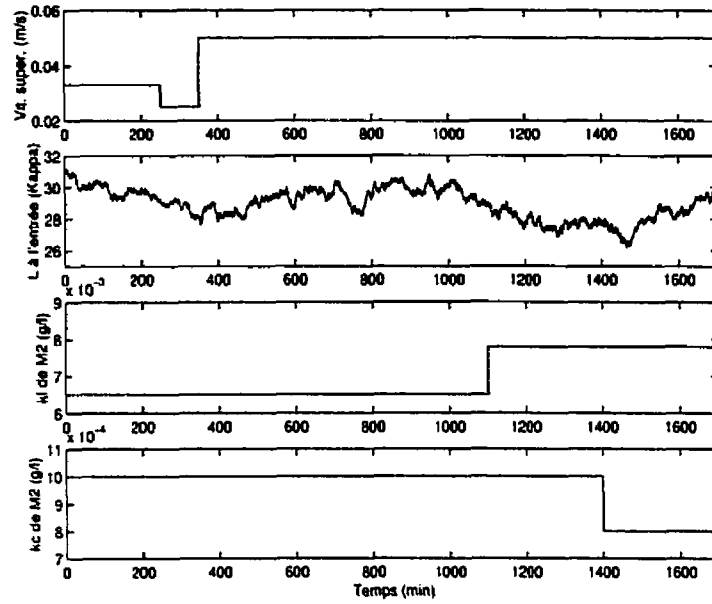


Figure 3.11 Variation de paramètres pour l'analyse de robustesse

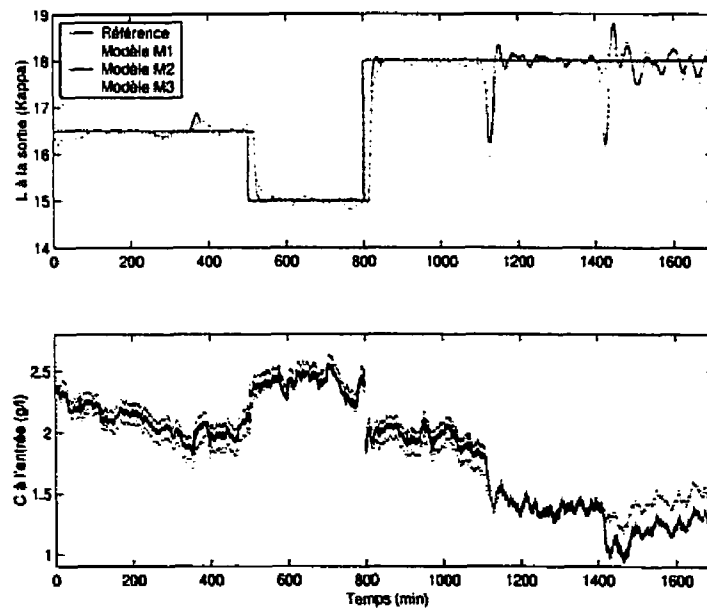


Figure 3.12 Commande prédictive : analyse de robustesse

plus en plus important lorsque le système s'éloigne du point de fonctionnement nominal.

3.4 Commande adaptative par différences globales

La section précédente a permis de voir que l'utilisation d'un modèle basé sur une réponse à l'échelon présente certaines limites lorsque le procédé s'éloigne du point de fonctionnement nominal. Cette observation motive l'utilisation d'un modèle global, valide sur l'ensemble de la plage de fonctionnement. L'utilisation d'un modèle d'EDP du réacteur pour la conception de la loi de commande peut donc être une approche intéressante. Par contre, l'application des techniques de commande classiques est rendue difficile par la complexité mathématique et par la présence non-explicite de l'action de commande dans les EDPs. Pour aborder ce problème, Dochain (1994) a proposé une méthode de pré-approximation qui consiste à remplacer les dérivées partielles spatiales par des différences globales. Cette approche, relativement simple à appliquer, permet de faire apparaître explicitement l'action de commande dans les équations du modèle. De plus, le modèle approximatif obtenu permet, par la suite, l'utilisation des techniques de linéarisation exacte pour la conception du régulateur. Cette approche a été utilisée par Bourrel (1996) dans le cas d'un système hyperbolique de traitement biologique de l'eau potable. Cette section présente donc l'application de cette technique de pré-approximation au réacteur de blanchiment.

3.4.1 Mise en oeuvre

Pour appliquer la technique des différences globales, il faut tout d'abord exprimer les bilans du modèle d'EDP à la sortie du réacteur. Ce qui permet donc d'obtenir

les équations suivantes dans le cas du modèle M1 du chapitre 1:

$$\left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial t} \right|_{\ell} = -v \left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \right|_{\ell} + D \left. \frac{\partial^2 C(z, t)}{\partial z^2} \right|_{\ell} - k_C (LC)^2 \Big|_{\ell} \quad (3.11)$$

$$\left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial t} \right|_{\ell} = -v \left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \right|_{\ell} + D \left. \frac{\partial^2 L(z, t)}{\partial z^2} \right|_{\ell} - k_L (LC)^2 \Big|_{\ell} \quad (3.12)$$

À la sortie du réacteur, les dérivées partielles spatiales peuvent être approximées par les différences globales suivantes

$$\left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \right|_{\ell} \approx \frac{C(\ell, t) - C(0, t)}{\ell} \quad (3.13)$$

$$\left. \frac{\partial^2 C(z, t)}{\partial z^2} \right|_{\ell} \approx \frac{C(2\ell, t) - 2C(\ell, t) + C(0, t)}{\ell^2} \quad (3.14)$$

$$\left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \right|_{\ell} \approx \frac{L(\ell, t) - L(0, t)}{\ell} \quad (3.15)$$

$$\left. \frac{\partial^2 L(z, t)}{\partial z^2} \right|_{\ell} \approx \frac{L(2\ell, t) - L(\ell, t) + L(0, t)}{\ell^2} \quad (3.16)$$

En utilisant les conditions frontières de Danckwerts à la sortie du réacteur, la simplification suivante des différences globales est obtenue:

$$\left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \right|_{\ell} \approx \frac{C(\ell, t) - C(0, t)}{\ell} \quad (3.17)$$

$$\left. \frac{\partial^2 C(z, t)}{\partial z^2} \right|_{\ell} \approx \frac{-C(\ell, t) + C(0, t)}{\ell^2} \quad (3.18)$$

$$\left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \right|_{\ell} \approx \frac{L(\ell, t) - L(0, t)}{\ell} \quad (3.19)$$

$$\left. \frac{\partial^2 L(z, t)}{\partial z^2} \right|_{\ell} \approx \frac{-L(\ell, t) + L(0, t)}{\ell^2} \quad (3.20)$$

Ces différences globales sont par la suite introduites dans les bilans de matière. Ce qui permet d'obtenir les équations différentielles suivantes:

$$\frac{dC(\ell, t)}{dt} = -v \frac{C(\ell, t) - C(0, t)}{\ell} + D \frac{-C(\ell, t) + C(0, t)}{\ell^2} - k_C (LC)^2 \Big|_{\ell} \quad (3.21)$$

$$\frac{dL(\ell, t)}{dt} = -v \frac{L(\ell, t) - L(0, t)}{\ell} + D \frac{-L(\ell, t) + L(0, t)}{\ell^2} - k_L(LC)^\alpha|_\ell \quad (3.22)$$

Pour obtenir une relation directe entre l'action de commande et la variable commandée, les deux équations sont intégrées l'une dans l'autre à l'aide du terme de réaction. Cette approche permet d'obtenir l'équation suivante:

$$\begin{aligned} \frac{dL(\ell, t)}{dt} = & -v \frac{L(\ell, t) - L(0, t)}{\ell} + D \frac{-L(\ell, t) + L(0, t)}{\ell^2} \\ & - \frac{k_L}{k_C} \left(\frac{dC(\ell, t)}{dt} + v \frac{C(\ell, t) - C(0, t)}{\ell} - D \frac{-C(\ell, t) + C(0, t)}{\ell^2} \right) \end{aligned} \quad (3.23)$$

En utilisant une différence arrière pour la dérivée du dioxyde de chlore à la sortie et en mettant en évidence l'action de commande $C(0, t)$, l'expression suivante est obtenue:

$$\begin{aligned} \frac{dL(\ell, t)}{dt} = & -v \frac{L(\ell, t) - L(0, t)}{\ell} + D \frac{-L(\ell, t) + L(0, t)}{\ell^2} \\ & - \frac{k_L}{k_C} \left[\frac{C(\ell, t_i) - C(\ell, t_{i-1})}{\Delta t} + \left(\frac{v}{\ell} + \frac{D}{\ell^2} \right) C(\ell, t) \right. \\ & \left. - \left(\frac{v}{\ell} + \frac{D}{\ell^2} \right) C(0, t) \right] \end{aligned} \quad (3.24)$$

Ce résultat permet maintenant d'utiliser le principe de linéarisation exacte et de proposer la boucle de commande interne suivante:

$$\begin{aligned} C(0, t) = & \frac{\ell^2}{v\ell + D} \left[\frac{C(\ell, t_i) - C(\ell, t_{i-1})}{\Delta t} + \left(\frac{v}{\ell} + \frac{D}{\ell^2} \right) C(\ell, t) \right. \\ & \left. + \frac{k_C}{k_L} \left(-u + v \frac{L(\ell, t) - L(0, t)}{\ell} - D \frac{-L(\ell, t) + L(0, t)}{\ell^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.25)$$

L'application de cette boucle interne sur l'approximation par différence globale permet d'obtenir le système linéaire suivant:

$$\frac{dL(\ell, t)}{dt} = u \quad (3.26)$$

Ce système peut ainsi être commandé par n'importe quelle stratégie de commande linéaire. Ici, un simple régulateur PI est utilisé. La boucle de commande externe est donc:

$$u = \lambda \left((L_{sp} - L(\ell, t)) + \gamma \int_0^t (L_{sp} - L(\ell, t)) dt \right) \quad (3.27)$$

Les paramètres λ et γ sont les seuls paramètres d'ajustement de la loi de commande globale. L'application de cette stratégie de commande au système réel a ses

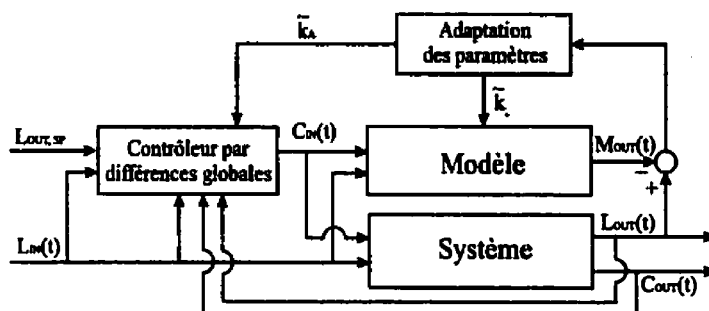


Figure 3.13 Structure de la commande par différences globales

limites car l'approximation par différence globale est grossière. Afin d'augmenter la robustesse de l'algorithme, un mécanisme d'adaptation de la constante cinétique de la lignine est ajouté. La figure 3.13 présente la structure du système de commande complet dans lequel un modèle du réacteur de blanchiment est simulé en parallèle avec le système. L'erreur sur la concentration de lignine à la sortie entre le modèle et le système est utilisée pour faire l'adaptation de la constante cinétique k_A du bilan de lignine du modèle. Les équations suivantes permettent de mettre en oeuvre cette stratégie d'adaptation.

$$\frac{dk_A}{dt} = -\mu(L(\ell, t) - M(\ell, t)) \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial M(z, t)}{\partial t} &= -v \frac{\partial M(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 M(z, t)}{\partial z^2} \\ &- k_A(t) M^2 N^2 \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial N(z,t)}{\partial t} = -v \frac{\partial N(z,t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 N(z,t)}{\partial z^2} - k_C M^2 N^2 \quad (3.30)$$

$$\left. \frac{\partial M(z,t)}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{v}{D} (M(0,t) - L_{in}(t)) \quad (3.31)$$

$$\left. \frac{\partial N(z,t)}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{v}{D} (N(0,t) - C_{in}(t)) \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial M(\ell,t)}{\partial z} = 0 \quad (3.33)$$

$$\frac{\partial N(\ell,t)}{\partial z} = 0 \quad (3.34)$$

3.4.2 Résultat de simulation

Les paramètres d'ajustement du contrôleur ont été fixés aux valeurs suivantes: $\lambda = 0.05$, $\gamma = 0.01$ et $\mu = 0.00002$. Les paramètres ont été ajustés par simulation en tentant de trouver le meilleur compromis entre la réponse à l'échelon et la réponse aux variations des paramètres cinétiques. Toutes les simulations sont effectuées en utilisant la méthode par alternance avec un maillage de 100 noeuds et le modèle M1.

La figure 3.14 présente les performances de la commande par différence globale à des variations du débit. Cet algorithme réagit moins bien que la commande prédictive. En effet, le retour à la référence s'effectue rapidement mais avec quelques oscillations. Ce comportement oscillatoire est aussi présent suite à des variations de consigne comme le montre la figure 3.15. Le dépassement est important et il est fonction de l'amplitude de l'échelon. Les figures 3.14 et 3.15 permettent d'apprécier la réponse de la boucle interne aux perturbations de lignine à l'entrée du réacteur. Comme cette loi de commande inclut directement la valeur de la lignine à l'entrée, elle contient un effet anticipatif efficace. La figure 3.16 montre les performances de l'algorithme lors de perturbations échelon des constantes cinétiques. Une pertur-

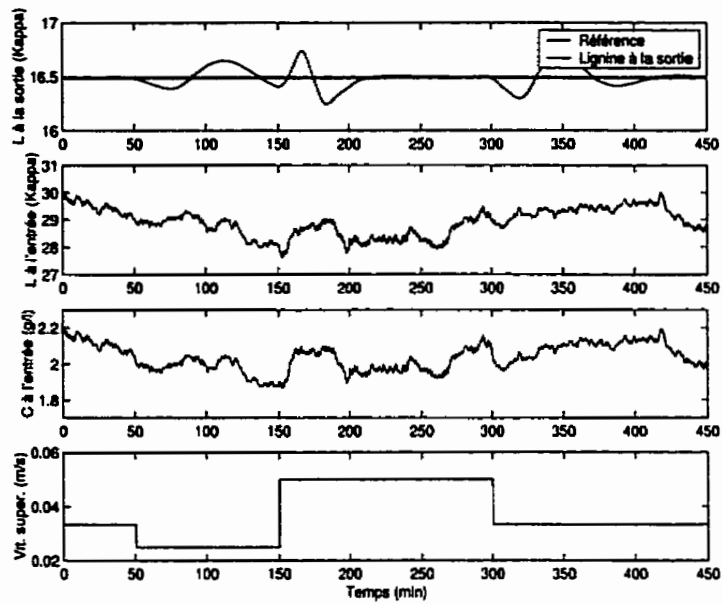


Figure 3.14 Commande par différences globales : variation du débit

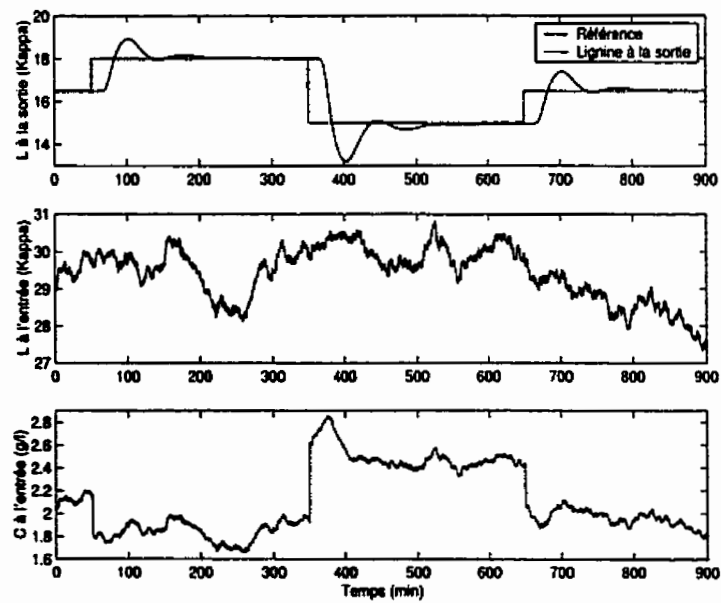


Figure 3.15 Commande par différences globales : variation du point de consigne

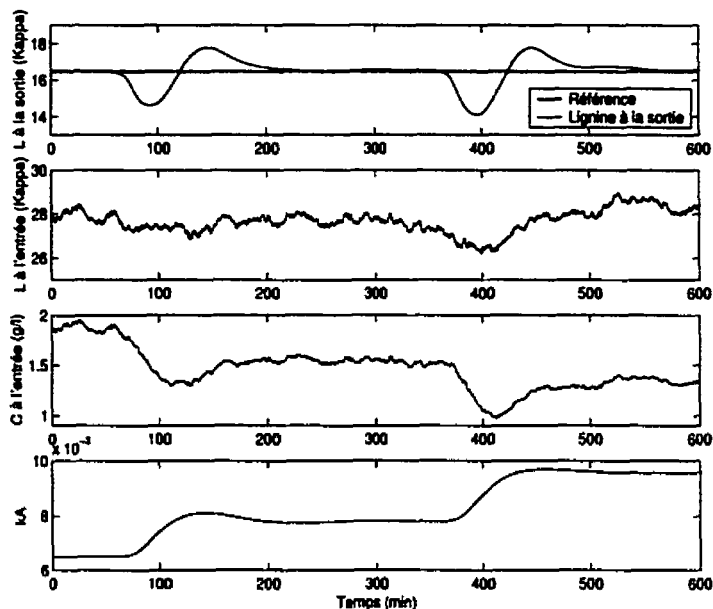


Figure 3.16 Commande par différences globales : variation des constantes cinétiques

bation échelon de +20% sur k_L est appliquée à 50 minutes puis une perturbation échelon de -20% est appliquée sur k_C à 350 minutes. La boucle adaptative réagit correctement en corrigeant le paramètre cinétique du modèle mais les déviations par rapport à la référence sont importantes. Toutefois, la réponse aux perturbations sur la lignine demeure adéquate.

Afin de tester la robustesse de la commande par différences globales, le régulateur conçu à partir du modèle M1, est appliqué sur les modèles M2 et M3 du chapitre 1. Une série de perturbations qui éloigne progressivement le système de son point de fonctionnement nominale est appliquée. Ces perturbations sont présentées à la figure 3.17. Les résultats de simulation de la figure 3.18, permettent de constater que cet algorithme est robuste par rapport au modèle M2 mais pas par rapport au modèle M3. En effet, pour un éloignement suffisant du point de fonctionnement, la réponse aux perturbations des constantes cinétiques oscille fortement.

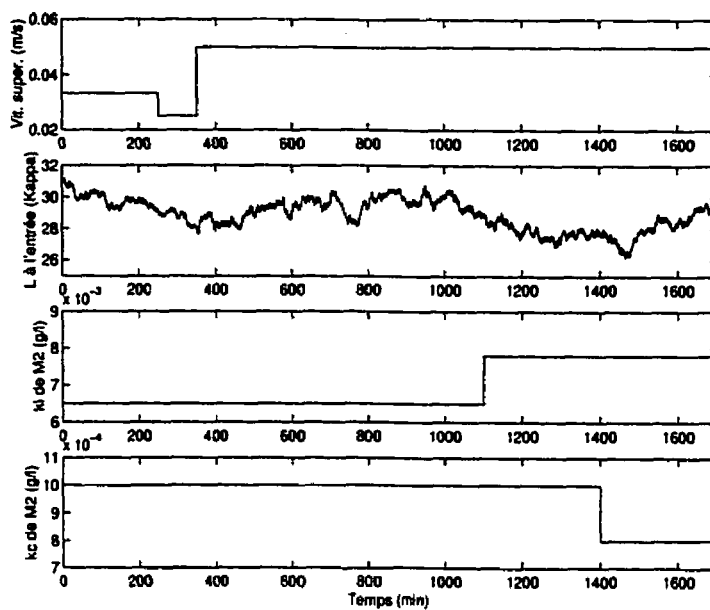


Figure 3.17 Variation de paramètres pour l'analyse de robustesse

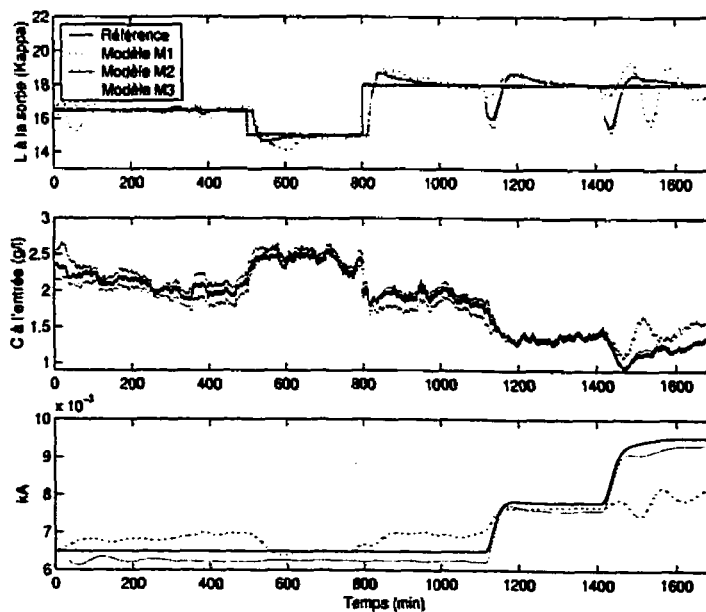


Figure 3.18 Commande par différences globales : analyse de robustesse

CHAPITRE 4

STRATÉGIE DE COMMANDE BASÉE SUR UNE POST-APPROXIMATION

Les stratégies de commande présentées dans le chapitre 3 n'utilisent pas toute l'information contenue dans le modèle à paramètres répartis. Ainsi, ces deux stratégies de commande peuvent présenter des limites dues à une mauvaise adéquation entre le modèle utilisé par le régulateur et le procédé. En effet, dans le cas de la commande prédictive, des oscillations sont observées lorsque le procédé s'éloigne trop du point de fonctionnement tandis que dans le cas de la commande par différences globales, des déviations importantes par rapport à la référence sont observées en réponse à l'échelon. Afin d'utiliser toute l'information disponible sur le procédé, l'utilisation directe du modèle d'EDP dans le régulateur peut être une approche intéressante. En plus d'être plus précis, ce modèle permet d'introduire, explicitement dans la stratégie de commande, les paramètres hydrodynamiques et les cinétiques de réaction. Ainsi, il est possible d'espérer un comportement adéquat sur une large plage de fonctionnement. Toutefois, l'utilisation d'un modèle non linéaire peut induire certains problèmes de robustesse si la structure du modèle n'est pas identifiée correctement.

Ce chapitre présente une structure originale de commande par post-approximation qui utilise directement le modèle à paramètres répartis du procédé dans la loi de commande. En effet, ce modèle est utilisé comme modèle interne dans une structure de commande composée de deux niveaux de régulateur. Cette structure est présentée dans la première partie du chapitre. Par la suite, la seconde partie présente la boucle interne alors que la conception de la boucle externe est traitée dans la

troisième partie. L'application au modèle de blanchiment de cette stratégie de commande par post-approximation est présentée dans la quatrième partie. Finalement, les principaux résultats de simulation sont présentés dans la cinquième partie du chapitre.

4.1 Stratégie de commande

Le problème de commande, identifié au chapitre 3, est de réguler la concentration à la sortie d'un réacteur de blanchiment en variant la concentration du dioxyde de chlore à l'entrée. La loi de commande choisie pour effectuer cette tâche doit, de plus, tenir compte de la variation de la lignine à l'entrée ainsi que des perturbations au niveau des paramètres cinétiques. Mathématiquement, le problème générique correspond donc à la régulation d'un système d'équations à paramètres répartis, non linéaire, stochastique et non-stationnaire par une condition frontière. Compte tenu de l'état actuel des connaissances, aborder mathématiquement ce problème de front est utopique. Afin d'obtenir une formulation plus simple pour la conception d'un régulateur par post-approximation, les simplifications suivantes sont donc utilisées:

1. *Les composants non-commandés à l'entrée du réacteur sont constants.* Cette simplification permet d'obtenir un système déterministe. Les variations de lignine à l'entrée du réacteur devront toutefois être compensées par l'ajout d'une composante anticipative à la loi de commande.
2. *Les constantes cinétiques constantes mais inconnues.* Cette simplification permet d'obtenir un système stationnaire. Cette hypothèse est valide dans la cas d'une stratégie de commande adaptative si les paramètres cinétiques

varient très lentement ou s'ils sont constants sur des périodes de temps suffisamment longues pour que l'adaptation converge.

Le problème se résume donc à la régulation par la condition frontière d'entrée d'un système d'équations non linéaires à paramètres répartis avec des coefficients inconnus. Par soucis de généralisation, le développement d'une stratégie de commande est fait pour un réacteur tubulaire avec m réactions impliquant n composants. Le système considéré est donc:

$$\frac{\partial A(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial A(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 A(z, t)}{\partial z^2} - KR(A(z, t)) \quad (4.1)$$

$$D \frac{\partial A(0, t)}{\partial z} = v(A(0, t) - A_{in}) \quad (4.2)$$

$$D \frac{\partial A(\ell, t)}{\partial z} = 0 \quad (4.3)$$

Dans ce modèle, $A(z, t)$ (*mol/l*) est un vecteur de dimension $(n, 1)$ qui contient les profils de concentration des composants du réacteur. L'hydrodynamique du réacteur est caractérisée par deux matrices diagonales de dimension (n, n) soit v (*m/s*) qui contient la vitesse superficielle v de chaque composant et D (*m²/s*) qui contient le coefficient de dispersion D de chaque composant. Les cinétiques sont décrites par le terme $-KR(A(z, t))$ où K est une matrice (n, m) qui contient les constantes cinétiques alors que $R(A(z, t))$ est un champ vectoriel de dimension $(m, 1)$ qui comporte le reste du terme cinétique. En accord avec les simplifications proposées, les matrices v , D et $R(A(z, t))$ sont supposées être connues contrairement aux coefficients de la matrice K . Dans ce modèle, la variable manipulée est notée A_{in}^* tandis que la variable commandée est notée A_{out}^* .

Les hypothèses simplificatrices utilisées pour obtenir ce modèle imposent l'utilisation d'une stratégie de commande adaptative pouvant inclure une composante anticipative. La composante adaptative permettra de déterminer des valeurs admissibles

pour les paramètres cinétiques inconnus alors que la composante anticipative est utilisée pour compenser les variations des composants libres à l'entrée du réacteur.

La structure de commande proposée est composée de deux niveaux de régulateur. Tout d'abord un régulateur adaptatif basé sur une structure à modèle interne permet d'assurer la convergence entre le modèle et le procédé. Cette loi de commande a donc comme objectif d'identifier en ligne des paramètres cinétiques minimisant l'erreur entre le modèle et le procédé. Par contre, elle ne permet pas d'assurer la convergence vers un point de consigne à la sortie car la référence à l'entrée de la variable manipulée est utilisée comme point de consigne. Cette tâche est alors accomplie par un régulateur externe. Ce régulateur utilise les paramètres identifiés par le régulateur adaptatif ainsi que les mesures à l'entrée et à la sortie du réacteur pour déterminer l'effort de commande requis à l'entrée pour atteindre le point de consigne à la sortie. Cet effort de commande est donc le point de consigne du régulateur adaptatif tout comme dans le cas d'un régulateur de type cascade. Le régulateur externe peut utiliser une stratégie basée sur la rétroaction, l'anticipation ou une combinaison des deux approches.

4.2 Conception du régulateur adaptatif

La seconde méthode de Lyapunov, présentée entre autres dans Khalil (1996), est utilisée pour faire la conception du régulateur adaptatif. Cette technique utilise une fonction définie positive qui représente l'erreur que l'on désire minimiser. L'analyse de la dérivée dans le temps de cette fonction permet la conception du régulateur. En effet, le régulateur doit être choisi de telle sorte que la dérivée dans le temps de la fonction d'erreur soit strictement définie négative. Ainsi, au cours du temps, la fonction ne peut que décroître ce qui permet de tendre vers une erreur nulle.

Cette convergence et la stabilité du système sont assurées par le théorème de Lyapunov. Le choix de la fonction d'erreur, qui est alors appelé fonction de Lyapunov, représente la principale difficulté de cette technique.

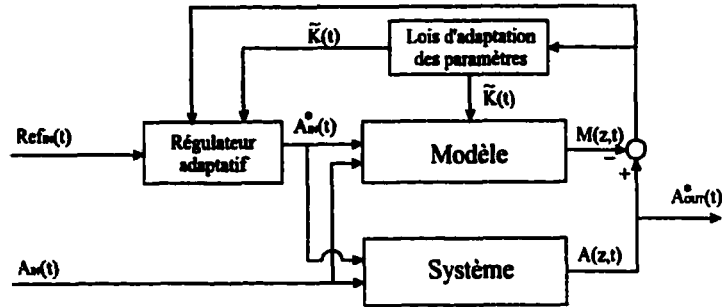


Figure 4.1 Structure du régulateur interne

La stratégie de commande choisie avec modèle interne se prête bien à l'application de cette méthode de conception. En effet, une fonction de Lyapunov peut être construite en utilisant l'erreur entre le modèle et le système ainsi que les erreurs d'estimation des paramètres. Cette analyse permettra de concevoir la loi de commande ainsi que les lois d'adaptation qui forment le régulateur adaptatif dont la structure est présentée à la figure 4.1. La convergence du modèle vers le système est alors assurée par la proposition suivante:

Proposition

Soit le système à paramètres répartis suivant:

$$\frac{\partial A(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial A(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 A(z, t)}{\partial z^2} - KR(A(z, t)) \quad (4.4)$$

$$D \frac{\partial A(0, t)}{\partial z} = v(A(0, t) - A_{in}) \quad (4.5)$$

$$D \frac{\partial A(\ell, t)}{\partial z} = 0 \quad (4.6)$$

et le modèle interne à paramètres répartis suivant:

$$\frac{\partial M(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial M(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 M(z, t)}{\partial z^2} - \bar{K}(t) R(M(z, t)) \quad (4.7)$$

$$D \frac{\partial M(0, t)}{\partial z} = v(M(0, t) - A_{in}) \quad (4.8)$$

$$D \frac{\partial M(\ell, t)}{\partial z} = 0 \quad (4.9)$$

L'erreur entre la solution du modèle $M(z, t)$ et la solution du système $A(z, t)$ tend vers zéro lorsque t tend vers l'infini lorsque la loi de commande

$$\begin{aligned} (A_{in}(t) - Ref_{in}(t)) \dot{A}_{in}^*(t) &= -\epsilon \left[\sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), -v_{ii} \frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z} \rangle \right. \\ &+ \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), \sum_{j=1}^m \bar{K}_{ij}(t) Q_j(z, t) \rangle \\ &+ \left. \frac{1}{\epsilon} (A_{in}^*(t) - Ref_{in}(t)) Ref_{in}(t) \right] \quad (4.10) \end{aligned}$$

et la loi d'adaptation

$$\dot{\psi}_{ij}(t) = -a_{ij} \langle e_i(z, t), R_j(A(z, t)) \rangle \quad (4.11)$$

sont utilisés.

La preuve de cette proposition est basée sur l'utilisation de la seconde méthode de Lyapunov. Afin de construire une fonction de Lyapunov, les équations d'erreur suivantes sont considérées:

$$e(z, t) = A(z, t) - M(z, t) \quad (4.12)$$

$$\psi(t) = \bar{K}(t) - K \quad (4.13)$$

$$Q(z, t) = R(A(z, t)) - R(M(z, t)) \quad (4.14)$$

En utilisant ces équations, il est possible de construire la fonction d'erreur définie positive suivante:

$$V(z, t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), e_i(z, t) \rangle + \frac{1}{2\epsilon} (A_{in}^*(t) - Ref(t)_{in})^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \frac{1}{a_{ij}} \psi_{ij}^2(t) \quad (4.15)$$

Cette fonction de Lyapunov inclut l'erreur entre les profils du modèle et ceux du système, l'erreur sur l'estimation des paramètres ainsi que l'erreur entre la variable manipulée et la référence interne. Ce dernier terme est ajouté afin de faire apparaître explicitement l'effort de commande dans la dérivée de la fonction de Lyapunov et permettre ainsi la construction de la loi de commande. Le calcul de la dérivée dans le temps de la fonction de Lyapunov permet d'obtenir:

$$\begin{aligned} \dot{V}(z, t) &= \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), \dot{e}_i(z, t) \rangle + \frac{1}{\epsilon} (A_{in}^*(t) - Ref(t)) \dot{A}_{in}^*(t) \\ &+ \frac{1}{\epsilon} (A_{in}^*(t) - Ref_{in}(t)) \dot{Ref}_{in}(t) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \frac{1}{a_{ij}} \psi_{ij}(t) \dot{\psi}_{ij}(t) \quad (4.16) \end{aligned}$$

La dérivée dans le temps de l'erreur sur les profils est alors calculée de la façon suivante:

$$\dot{e}(z, t) = -v \frac{\partial e(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 e(z, t)}{\partial z^2} - KR(A(z, t)) + \tilde{K}(t)R(M(z, t)) \quad (4.17)$$

$$\dot{e}(z, t) = -v \frac{\partial e(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 e(z, t)}{\partial z^2} - \psi(t)R(A(z, t)) + \tilde{K}(t)Q(z, t) \quad (4.18)$$

De plus, la dérivée temporelle de l'erreur sur les paramètres cinétiques est simplement:

$$\dot{\psi}(t) = \dot{\tilde{K}}(t) \quad (4.19)$$

En utilisant ces dérivées des erreurs, il est possible d'obtenir l'expression suivante:

$$\dot{V}(z, t) = \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), -v_{ii} \frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z} \rangle + \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), D_{ii} \frac{\partial^2 e_i(z, t)}{\partial z^2} \rangle$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), \sum_{j=1}^m \psi_{ij}(t) R_j(A(z, t)) \rangle + \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), \sum_{j=1}^m \tilde{K}_{ij}(t) Q_j(z, t) \rangle \\
& + \frac{1}{\epsilon} (A_{in}^*(t) - Ref(t)_{in}) \dot{C}_{in}^*(t) + \frac{1}{\epsilon} (A_{in}^*(t) - Ref(t)_{in}) \dot{R}ef_{in}(t) \\
& + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \frac{1}{a_{ij}} \psi_{ij}(t) \dot{\psi}_{ij}(t)
\end{aligned} \tag{4.20}$$

L'intégration par parties des termes du deuxième ordre $\langle e_i(z, t), D_{ii} \frac{\partial^2 e_i(z, t)}{\partial z^2} \rangle$ donne:

$$\begin{aligned}
\dot{V}(z, t) & = \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), -v_{ii} \frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z} \rangle + \sum_{i=1}^n \langle \frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z}, -D_{ii} \frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z} \rangle \\
& + \sum_{i=1}^n e_i(z, t) D_{ii} \frac{\partial e_i}{\partial z} \Big|_l - \sum_{i=1}^n e_i(z, t) D_{ii} \frac{\partial e_i}{\partial z} \Big|_0 \\
& + \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), \sum_{j=1}^m \psi_{ij}(t) R_j(A(z, t)) \rangle + \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), \sum_{j=1}^m \tilde{K}_{ij}(t) Q_j(z, t) \rangle \\
& + \frac{1}{\epsilon} (A_{in}^*(t) - Ref_{in}(t)) \dot{A}_{in}^*(t) + \frac{1}{\epsilon} (A_{in}^*(t) - Ref_{in}(t)) \dot{R}ef_{in}(t) \\
& + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \frac{1}{a_{ij}} \psi_{ij}(t) \dot{\psi}_{ij}(t)
\end{aligned} \tag{4.21}$$

Pour simplifier cette expression, les conditions frontières du système et du modèle définis dans la proposition sont introduites, ce qui permet d'obtenir:

$$\begin{aligned}
\dot{V}(z, t) & = \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), -v_{ii} \frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z} \rangle + \sum_{i=1}^n \langle \frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z}, -D_{ii} \frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z} \rangle \\
& - \sum_{i=1}^n e_i(0, t) D_{ii} e_i(0, t) + \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), \sum_{j=1}^m \psi_{ij}(t) R_j(A(z, t)) \rangle \\
& + \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), \sum_{j=1}^m \tilde{K}_{ij}(t) Q_j(z, t) \rangle + \frac{1}{\epsilon} (A_{in}^*(t) - Ref_{in}(t)) \dot{A}_{in}^*(t) \\
& + \frac{1}{\epsilon} (A_{in}^*(t) - Ref_{in}(t)) \dot{R}ef_{in}(t) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \frac{1}{a_{ij}} \psi_{ij}(t) \dot{\psi}_{ij}(t)
\end{aligned} \tag{4.22}$$

L'équation d'adaptation des paramètres est choisie de la façon suivante:

$$\dot{\psi}_{ij}(t) = -a_{ij} \langle e_i(z, t), R_j(A(z, t)) \rangle \tag{4.23}$$

Ce qui permet de simplifier l'équation 4.22 car:

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \frac{1}{a_{ij}} \psi_{ij}(t) \dot{\psi}_{ij}(t) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \frac{1}{a_{ij}} \psi_{ij}(t) - a_{ij} \langle e_i(z, t), R_j(A(z, t)) \rangle \quad (4.24)$$

$$= - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \psi_{ij}(t) \langle e_i(z, t), R_j(A(z, t)) \rangle \quad (4.25)$$

$$= - \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), \sum_{j=1}^m \psi_{ij}(t) R_j(A(z, t)) \rangle \quad (4.26)$$

$$(4.27)$$

La dérivée de la fonction de Lyapunov devient alors:

$$\begin{aligned} \dot{V}(z, t) &= \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), -v_{ii} \frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z} \rangle + \sum_{i=1}^n \langle \frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z}, -D_{ii} \frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z} \rangle \\ &- \sum_{i=1}^n e_i(0, t) D_{ii} e_i(0, t) + \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), \sum_{j=1}^m \tilde{K}_{ij}(t) Q_j(z, t) \rangle \\ &+ \frac{1}{\epsilon} (A_{in}^*(t) - Ref_{in}(t)) \dot{A}_{in}^*(t) + \frac{1}{\epsilon} (A_{in}^*(t) - Ref_{in}(t)) \dot{Ref}_{in}(t) \quad (4.28) \end{aligned}$$

Finalement en choisissant la loi de commande suivante:

$$\begin{aligned} (A_{in}(t) - Ref_{in}(t)) \dot{A}_{in}^*(t) &= -\epsilon \left[\sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), -v_{ii} \frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z} \rangle \right. \\ &+ \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), \sum_{j=1}^m \tilde{K}_{ij}(t) Q_j(z, t) \rangle \\ &+ \left. \frac{1}{\epsilon} (A_{in}^*(t) - Ref_{in}(t)) \dot{Ref}_{in}(t) \right] \quad (4.29) \end{aligned}$$

L'expression de la fonction de Lyapunov devient:

$$\dot{V}(z, t) = - \sum_{i=1}^n \langle \frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z}, D_{ii} \frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z} \rangle - \sum_{i=1}^n e_i(0, t) D_{ii} e_i(0, t) \quad (4.30)$$

Cette expression est semi-définie négative. Toutefois, les concentrations des réactifs ne sont jamais nulle à l'entrée du réacteur ce qui assure la condition d'excitation

persistante et la stabilité asymptotique du système. De plus, la convergence du modèle vers le système est assurée. En effet, au point d'équilibre, la fonction de Lyapunov assure que pour chacun des composants, les relations suivantes sont vérifiées:

$$\frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z} = 0 \quad (4.31)$$

$$e_i(0, t) = 0 \quad (4.32)$$

Or, par définition de l'intégrale, l'erreur entre le modèle et le système pour chaque composant vérifie:

$$e_i(z, t) = e_i(0, t) + \int_0^z \frac{\partial e(\tau, t)}{\partial z} d\tau \quad (4.33)$$

En utilisant l'inégalité du triangle sur cette équation et en majorant, il est possible de montrer que le modèle converge bien vers le système de la façon suivante:

$$\|e_i(z, t)\| = \|e_i(0, t) + \int_0^z \frac{\partial e(\tau, t)}{\partial z} d\tau\| \quad (4.34)$$

$$\leq \|e_i(0, t)\| + \left\| \int_0^z \frac{\partial e(\tau, t)}{\partial z} d\tau \right\| \quad (4.35)$$

$$\leq \|e_i(0, t)\| + \int_0^z \left\| \frac{\partial e(\tau, t)}{\partial z} \right\| d\tau \quad (4.36)$$

$$\leq \|e_i(0, t)\| + \int_0^\ell \left\| \frac{\partial e(\tau, t)}{\partial z} \right\| d\tau \quad (4.37)$$

$$\leq \|0\| + \int_0^\ell \|0\| d\tau \quad (4.38)$$

$$\leq 0 \quad (4.39)$$

Ce qui permet de conclure la preuve de la proposition.

La loi de commande 4.29 construite par cette approche doit toutefois être modifiée afin d'éviter des divisions par zéro lors de la mise en oeuvre. La loi de commande

suivante est donc obtenue:

$$\begin{aligned} \dot{\bar{A}}_{in}^* &= \frac{(A_{in}^* - Ref_{in})^2}{w + (A_{in}^* - Ref_{in})^2} \bar{A}_{in}^* \\ &+ \frac{(A_{in}^* - Ref_{in})}{w + (A_{in}^* - Ref_{in})^2} f_c \end{aligned} \quad (4.40)$$

$$\dot{A}_{in}^* = \bar{A}_{in}^* \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned} f_c &= \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), -v_{ii} \frac{\partial e_i(z, t)}{\partial z} \rangle \\ &+ \sum_{i=1}^n \langle e_i(z, t), \sum_{j=1}^m \tilde{K}_{ij}(t) Q_j(z, t) \rangle \\ &+ \frac{1}{\epsilon} (A_{in}^*(t) - Ref_{in}(t)) \dot{Ref}_{in}(t) \end{aligned} \quad (4.42)$$

Dans cette expression, w est un paramètre d'ajustement de petite valeur positive. Cette loi de commande est identique à la loi originale si $\dot{\bar{A}}_{in}^* = 0$. De plus, lorsque l'erreur entre le modèle et le système est nulle, la loi de commande se résume à l'expression de la référence interne soit:

$$\dot{A}_{in}^*(t) = \dot{Ref}_{in}(t) \quad (4.43)$$

4.3 Conception du régulateur externe

Le rôle du régulateur externe est de déterminer la référence interne qui permettra d'atteindre le point de consigne à la sortie du réacteur tout en minimisant l'impact des perturbations. L'utilisation d'un régulateur adaptatif interne modifie peu la problématique de la conception du régulateur externe. En effet, l'action de ce régulateur est présente seulement lorsque le modèle diffère du système. Dans tous les autres cas, le problème de régulation reste entier. Toutefois, le régulateur externe peut bénéficier de l'identification en ligne des paramètres cinétiques.

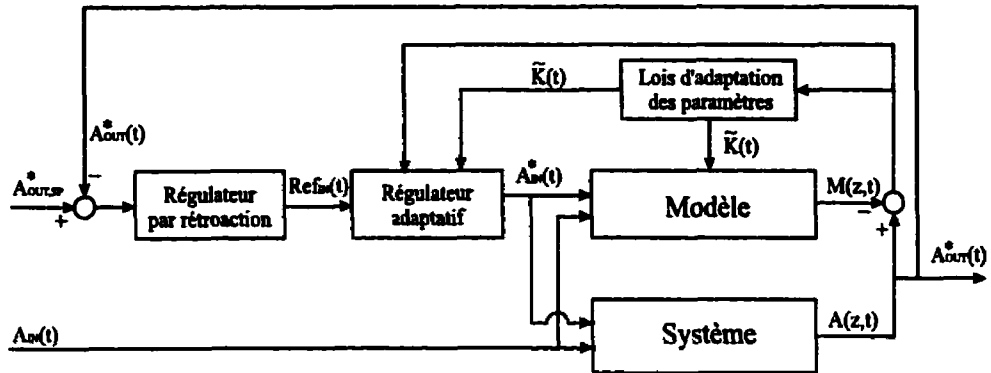


Figure 4.2 Structure du régulateur avec rétroaction

La figure 4.2 présente la structure du régulateur avec une boucle externe par rétroaction. Il est possible d'utiliser comme régulateur externe par rétroaction tout type de compensateur qui peut être formulé sous une forme différentielle. Par exemple, le simple compensateur proportionnel-intégral suivant peut être utilisé:

$$\dot{Ref}_{in}(t) = \theta(A_{out}^*(t) - A_{out,SP}^*) + \gamma \dot{A}_{out}^*(t) \quad (4.44)$$

L'action de ce régulateur peut être décomposée en deux. En effet, l'action proportionnelle est instantanée et ne se produit que lorsqu'il y a des variations du point de consigne tandis que l'action intégrale modifie en tout temps l'effort de commande pour que le procédé atteigne le point de consigne. Toutefois, l'utilisation d'une simple rétroaction n'est pas efficace si les composants à l'entrée du réacteur subissent de fortes variations. En effet, si le réacteur a un temps de résidence important, une compensation adéquate n'est pas possible car l'information sur la perturbation est disponible seulement lorsque son effet est terminé. Ainsi, une stratégie avec anticipation doit être considérée.

La figure 4.3 présente la structure du régulateur avec une boucle externe par anticipation. Ce régulateur détermine à partir du modèle à paramètres répartis la

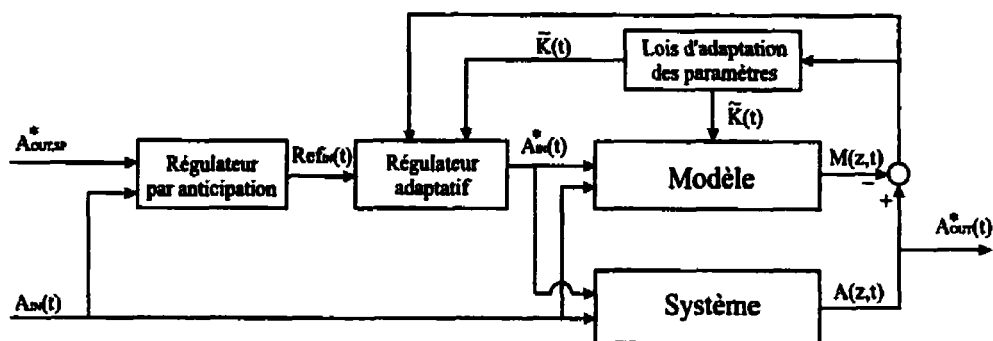


Figure 4.3 Structure du régulateur avec anticipation

commande A_{in}^* requise pour atteindre la consigne en tenant compte des composants non-manipulés à chaque pas de temps. Ce calcul est réalisé à l'aide d'une combinaison d'un algorithme de tir et d'un algorithme de relaxation. La méthode de relaxation est utilisée pour solutionner le modèle à des conditions frontières données alors que la méthode de tir est utilisée pour déterminer progressivement la valeur de A_{in}^* permettant d'obtenir le point de consigne désiré à la sortie du réacteur. Cet algorithme est mis en oeuvre en utilisant la méthode des différences finies sur un maillage de $N + 1$ noeuds. Soit le système en régime permanent suivant pour un composant A_i :

$$v \frac{dA_i(z)}{dz} = D \frac{d^2 A_i(z)}{dz^2} - \tilde{K}(t) R(A(z)) \quad (4.45)$$

$$D \frac{dA_i(0)}{dz} = v(A_i(0) - A_{i,in}) \quad (4.46)$$

$$D \frac{dA_i(\ell)}{dz} = 0 \quad (4.47)$$

La dérivée du second ordre de cette équation est approximée par une différence finie centrée alors que la dérivée du premier ordre est approximée par une différence

arrière. Ainsi, il est possible d'obtenir au noeud k , l'approximation suivante:

$$\frac{d\bar{A}_i(z_k)}{dz} \approx \frac{\bar{A}_i(z_k) - \bar{A}_i(z_{k-1})}{(\Delta z)} \quad (4.48)$$

$$\frac{d^2\bar{A}_i(z_k)}{dz^2} \approx \frac{\bar{A}_i(z_{k+1}) - 2\bar{A}_i(z_k) + \bar{A}_i(z_{k-1}))}{(\Delta z)^2} \quad (4.49)$$

Pour les conditions frontières, les approximations suivantes sont obtenues:

$$D \frac{dA_i(0)}{dz} \approx D \frac{\bar{A}_i(1) - \bar{A}_i(0)}{\Delta z} = v(\bar{A}_i(0) - \bar{A}_{i,in}) \quad (4.50)$$

$$D \frac{dA_i(\ell)}{dz} \approx D \frac{\bar{A}_i(N) - \bar{A}_i(N-1)}{\Delta z} = 0 \quad (4.51)$$

De cette façon, il est possible de formuler l'approximation par différences finies avec les conditions frontières pour un composant du réacteur tel que:

$$M_{0,i} + M_{1,i}\bar{A}_i + M_{2,i}\bar{A}_i + M_{3,i}(\bar{A}) = 0 \quad (4.52)$$

Cette formulation est composée des éléments ci-dessous:

$$\bar{A}_i = \left[\bar{A}_i(0) \quad \bar{A}_i(1) \quad \dots \quad \bar{A}_i(N) \right]^T \quad (4.53)$$

$$M_{0,i} = \frac{v}{\Delta z} \left[A_{in,i} \quad 0 \quad \dots \quad 0 \right]^T \quad (4.54)$$

$$M_{1,i} = \frac{D}{(\Delta z)^2} \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.55)$$

$$M_{2,i} = \frac{v}{\Delta z} \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.56)$$

$$M_{3,i} = \begin{bmatrix} 0 \\ \sum_{j=1}^m \tilde{K}_{ij}(t) R_j \bar{A}(z_1) \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^m \tilde{K}_{ij}(t) R_j \bar{A}(z_{N-1}) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.57)$$

Une équation matricielle avec des matrices bloc-diagonales peut alors être construite pour l'ensemble des composants du réacteur :

$$M_0 + M_1 \bar{A} + M_2 \bar{A} + M_3(\bar{A}) = 0 \quad (4.58)$$

À partir de cette formulation du problème en régime permanent, les profils de concentrations du réacteur peuvent être calculés en utilisant l'algorithme de relaxation suivant:

1. Estimation initiale $\bar{A}(k)$ des profils;
2. Calcul des résidus $E(k)$. Ces résidus sont obtenus en introduisant la valeur estimée de la solution $\bar{A}(k)$ dans le problème en régime permanent initial;
3. Calcul de l'incrément $\Delta \bar{A}$ selon la méthode de Newton à l'aide de l'équation suivante:

$$\frac{\partial(M_0 + M_1 \bar{A} + M_2 \bar{A} + M_3(\bar{A}))}{\partial \bar{A}} \Delta \bar{A} = -E(k) \quad (4.59)$$

4. Construction de la nouvelle valeur estimée de la réponse en régime permanent;

$$\bar{A}(k+1) = \bar{A}(k) + \Delta \bar{A} \quad (4.60)$$

5. Répétition de la procédure jusqu'à la vérification d'un critère d'arrêt sur la norme de l'incrément

Cet algorithme de calcul du régime permanent est alors utilisé dans l'algorithme de tir suivant qui forme la loi de commande par anticipation:

1. Choix d'un estimé initial de l'effort de commande A_{in}^* ;
2. Résolution de l'algorithme de relaxation pour obtenir le A_{out}^* correspondant;
3. Calcul de l'erreur entre la valeur de la variable commandée obtenue A_{out}^* et le point de consigne $A_{out,sp}^*$;
4. Ajustement de A_{in}^* selon l'erreur obtenue tel que

$$A_{in}^* = A_{in}^* + \delta(A_{out}^* - A_{out,sp}^*) \quad (4.61)$$

où δ doit être choisi pour obtenir une convergence adéquate.

Cet algorithme permet d'obtenir des résultats adéquats si le modèle représente bien le système. De plus, la combinaison avec le régulateur adaptatif permet d'obtenir un comportement adéquat malgré une perturbation des paramètres cinétiques. Toutefois, cet algorithme est sensible à une mauvaise identification de la structure de la cinétique. En effet, il conduit inévitablement à une erreur en régime

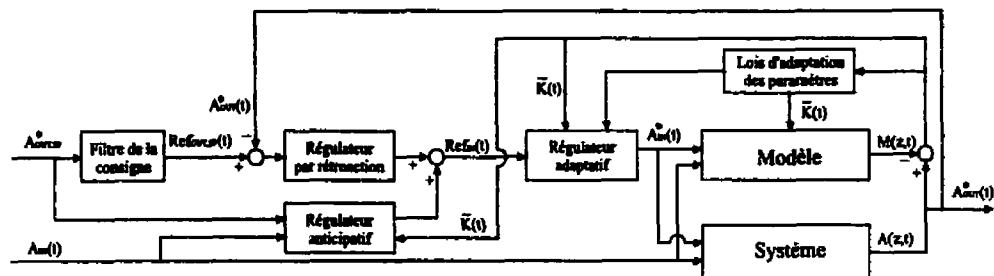


Figure 4.4 Structure du régulateur avec anticipation et rétroaction

permanent si la structure de la cinétique du procédé diffère trop de celle du modèle car aucune information sur la sortie du procédé n'est utilisée par l'algorithme.

La figure 4.4 présente la structure du régulateur avec une boucle externe qui combine une action de rétroaction et une action d'anticipation. En fait, la base de la boucle externe de cette structure est formée du régulateur par anticipation. Dans le cas où le procédé diffère du modèle, il est possible d'assurer une bonne compensation à l'aide d'une boucle de compensation par rétroaction. Tout d'abord, afin d'éliminer l'impact du retard, le point de consigne $A_{out,sp}^*$ du régulateur par rétroaction est modifié en fonction de l'hydrodynamique du modèle. En effet, le nouveau point de consigne $Ref_{out,sp}$ pour le régulateur par rétroaction est la solution du système d'équations suivant:

$$\frac{\partial Ref(z, t)_{sp}}{\partial t} = -v \frac{\partial Ref(z, t)_{sp}}{\partial z} + D \frac{\partial^2 Ref(z, t)_{sp}}{\partial z^2} \quad (4.62)$$

$$D \frac{\partial Ref(0, t)_{sp}}{\partial z} = v(Ref(0, t)_{sp} - A_{out,sp}^*) \quad (4.63)$$

$$D \frac{\partial Ref(\ell, t)_{sp}}{\partial z} = 0 \quad (4.64)$$

$$Ref_{out,sp} = Ref(\ell, t)_{sp} \quad (4.65)$$

Ainsi, $Ref_{out,sp}$ représente le comportement attendu à la sortie du réacteur. Ce signal est par la suite comparé à la véritable sortie du réacteur. L'erreur entre les

deux signaux alimente le régulateur par rétroaction qui peut être alors un simple intégrateur car son rôle se limite à compenser la dérive du compensateur anticipatif.

Le régulateur par rétroaction est alors simplement:

$$Ref_{in}(t) = \theta(A_{out}^*(t) - A_{out,SP}^*) \quad (4.66)$$

4.4 Application au réacteur de blanchiment

Afin d'appliquer au réacteur de blanchiment le formalisme de la section précédente, le modèle M1 du chapitre 1 peut être exprimé de la façon suivante:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} C(z,t) \\ L(z,t) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} v & 0 \\ 0 & v \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} C(z,t) \\ L(z,t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \begin{bmatrix} C(z,t) \\ L(z,t) \end{bmatrix} \\ &- \begin{bmatrix} k_C & 0 \\ 0 & k_L \end{bmatrix} L^2(z,t)C^2(z,t) \end{aligned} \quad (4.67)$$

Les conditions frontières sont alors:

$$\begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} C(0,t) \\ L(0,t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v & 0 \\ 0 & v \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} C(0,t) \\ L(0,t) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} C_{in}^* \\ L_{in} \end{bmatrix} \right) \quad (4.68)$$

$$\begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} C(\ell,t) \\ L(\ell,t) \end{bmatrix} = 0 \quad (4.69)$$

La variable commandée est donc ici L_{out} et la variable manipulée est C_{in} . Le modèle interne suivant est utilisé:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} N(z, t) \\ M(z, t) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} v & 0 \\ 0 & v \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} N(z, t) \\ M(z, t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \begin{bmatrix} N(z, t) \\ M(z, t) \end{bmatrix} \\ &- \begin{bmatrix} \bar{k}_C & 0 \\ 0 & \bar{k}_L \end{bmatrix} M^p(z, t) N^p(z, t) \end{aligned} \quad (4.70)$$

Les conditions frontières de ce modèle sont:

$$\begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} N(0, t) \\ M(0, t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v & 0 \\ 0 & v \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} N(0, t) \\ M(0, t) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} C_{in} \\ L_{in} \end{bmatrix} \right) \quad (4.71)$$

$$\begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} N(\ell, t) \\ M(\ell, t) \end{bmatrix} = 0 \quad (4.72)$$

La loi de commande adaptative directe est alors:

$$\dot{\bar{C}}_{in} = \frac{(C_{in} - Ref_{in})^2}{w + (C_{in} - Ref_{in})^2} \bar{C}_{in} \quad (4.73)$$

$$+ \frac{(C_{in} - Ref_{in})}{w + (C_{in} - Ref_{in})^2} f_c$$

$$\dot{\bar{C}}_{in} = \bar{C}_{in}^* \quad (4.74)$$

$$\begin{aligned} f_c &= \langle e_L(z, t), -v \frac{\partial e_L(z, t)}{\partial z} \rangle + \langle e_C(z, t), -v \frac{\partial e_C(z, t)}{\partial z} \rangle \\ &+ \langle e_L(z, t), \bar{k}_L(t) (L(z, t)^2 C(z, t)^2 - M(z, t)^2 N(z, t)^2) \rangle \\ &+ \langle e_C(z, t), \bar{k}_C(t) (L(z, t)^2 C(z, t)^2 - M(z, t)^2 N(z, t)^2) \rangle \\ &+ \frac{1}{\epsilon} (C_{in}(t) - Ref_{in}(t)) \dot{Ref}_{in}(t) \end{aligned} \quad (4.75)$$

Les lois d'adaptation des paramètres cinétiques sont définies par:

$$\dot{\bar{k}}_L(t) = -a \langle e_L(z, t), L(z, t)^2 C(z, t)^2 \rangle \quad (4.76)$$

$$\dot{\bar{k}}_C(t) = -b \langle e_C(z, t), L(z, t)^2 C(z, t)^2 \rangle \quad (4.77)$$

Finalement, le régulateur par rétroaction est simplement:

$$\dot{Ref}(t) = -\theta(C_{out} - C_{out,SP}^*) \quad (4.78)$$

La mise en oeuvre du régulateur interne adaptatif en accord avec les capteurs disponibles implique des ajustements importants. En effet, l'application de ce régulateur nécessite la mesure de tous les profils et le calcul de leur dérivées spatiales. En simulation, la post-approximation se limite à l'utilisation du maillage de la méthode numérique utilisée. Bien évidemment, cette information n'est pas disponible en usine. L'hypothèse sur les capteurs du chapitre 3 limite à deux le nombre de capteurs disponibles: un à l'entrée du réacteur et l'autre à la sortie du réacteur. Pour tenir compte de cette contrainte, la loi de commande adaptative est modifiée de la façon suivante:

$$\dot{\tilde{C}}_{in} = \frac{(C_{in} - Ref_{in})^2}{w + (C_{in} - Ref_{in})^2} \tilde{C}_{in} \quad (4.79)$$

$$+ \frac{(C_{in} - Ref_{in})}{w + (C_{in} - Ref_{in})^2} f_c$$

$$\dot{C}_{in} = \tilde{C}_{in}^* \quad (4.80)$$

$$f_c = \langle e_{L,in}(t), \bar{k}_L(t)(L_{in}(t)^2 C_{in}(t)^2 - M_{in}(t)^2 N_{in}(t)^2) \rangle$$

$$+ \langle e_{L,out}(t), \bar{k}_L(t)(L_{out}(t)^2 C_{out}(t)^2 - M_{out}(t)^2 N_{out}(t)^2) \rangle$$

$$+ \langle e_{C,in}(t), \bar{k}_C(t)(L_{in}(t)^2 C_{in}(t)^2 - M_{in}(t)^2 N_{in}(t)^2) \rangle$$

$$+ \langle e_{C,out}(t), \bar{k}_C(t)(L_{out}(t)^2 C_{out}(t)^2 - M_{out}(t)^2 N_{out}(t)^2) \rangle$$

$$+ \frac{1}{\epsilon} (C_{in}(t) - Ref_{in}(t)) \dot{Ref}_{in}(t) \quad (4.81)$$

De la même façon, les lois d'adaptation des paramètres deviennent:

$$\dot{\bar{k}}_L(t) = -a(\langle e_{L,in}(z,t), L_{in}(z,t)^2 C_{in}(z,t)^2 \rangle$$

$$+ \langle e_{L,out}(z,t), L_{out}(z,t)^2 C_{out}(z,t)^2 \rangle \quad (4.82)$$

$$\begin{aligned} \dot{k}_C(t) = & -b(\langle e_{C,in}(z,t), L_{in}(z,t)^2 C_{in}(z,t)^2 \rangle \\ & + \langle e_{C,out}(z,t), L_{out}(z,t)^2 C_{out}(z,t)^2 \rangle) \end{aligned} \quad (4.83)$$

Le réglage des paramètres de ce régulateur implique le choix de cinq paramètres soit ϵ , θ , a , b et w . Le réglage d'un nombre si important de paramètres peut s'avérer particulièrement lourd et délicat compte tenu de la durée importante des simulations dans le cas des systèmes à paramètres répartis. Toutefois, la structure de commande proposée est relativement découplée, ce qui permet un ajustement relativement facile des paramètres. Le réglage peut débuter par le choix de a et b , qui déterminent la rapidité de l'adaptation des paramètres cinétiques. Si le système admet une seule solution, il est possible d'obtenir une convergence lisse et rapide. Dans le cas contraire, des oscillations entre les différentes solutions admissibles peuvent apparaître. Dans ce cas, les solutions possibles sont de limiter la vitesse d'adaptation ou d'assurer une bonne initialisation. Une fois l'adaptation des paramètres cinétiques ajustée, les paramètres θ and ϵ peuvent être considérés. Le paramètre θ ajuste l'effort de l'intégrateur, il doit donc être réglé afin d'obtenir une réponse adéquate en présence de perturbations non-modélisées. Son ajustement est facilité en utilisant une perturbation exogène à la sortie du réacteur. Le paramètre ϵ détermine l'impact de la commande adaptative directe. Il permet donc de doser l'effort de cette commande par rapport à la commande de la boucle externe. Plus la structure du système est proche du modèle, plus la valeur de ce paramètre peut être élevée. Ce paramètre doit donc être ajusté pour une performance adéquate dans le pire cas possible de mauvaise adéquation entre le modèle et le système. Finalement, le paramètre w est utilisé seulement afin d'éviter une division par zéro lors de la mise en oeuvre. Il suffit donc de choisir la plus petite valeur qui assure un effort de commande suffisamment lisse. Le tableau 4.1 résume les fonctions de chacun des paramètres de réglage.

Tableau 4.1 Fonction des paramètres de réglage

Ordre de réglage	Paramètres	Objectif de réglage
1	a, b	Rapidité de l'adaptation
2	θ	Travail de l'intégrateur
3	ϵ	Impact de la commande adaptative directe
4	w	Filtre de l'action de commande

4.5 Résultats de simulation

Toutes les simulations sont effectuées en utilisant la méthode par alternance avec un maillage de 100 noeuds et le modèle M1. Les paramètres d'ajustement du régulateur ont été fixés aux valeurs suivantes:

$$\begin{aligned}
 \epsilon &= 0.0001 & \theta &= 0.002 \\
 a &= 0.000005 & b &= 0.000005 \\
 w &= 0.0000001
 \end{aligned}
 \tag{4.84}$$

La figure 4.5 présente les performances de la commande par post-approximation à des variations du débit. Le régulateur permet de compenser adéquatement ce type de perturbation avec une faible déviation de la référence. La compensation semble s'effectuer en deux temps: une compensation rapide grossière puis un retour plus lent vers la référence. Dans le cas des variations de consignes présentées à la figure 4.6, le comportement du régulateur est optimal. La réponse est typique d'une stratégie par anticipation qui utilise le bon modèle. Les figures 4.5 et 4.6 permettent d'apprécier la réponse de la boucle interne aux perturbations de lignine à l'entrée du réacteur. Encore une fois, l'effet anticipatif est efficace car aucune perturbation de la lignine à l'entrée n'est transmise à la sortie du réacteur. La figure 4.7 montre les performances de l'algorithme lors de perturbations échelon des

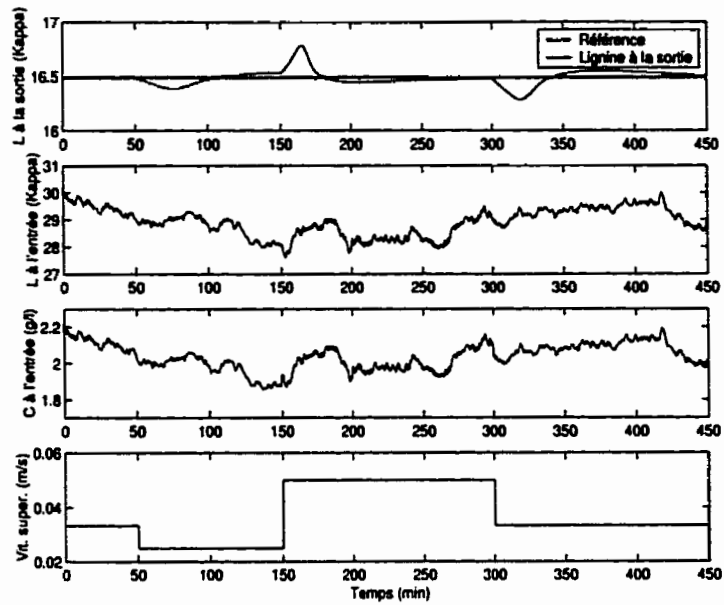


Figure 4.5 Commande par post-approximation : variation du débit

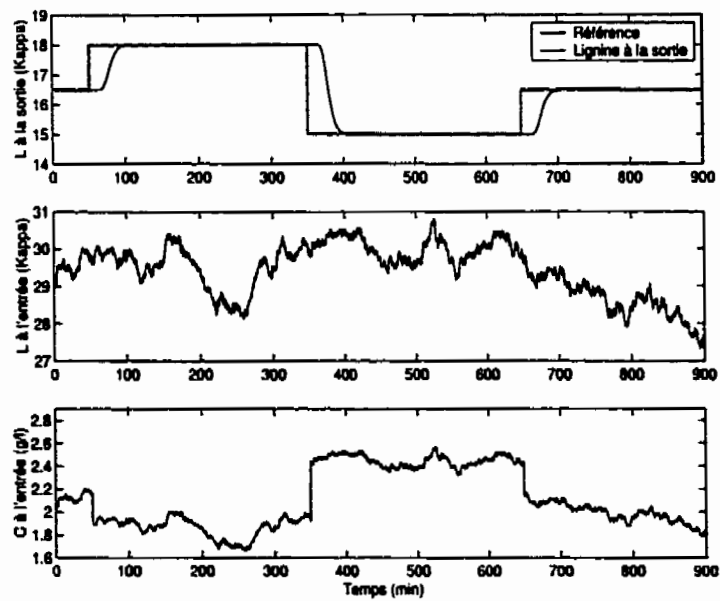


Figure 4.6 Commande par post-approximation : variation du point de consigne

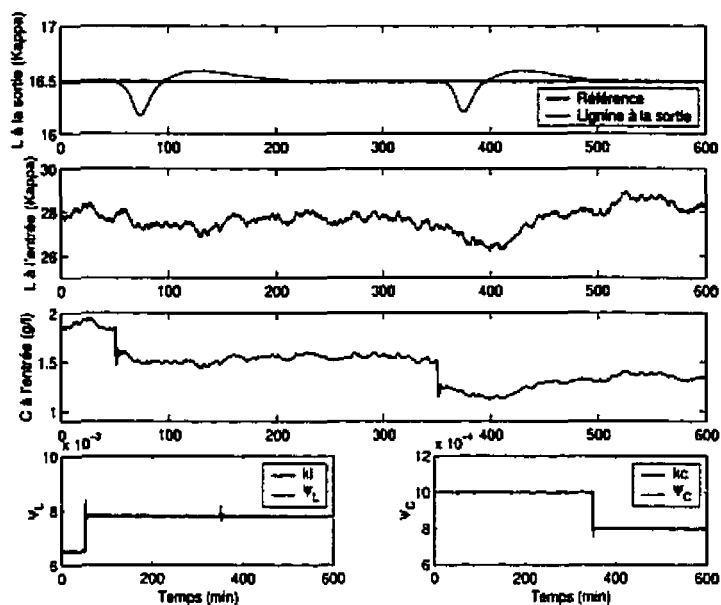


Figure 4.7 Commande par post-approximation : variation des constantes cinétiques

constantes cinétiques. Une perturbation échelon de +20% sur k_L est appliquée à 50 minutes puis une perturbation échelon de -20% est appliquée sur k_C à 350 minutes. Le régulateur par post-approximation réagit très efficacement aux perturbations de modèle en n'admettant qu'une très faible déviation par rapport à la référence. L'estimation des paramètres cinétiques est très efficace malgré les simplifications apportées au régulateur adaptatif.

Afin de tester la robustesse de la commande par post-approximation, le régulateur conçu à partir du modèle M1, est appliqué sur les modèles M2 et M3 du chapitre 1. Une série de perturbations qui éloignent progressivement le système de son point de fonctionnement nominal est appliquée. Ces perturbations sont présentées à la figure 4.8. Les résultats de simulation sont présentés aux figures 4.9 et 4.10. Ces résultats permettent de constater que le régulateur est très robuste par rapport au modèle M2 mais un peu moins par rapport au modèle M3. En effet, l'ajustement

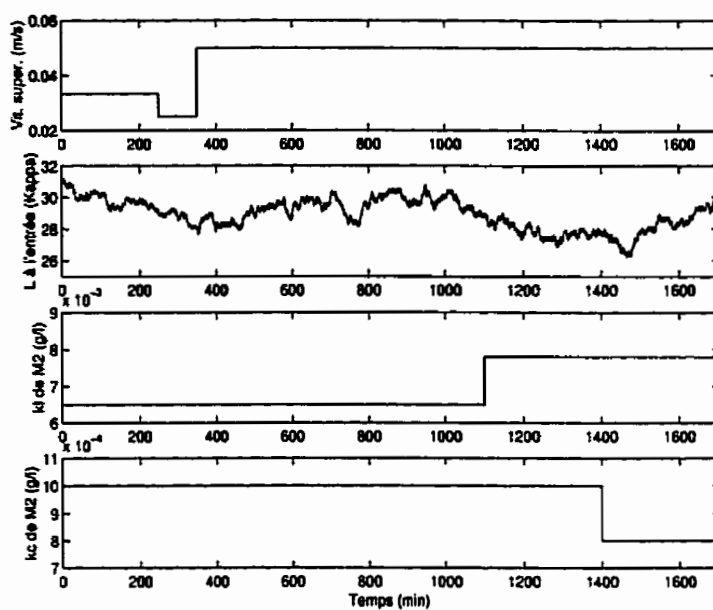


Figure 4.8 Variation de paramètres pour l'analyse de robustesse

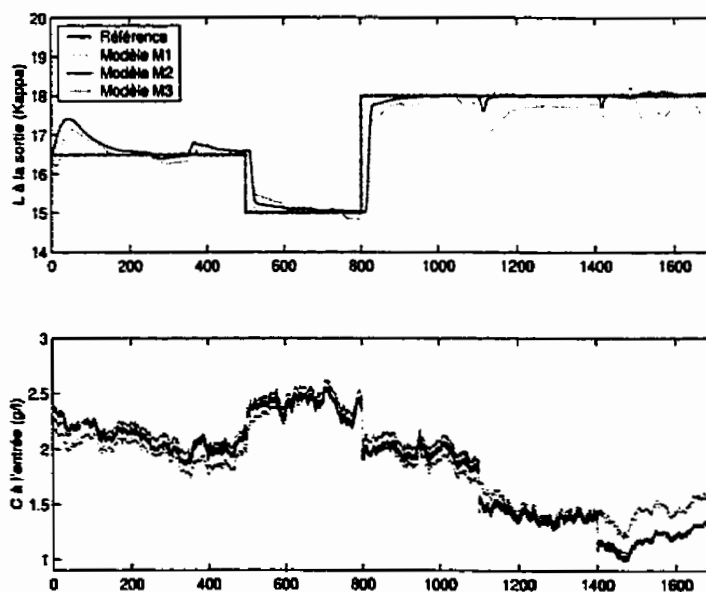


Figure 4.9 Commande par post-approximation : analyse de robustesse

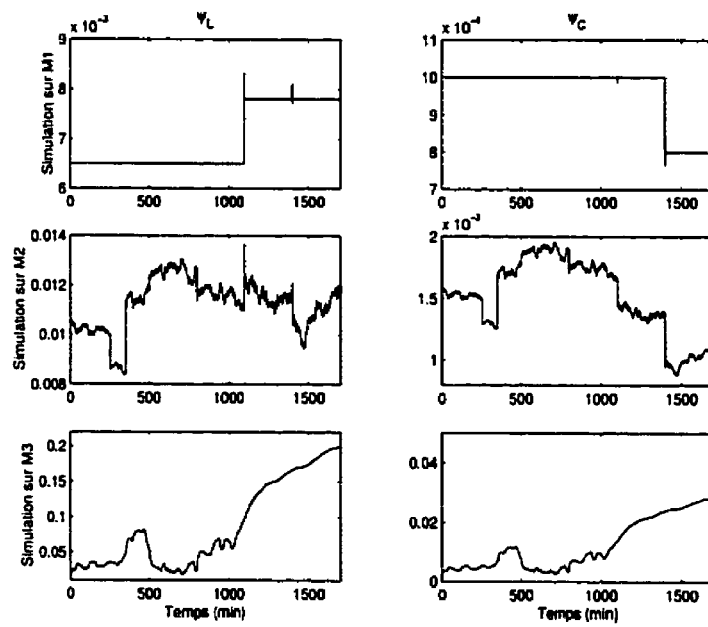


Figure 4.10 Commande par post-approximation : estimation des paramètres cinétiques

des paramètres cinétiques dans ce dernier cas est beaucoup plus fastidieux et nécessiterait un ajustement différent des lois d'adaptations. Dans le cas de la simulation avec le modèle M2, l'ajustement des paramètres suit bien les différentes perturbations.

CHAPITRE 5

ANALYSE COMPARATIVE DES STRATÉGIES DE COMMANDE

La comparaison entre différents algorithmes de commande est difficile car peu d'outils théoriques permettent d'utiliser une approche systématique. La simulation de cas types, malgré ses limites, demeure donc l'outil privilégié pour distinguer les avantages et les limites de différentes structures de commande. Dans ce chapitre, les algorithmes de commande présentés dans les chapitres 3 et 4 sont comparés dans le cadre de l'application au réacteur de blanchiment. L'objectif de cette comparaison est de tenter de répondre à la question principale abordée au début de ce travail: Y a-t-il un avantage à utiliser une stratégie de commande basée sur un modèle à paramètres répartis dans le cas d'un réacteur tubulaire?

Le principal obstacle à la comparaison d'algorithmes de commande est probablement l'utilisation de structures différentes. Par exemple, comparer un régulateur proportionnel intégral à un régulateur adaptatif est un processus biaisé car les possibilités des deux algorithmes sont différentes. Dans le cadre de cette thèse, un effort a été fait afin de comparer des structures qui ont des modes de fonctionnement similaires. En effet les trois algorithmes présentés ont des mécanismes d'adaptation, les trois utilisent un modèle du procédé afin d'évaluer si le procédé réagit de façon adéquate par rapport au modèle. De plus l'utilisation de capteurs est restreinte aux extrémités dans les trois cas. Toutefois, le modèle utilisé pour faire une prédiction différencie la commande prédictive des deux autres algorithmes. En effet, la commande prédictive utilise seulement une réponse à l'échelon alors que les deux autres algorithmes utilisent le modèle à paramètres repartis. Finalement, la commande par différence globale utilise une approximation préalable pour faire la conception

de la loi de commande alors que la commande par post-approximation utilise une approximation après la conception de la loi de commande sur le modèle PDE.

Ce chapitre présente donc différentes simulations comparatives afin de mettre en relief l'impact du modèle utilisé pour la conception des différentes stratégies de commande. Les performances relatives des algorithmes seront évaluées à l'aide d'indices de performance classiques permettant d'évaluer l'écart entre le comportement du système et une situation idéale. La première partie du chapitre présente la méthodologie de simulation suivie ainsi que les indices de performance utilisés. Les trois parties suivantes présentent les résultats des régulateurs sur différents systèmes. Finalement, la dernière partie du chapitre expose une synthèse des résultats.

5.1 Méthodologie et critères de performance

Afin de comparer efficacement les algorithmes de commande, toutes les simulations sont effectuées à partir du même patron de séquence de perturbation. Les simulations sont toutes effectuées avec la méthode par alternance décrite au chapitre 2 pour un maillage de 100 noeuds. Les lois de commande et leurs ajustements sont identiques à ceux présentés aux chapitres 3 et 4. Les régulateurs utilisés sont donc:

- La commande prédictive avec ajustement de l'échelle de temps (PM);
- La commande par différences globales (DG);
- La commande par post-approximation (PA).

La conception de tous ces régulateurs est basée sur le modèle M1 du chapitre 1. Par contre, l'analyse comparative est effectuée en comparant leur performance

respective sur les modèles M1, M2 et M3.

En premier lieu, l'analyse comparative est qualitative. Ainsi les résultats de simulation sont analysés pour les cas suivants qui ont déjà été présentés au chapitre 3:

1. *Variation du débit.* Le débit du réacteur est diminué de 50% à $t = 50$ minutes, puis passe à 150% de sa valeur nominale à $t = 150$ minutes avant de revenir à sa valeur de départ. Cette simulation permet d'assurer la robustesse de l'algorithme à une variation du rythme de production de l'usine;
2. *Variation du point de consigne.* Le point de consigne passe de sa valeur nominale de 16.49 à 18 Kappa à $t = 50$ minutes. Par la suite, le point de consigne est diminué à 15 Kappa à $t = 350$ minutes avant de revenir à sa valeur nominale à 650 minutes. Cette simulation permet d'analyser le comportement en suivi de trajectoire des lois de commande;
3. *Variation des constantes cinétiques* Dans le cas du modèle M1, la constante k_L est augmentée de 20 % à $t = 50$ minutes tandis que la constante k_C est diminuée de 20% à $t = 350$ minutes. Dans le cas des simulations sur les modèles M2 et M3, les variations sont ajustées afin d'obtenir la même variation en boucle ouverte de la variable contrôlée. Cette simulation permet d'analyser le comportement en régulateur des lois de commande;
4. *Séquence de perturbations.* Lors de cette simulation, une séquence de perturbation, présentée à la figure 5.1, est appliquée au modèle. Cette simulation permet d'analyser le comportement des lois de commandes lorsque des perturbations successives éloignent de plus en plus le procédé de son point de fonctionnement.

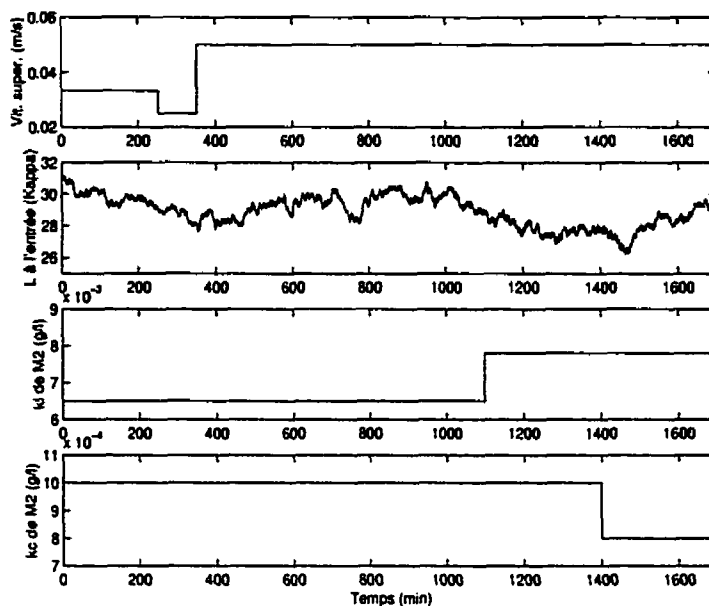


Figure 5.1 Séquence de perturbations

Dans toutes ces simulations, la lignine est perturbée stochastiquement et varie donc entre 31 et 27 Kappa. Cette variation est construite par la sommation cumulée d'une distribution normale de variance 0.02 à partir de 31 Kappa.

La deuxième portion de l'analyse est quantitative. Les résultats de simulations sont analysés à l'aide d'indices de performance classiques. Les livres d'automatique de base tel celui de Kuo (1998) présentent souvent une série d'indices qui permettent de quantifier la déviation d'un système par rapport au comportement désiré. Ces calculs se ramènent le plus souvent à quantifier l'erreur entre le point de consigne et la variable commandée. En commande des procédés, l'objectif est généralement d'obtenir la meilleure performance sans générer d'oscillations ou de dépassements ce qui correspond à une réponse en amortissement critique. Ainsi, cette stratégie évite de propager une certaine variabilité d'une étape à l'autre du procédé. Dans le cas d'un réacteur tubulaire, cette approche correspond à l'application de

l'hydrodynamique sur le point de consigne SP . Cette solution SP_{out}^* peut être obtenue en résolvant l'équation suivante:

$$\frac{\partial SP^*(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial SP^*(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 SP^*(z, t)}{\partial z^2} \quad (5.1)$$

$$D \frac{\partial SP^*(0, t)}{\partial z} = v(SP^*(0, t) - SP(t)) \quad (5.2)$$

$$D \frac{\partial SP^*(\ell, t)}{\partial z} = 0 \quad (5.3)$$

$$SP_{out}^*(t) = SP^*(z, t) \quad (5.4)$$

L'erreur entre la dynamique de la variable commandée et la performance optimale est donc:

$$e(t) = L_{out}(t) - SP_{out}(t) \quad (5.5)$$

Cette définition d'erreur est utilisée afin de calculer les indices de performance suivants:

1. **DM**: Ce critère détermine la déviation maximale entre la solution optimale et la variable optimale. Il est calculé de la façon ci-dessous:

$$DM = \max |e(t)| \quad (5.6)$$

2. **ISE**: Ce critère permet d'évaluer l'erreur globale sur la solution en pénalisant plus fortement les écarts importants. Il est calculé comme suit:

$$ISE = \int (e(t))^2 dt \quad (5.7)$$

3. **ITAE**: Ce critère calcule la valeur absolue de l'erreur pondérée par le temps. Il permet donc d'évaluer si la convergence vers la consigne est rapide et pénalise

fortement une erreur en régime permanent. Il est calculé ainsi:

$$ITAE = \int |e(t)|t dt \quad (5.8)$$

Finalement, afin d'évaluer la performance des régulateurs en fonction de l'éloignement du point d'opération nominal, des simulations sont effectuées sur des variations du point de consigne de -15% à +15% et sur des variations de k_L de -20% à +20%. Les différents critères de performance seront appliqués sur chacune des variations afin d'analyser l'évolution de la performance en fonction de l'éloignement du point d'opération.

5.2 Résultats avec le système M1

La simulation des lois de commande sur le modèle M1 représente le cas idéal. En effet, le système à réguler correspond exactement au modèle qui a été utilisé pour construire les régulateurs.

La figure 5.2 présente les performances des contrôleurs suite à une variation du débit. Ce type de perturbation impose forcément une déviation de la référence. En effet, lors de l'application du nouveau débit, le contenu du réacteur ne peut plus être modifié alors que le temps de résidence du réacteur est différent. Ainsi, sans anticipation spécifique, il est impossible d'éliminer une partie de la déviation. La réponse à ce type de perturbation diffère selon la loi de commande utilisée. Dans le cas de la commande PM, la déviation de la référence est symétrique et sans oscillation. Ce comportement est assuré par le choix conservateur des horizons de commande et de prédiction. La commande DG répond plus rapidement mais provoque un dépassement dans le sens contraire à la déviation causée par la perturbation. Ce comportement peut être attribué aux approximations utilisées mais

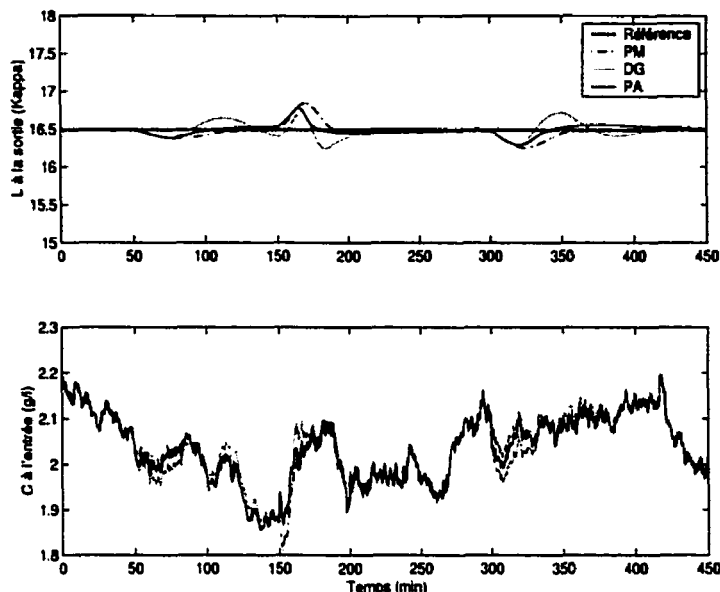


Figure 5.2 Modèle M1 : Variation du débit

il est par contre difficile d'en faire une analyse précise. Dans le cas de la commande PA, la réponse à la perturbation est en deux temps. La première déviation plus forte est essentiellement due à la perte de contrôle sur le contenu du réacteur, tandis que la deuxième déviation plus faible est simplement attribuable au travail de l'intégrateur. En effet, lors de la portion de la réponse qui est non commandable, l'intégrateur modifie la référence interne car il enregistre une erreur entre la sortie et la référence. Cette modification est par la suite éliminée. Ainsi, plus la constante de temps de l'intégrateur sera faible, plus les variations de débit perturberont le système.

La figure 5.3 présente les performances des lois de commande suite à une variation du point de consigne. Les commandes PM et PA présentent toutes deux une dynamique proche de la réponse optimale. En effet, la déviation par rapport à la consigne est attribuable principalement à l'hydrodynamique du réacteur. Ce

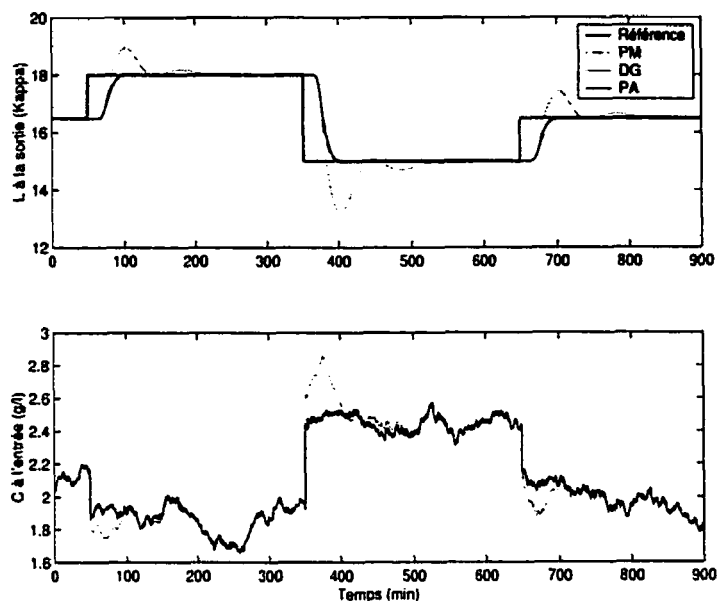


Figure 5.3 Modèle M1 : Variation du point de consigne

comportement était tout à fait prévisible pour la commande PA qui fonctionne ici de façon purement anticipative car le modèle correspond exactement au système. Par contre, la commande PM n'est basée que sur une réponse à l'échelon et obtient le même niveau de performance qu'une commande anticipative basée sur le modèle à paramètres répartis. Cette performance s'explique par l'ajustement à chaque pas de temps de la prédiction ainsi que par le choix conservateur des horizons de commande et de prédiction. Par ailleurs, la commande DG a plus de difficulté en réponse à l'échelon. En effet, un dépassement important est observé et il semble proportionnel à l'amplitude de l'échelon. Ce mauvais comportement peut être imputé aux approximations utilisées dans le développement de cet algorithme.

La figure 5.4 présente les performances des lois de commande suite à une variation des constantes cinétiques. La commande PM réagit moins efficacement à ce type de perturbations. En effet, pour la première variation, l'écart avec la référence est

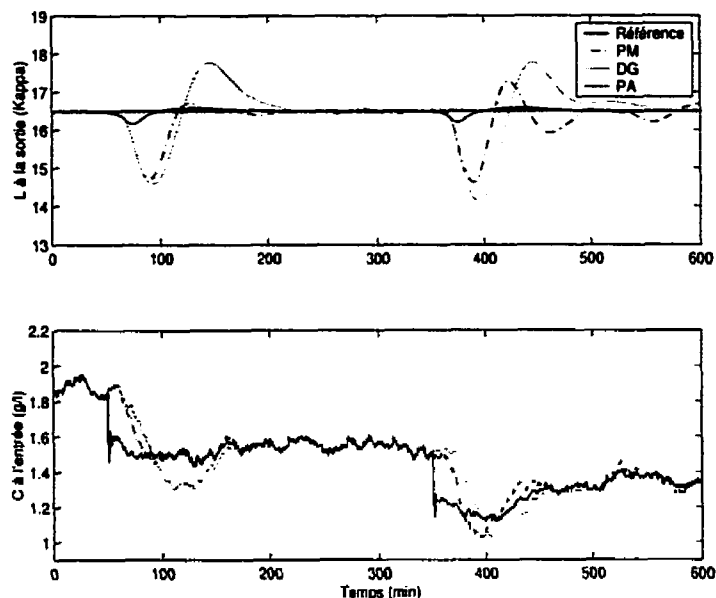


Figure 5.4 Modèle M1 : Variation des constantes cinétiques

important alors que, suite à la deuxième perturbation, la stabilisation au point de consigne n'est plus possible. Ce comportement montre les limites du modèle entrée-sortie utilisé. En effet, la variation de la constante cinétique ne peut être incorporée dans l'algorithme que par la compensation des perturbations effectuées à la sortie du réacteur. Ainsi, avant d'agir, l'algorithme doit attendre que la perturbation soit effective à la sortie, ce qui explique la large déviation observée. De plus, ce type de compensation n'influence pas ici la compensation par anticipation de l'algorithme. Ainsi, les oscillations apparentes après la seconde perturbation des constantes cinétiques sont directement corrélées avec les perturbations de lignine à l'entrée du réacteur. Il n'est donc pas possible de tirer avantage de l'aspect structuré d'un tel type de perturbation. La commande DG présente toujours des déviations importantes par rapport à la référence compte tenu des approximations utilisées dans sa construction. Par contre, le mécanisme d'adaptation basé sur le modèle à paramètres répartis permet de stabiliser le système sur la consigne. Le

comportement de la commande PA à une variation des paramètres cinétiques est similaire à son comportement lors d'une variation du débit. Cette fois, la première déviation plus importante est imputable au temps pris par le mécanisme d'adaptation des constantes d'adaptation pour réagir et modifier la commande anticipative alors que la seconde plus faible est encore une fois due au régulateur par rétroaction. La compensation rapide de la commande PA est attribuable principalement à l'utilisation efficace de l'information provenant du capteur à l'entrée du réacteur. Si ce capteur est situé au centre du réacteur; la performance est réduite car le délai de mise en oeuvre du mécanisme d'adaptation augmente. De plus, la sensibilité au paramètre cinétique est maximale à l'entrée du réacteur compte tenu de la structure de la cinétique qui est une fonction monotone décroissante.

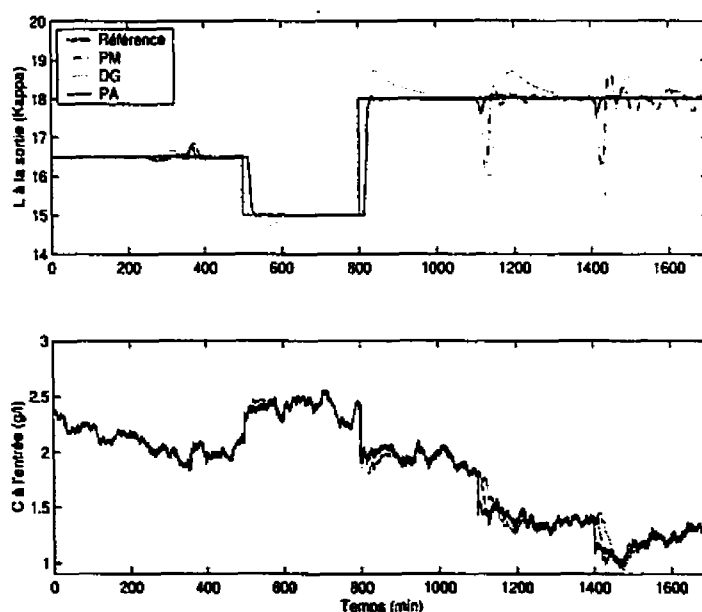


Figure 5.5 Modèle M1 : Séquence de perturbations

La figure 5.5 présente les performances des contrôleurs suite à une séquence de perturbation. L'éloignement progressif du point d'opération nominal permet d'observer une dégradation plus importante des caractéristiques déjà observées de la com-

mande DG. En effet, le temps de réponse augmente sensiblement. Toutefois, le comportement des commandes PM et PA demeure sensiblement le même.

s

Tableau 5.1 Performances des régulateurs sur le modèle M1

Type de perturbation	Indice de performance	Commande PM	Commande DG	Commande PA
Variation du débit	DM	0.36	0.25	0.30
	ISE	3.72	3.78	2.21
	ITAE	$6.0 * 10^2$	$1.3 * 10^3$	$9.8 * 10^2$
Variation du point de consigne	DM	0.12	1.83	0.01
	ISE	0.37	$1.4 * 10^2$	0.01
	ITAE	$4.3 * 10^3$	$7.5 * 10^4$	$6.9 * 10^2$
Variation des const. cinétiques	DM	1.87	2.38	0.32
	ISE	$1.6 * 10^2$	$3.6 * 10^2$	3.39
	ITAE	$5.2 * 10^4$	$8.3 * 10^4$	$6.4 * 10^3$
Séquence de variations	DM	1.77	2.50	0.39
	ISE	$1.1 * 10^2$	$3.5 * 10^2$	3.99
	ITAE	$1.9 * 10^5$	$4.5 * 10^5$	$2.9 * 10^4$

Les indices de performance pour l'ensemble des simulations sur le modèle M1 sont présentés au tableau 5.1. Les variations du débit influencent de façon similaire les indices de performance dans le cas des trois algorithmes de commande. Dans la cas des variations du point de consigne, tous les indices permettent d'identifier les différences de performance entre les différents algorithmes. La commande PA obtient de très faibles valeurs de DM et ISE. Ces résultats sont obtenus grâce à l'algorithme par anticipation dont la référence est la réponse optimale du système. Cet algorithme présente aussi une meilleure performance dans le cas d'une variation des paramètres cinétiques. Toutefois, l'indice ITAE ne permet pas de distinguer que la consigne n'est pas rejointe aussi rapidement que dans le cas des autres algorithmes. Finalement, l'analyse de la séquence de variation par les critères de performances met clairement en évidence la meilleure performance de l'algorithme PA. Cette performance est ici largement attribuable à l'adaptation efficace des

paramètres cinétiques et à la contribution anticipative de cet algorithme.

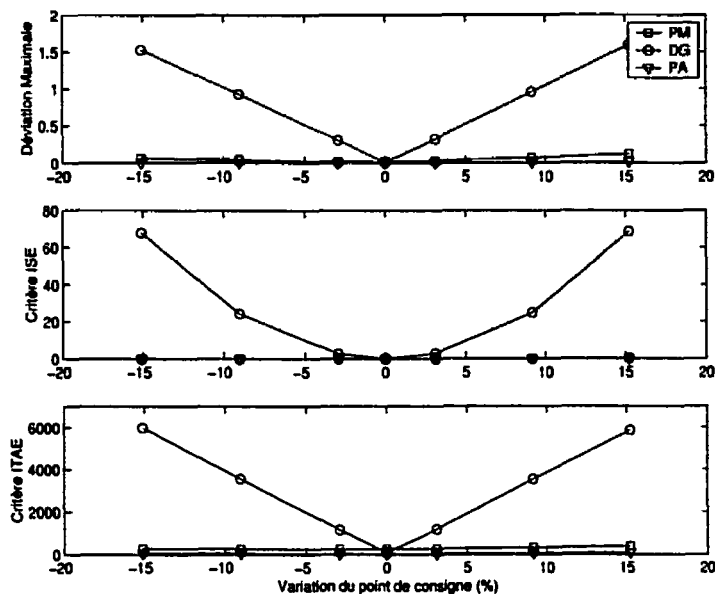


Figure 5.6 Modèle M1 : Performance selon la variation du point de consigne

Les figures 5.6 et 5.7 montrent les performances des algorithmes de commande par rapport à l'éloignement du point d'opération. Dans le cas d'une variation du point de consigne, la commande PM et la commande PA obtiennent des résultats similaires. Ainsi, leur performance est peu influencée par l'amplitude de la variation du point de consigne. Par contre, la perte de performance de la commande DG est effectivement proportionnelle à l'amplitude de l'échelon. Dans le cas de variations de κ_L , la performance des commandes PM et DG est fonction de l'importance de la perturbation alors que la commande PA est influencée dans une moindre mesure. Il faut, de plus, noter l'asymétrie de la performance qui révèle la non-linéarité importante du modèle dans le cas d'une variation du point de consigne.

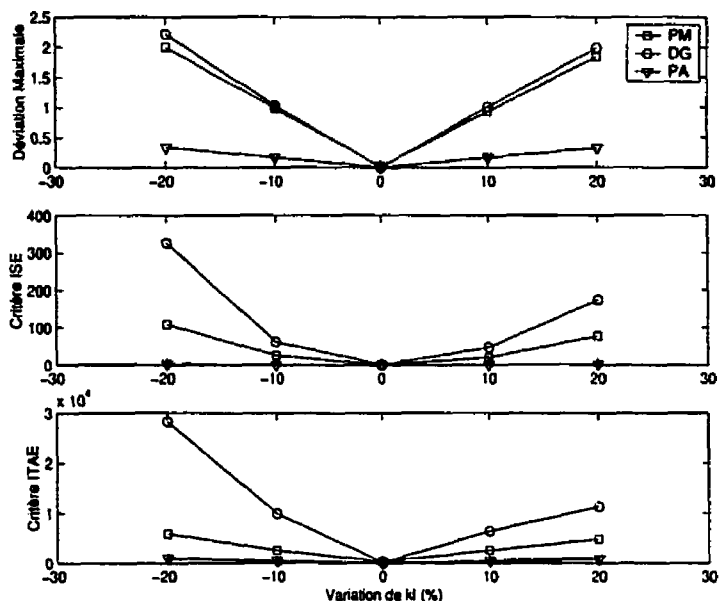


Figure 5.7 Modèle M1 : Performance selon la variation de k_L

5.3 Résultats avec le système M2

La simulation des lois de commande sur le modèle M2 permet d'étudier la robustesse relative des algorithmes de commande sur un système dont la cinétique est différente mais tout de même semblable. En effet, le terme cinétique du modèle M2 est L^3C^3 plutôt que L^2C^2 .

La figure 5.8 présente les performances des lois de commande suite à une variation du débit. La commande PM agit de la même façon que sur le modèle M1 avec des déviations de la consigne similaire. La commande DG cause aussi le même type de déviation que lors des simulations sur le modèle précédent. Toutefois, l'amplitude des déviations est plus grande. Cette disparité s'explique par le fait que le mécanisme d'adaptation de la commande prédictive agit de la même façon dans les deux cas. Alors que dans le cas de la commande par différences globales, c'est

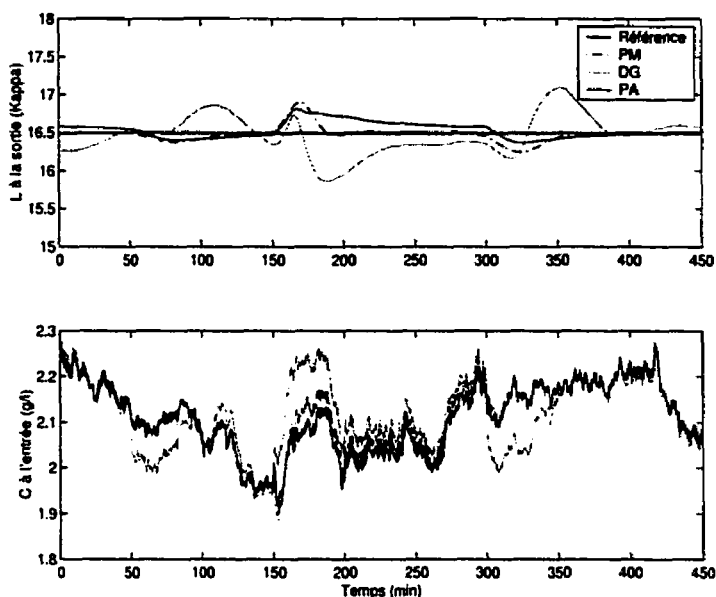


Figure 5.8 Modèle M2 : Variation du débit

l'adaptation du paramètre k_A qui permet l'ajustement. La commande PA réagit moins bien que lors des simulations précédentes sur le bon modèle. Le mécanisme de rétroaction doit compenser pour la variation du gain causé par la perturbation sur le débit. En effet, le mécanisme d'adaptation des constantes cinétiques est moins efficace car les paramètres estimés varient constamment selon les perturbations de lignine. De plus, il faut noter que le mécanisme d'adaptation assure l'adéquation entre le modèle et le système seulement, l'identification exacte des paramètres cinétiques n'est pas assurée. Ainsi, comme seulement deux capteurs sont utilisés par le mécanisme d'ajustement des paramètres cinétiques, ce mécanisme identifie donc des constantes qui assurent l'adéquation du modèle et du système à ces deux endroits seulement. Si tout le profil du réacteur est mesuré, cette déviation est résorbée car des paramètres cinétiques adéquats peuvent être identifiés.

La figure 5.9 présente les performances des lois de commande suite à une variation

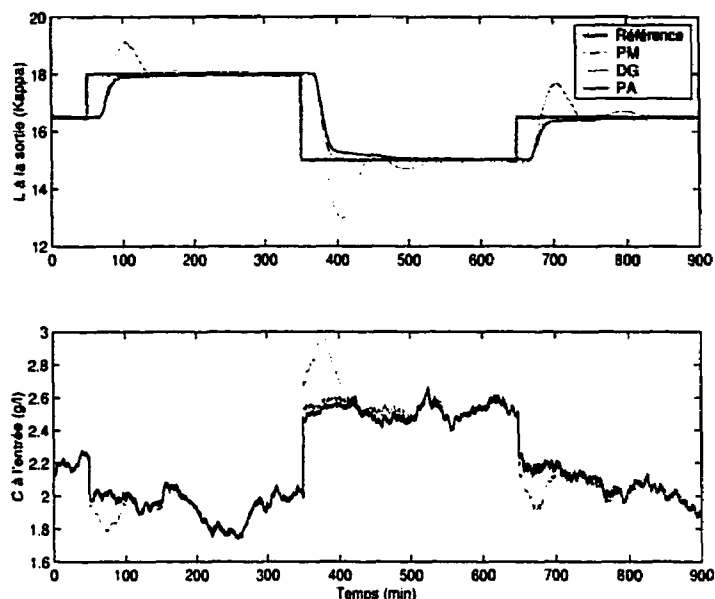


Figure 5.9 Modèle M2 : Variation du point de consigne

du point de consigne. Encore une fois, la commande PM réagit de la même façon que dans le cas des simulations sur le modèle M1. La commande DG présente aussi un comportement similaire quoique un peu plus oscillatoire; l'adaptation du paramètre cinétique k_A permet de rejoindre la consigne. Les performances de la commande PA sont, cette fois, légèrement inférieures à celles de la commande PM. Cet éloignement de la performance idéale s'explique par une efficacité réduite du mécanisme d'anticipation qui n'utilise plus le bon modèle. Le mécanisme de rétroaction permet toutefois d'obtenir une performance globale adéquate.

La figure 5.10 présente les performances des lois de commande suite à une variation des constantes cinétiques. Le comportement des trois algorithmes de commande est similaire à celui observé lors des simulations avec le modèle M1. Toutefois la commande DG a, cette fois, de la difficulté à compenser la variation de k_C alors que la commande PA laisse le système dévier légèrement du point de consigne après

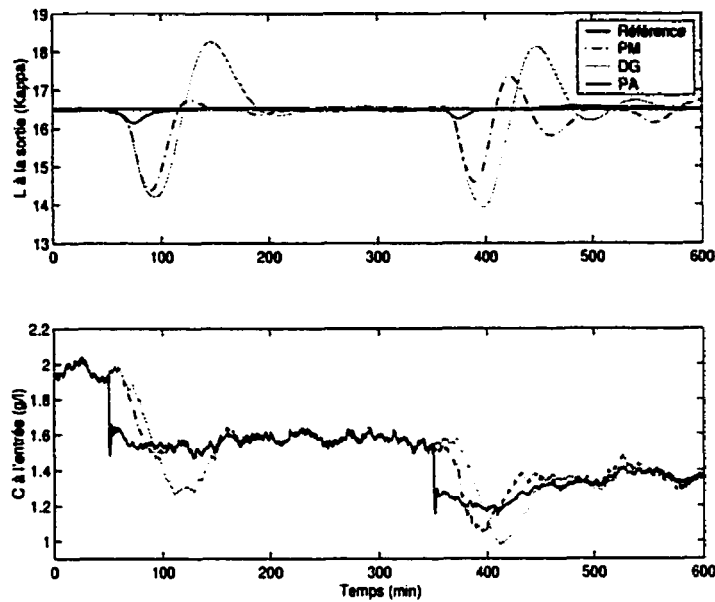


Figure 5.10 Modèle M2 : Variation des constantes cinétiques

cette même perturbation. La commande DG est naturellement plus sensible aux perturbations sur k_C étant donné que seule une adaptation de k_L est réalisée. Dans le cas de la commande PA, cette légère variabilité montre simplement que le travail réalisé par les lois d'adaptation des paramètres cinétiques est plus important car leur valeur est en constant mouvement compte tenu de la différence entre le modèle et le système.

La figure 5.11 présente les performances des contrôleurs suite à une séquence de perturbation. Cette simulation est débutée à partir des conditions initiales du modèle M1, ce qui permet d'apprécier le comportement des lois de commande à un changement brusque de modèle. Les trois algorithmes répondent à cette perturbation avec une dynamique similaire à celle observée lors de variations du débit. L'analyse du reste de cette simulation est similaire à celle faite pour la simulation avec le modèle M1.

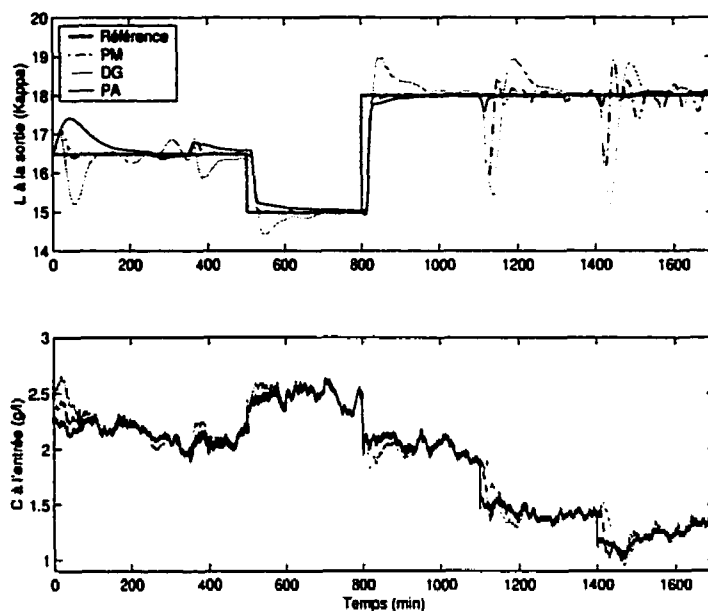


Figure 5.11 Modèle M2 : Séquence de perturbations

Tableau 5.2 Performance des régulateurs sur le modèle M2

Type de perturbation	Indice de performance	Commande PM	Commande DG	Commande PA
Variation du débit	DM	0.40	0.63	0.32
	ISE	4.49	30.1	5.61
	ITAE	$7.6 \cdot 10^2$	$5.0 \cdot 10^3$	$2.1 \cdot 10^3$
Variation du point de consigne	DM	0.08	2.06	0.25
	ISE	0.35	$2.0 \cdot 10^2$	5.38
	ITAE	$2.1 \cdot 10^3$	$9.5 \cdot 10^4$	$2.1 \cdot 10^3$
Variation des const. cinétiques	DM	2.11	2.56	0.35
	ISE	$2.0 \cdot 10^2$	$5.0 \cdot 10^2$	3.22
	ITAE	$5.8 \cdot 10^4$	$9.3 \cdot 10^4$	$8.1 \cdot 10^3$
Séquence de variations	DM	2.11	2.84	0.42
	ISE	$1.5 \cdot 10^2$	$5.7 \cdot 10^2$	68.2
	ITAE	$2.3 \cdot 10^5$	$5.1 \cdot 10^5$	$8.6 \cdot 10^4$

Les indices de performances pour l'ensemble des simulations sur le modèle M2 sont présentés au tableau 5.2 qui permet de quantifier les observations précédentes. Ainsi, la commande prédictive est plus robuste lors de changement de la consigne que la commande PA. Par contre, la commande PA conserve ses bonnes propriétés lors de perturbations des constantes cinétiques.

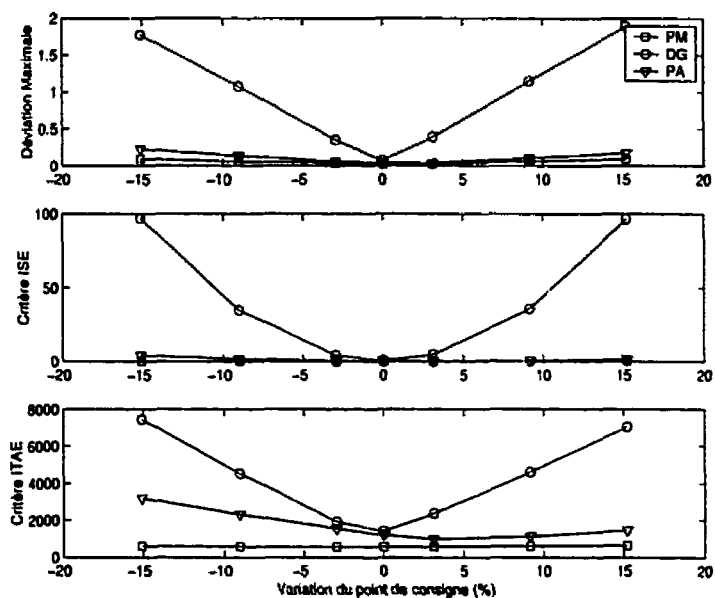


Figure 5.12 Modèle M2 : Performance selon la variation du point de consigne

Les figures 5.12 et 5.13 montrent les performances des algorithmes de commandes par rapport à l'éloignement du point d'opération. Dans le cas d'une variation du point de consigne, la commande PM et la commande PA obtiennent des résultats similaires pour les indices DM et ISE. Par contre, le critère ITAE qui pénalise fortement une erreur en régime permanent favorise la commande PM par rapport à la lente convergence de la boucle de rétro-action de la commande PA. Dans le cas de la variation de k_L , des performances tout à fait similaires à celle des simulations sur le modèle M1 sont observées.

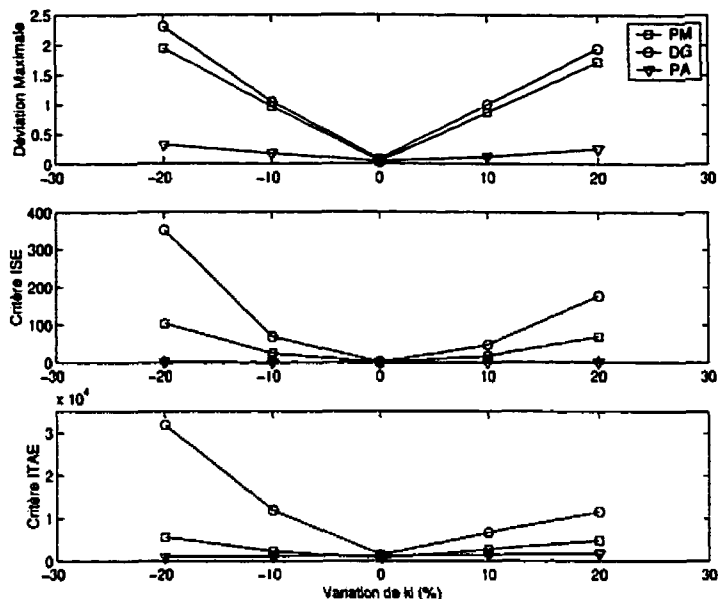


Figure 5.13 Modèle M2 : Performance selon la variation de k_L

5.4 Résultats avec le système M3

La simulation des lois de commande sur le modèle M3 permet d'étudier la robustesse relative des algorithmes de commande sur un système dont la structure de la cinétique est différente. En effet, la cinétique du modèle M3 est composée d'une réaction instantanée à l'entrée du réacteur et par la suite d'un terme cinétique bilinéaire LC .

La figure 5.14 présente les performances des lois de commande suite à une variation du débit. L'ensemble de ces simulations présente une variabilité beaucoup plus grande que dans les cas précédents. La commande PM assure le même comportement que précédemment avec un peu plus de variabilité. Par contre, les simulations avec les lois de commande DG et PA sont beaucoup plus variables et n'atteignent que difficilement le point de consigne. Dans ce cas la commande PA, la boucle de

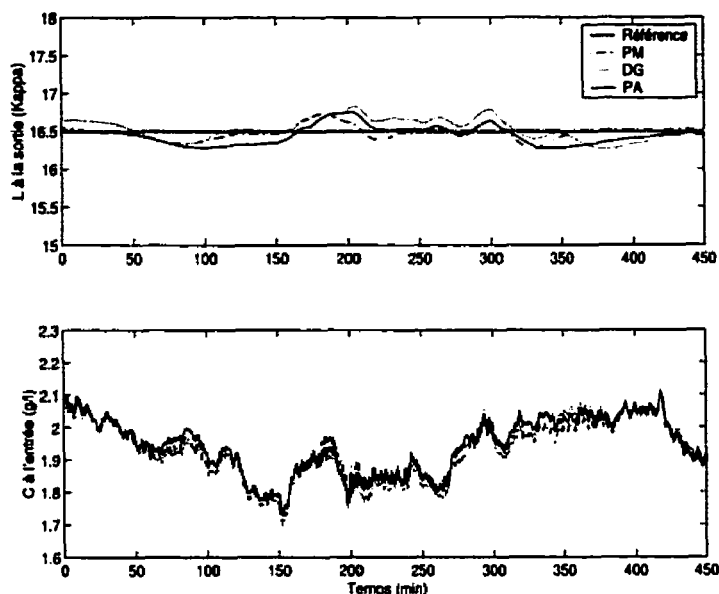


Figure 5.14 Modèle M3 : Variation de débit

rétroaction semble incapable de compenser rapidement la déviation à la sortie du réacteur. Toutefois, il est possible d'obtenir de meilleurs résultats en changeant l'ajustement des paramètres de cette loi de commande.

La figure 5.15 présente les performances des lois de commande suite à une variation du point de consigne. Les résultats obtenus sont similaires à ceux obtenus dans le cas du modèle M2. Toutefois, les perturbations de lignine affectent plus fortement la loi de commande PA. Ce comportement est causé par l'algorithme par anticipation dont le modèle ne tient pas compte de la structure de la cinétique du modèle M3. En effet, une partie de la réaction est fixe dans ce modèle alors que l'algorithme anticipatif utilise un modèle dont la réaction dépend entièrement des concentrations des composants. Ainsi, l'impact des variations sera toujours surestimé dans le cas d'une baisse de lignine et sous-estimé dans le cas d'une augmentation. Cette analyse permet aussi d'expliquer pourquoi la réponse du système avec un régulateur PA est

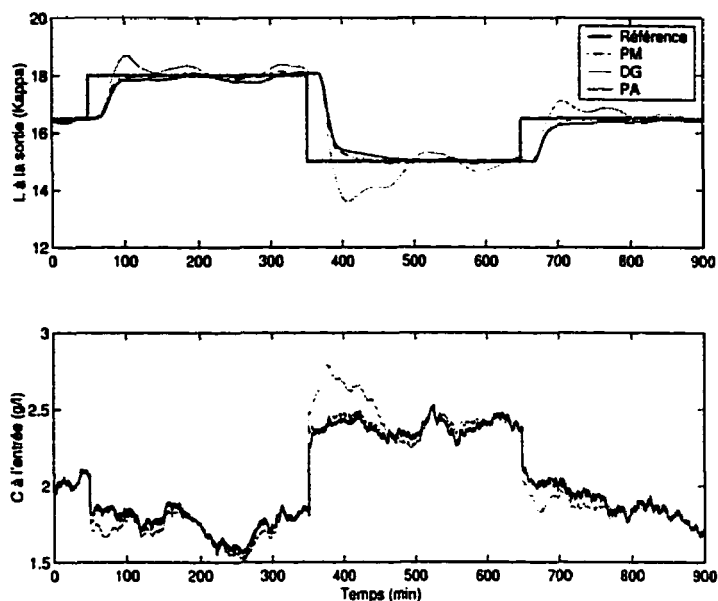


Figure 5.15 Modèle M3 : Variation du point de consigne

généralement sous le point de consigne dans toutes les simulations sur ce modèle.

La figure 5.16 présente les performances des lois de commande suite à une variation des paramètres cinétiques. Dans cette simulation, la commande DG ne permet plus d'atteindre le point de consigne, alors que les propriétés intéressantes de la commande PA sont fortement dégradées. Toutefois, la commande PM assure la même qualité de réponse similaire à celle observée dans des simulations sur le modèle M2. Dans cette simulation, la dégradation apparente de la commande DG s'explique simplement par le calcul d'une concentration de dioxyde de chlore à l'entrée qui est inférieure à 1.3 g/l alors que la condition frontière de ce modèle retranche 1.3 g/l . L'amplitude trop importante des déviations de la référence ainsi que la différence de structure entre le modèle et le système provoque l'instabilité de l'ensemble. Dans le cas de la commande PA, les importantes oscillations obtenues après la variation de k_C peuvent être expliquées par le fait que l'adaptation des

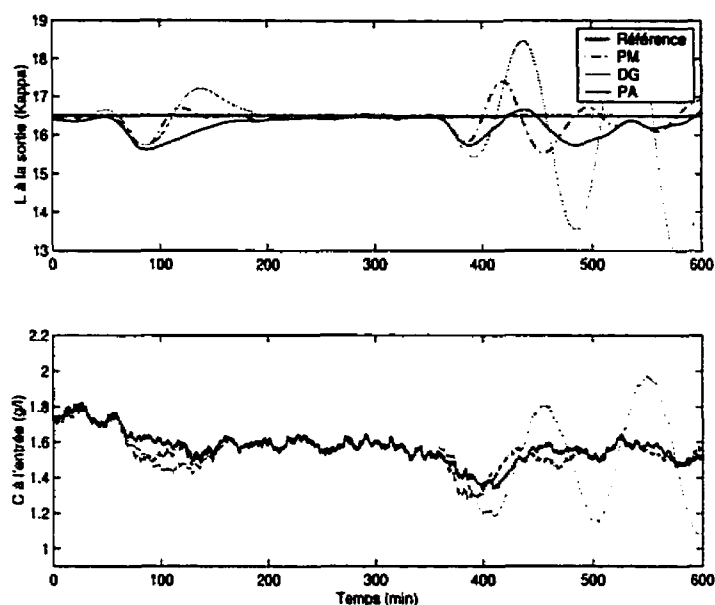


Figure 5.16 Modèle M3 : Variation des constantes cinétiques

paramètres cinétiques est faussée par la proximité de ce même point limite de la concentration de chlore à l'entrée.

La figure 5.17 présente les performances des contrôleurs suite à une séquence de perturbation. Cette simulation permet de confirmer la tendance de la commande PA à être inférieure au point de consigne qui a été observé lors des simulations précédentes. De plus, cette simulation permet d'apprécier les performances de la commande PM qui sont ici encore similaire à celle observés lors des simulations sur le modèle M1.

Les indices de performances pour l'ensemble des simulations sur le modèle M3 sont présentés au tableau 5.3 qui permet de quantifier les observations précédentes. La robustesse de la commande PM par rapport aux deux autres stratégies est ainsi aisément observable car elle permet d'obtenir de meilleurs indices de performance dans presque tous les cas. Seule la variation des constantes cinétiques donne un

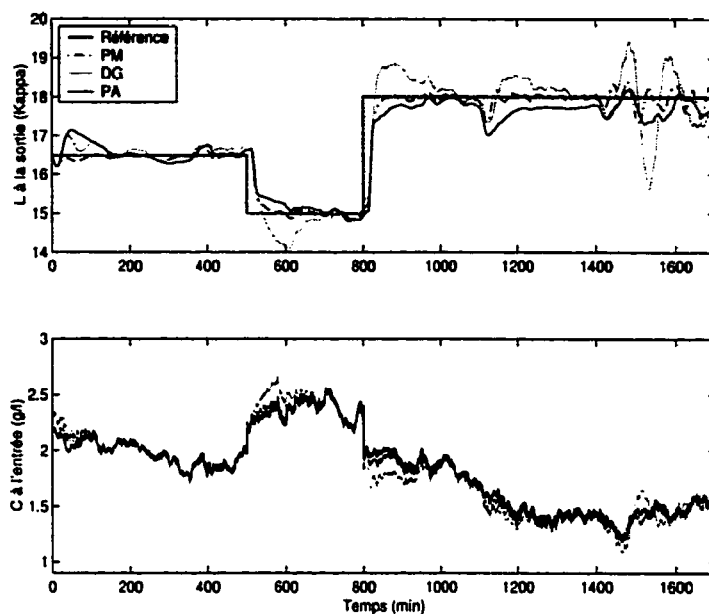


Figure 5.17 Modèle M3 : Séquence de perturbations

Tableau 5.3 Performances des régulateurs sur le modèle M3

Type de perturbation	Indice de performance	Commande PM	Commande DG	Commande PA
Variation du débit	DM	0.23	0.33	0.26
	ISE	3.72	9.43	7.62
	ITAE	$1.4 \cdot 10^3$	$3.6 \cdot 10^3$	$2.7 \cdot 10^3$
Variation du point de consigne	DM	0.27	1.43	0.38
	ISE	5.61	$1.5 \cdot 10^2$	17.7
	ITAE	$2.4 \cdot 10^4$	$1.1 \cdot 10^5$	$4.1 \cdot 10^4$
Variation des const. cinétiques	DM	0.97	4.98	0.88
	ISE	72.9	$1.6 \cdot 10^3$	78.4
	ITAE	$5.6 \cdot 10^4$	$3.1 \cdot 10^5$	$5.2 \cdot 10^4$
Séquence de variations	DM	0.69	2.37	0.98
	ISE	41.5	$4.1 \cdot 10^2$	$1.5 \cdot 10^2$
	ITAE	$1.8 \cdot 10^5$	$6.1 \cdot 10^5$	$3.9 \cdot 10^5$

léger avantage à la commande PA sur la déviation maximale et l'indice ITAE.

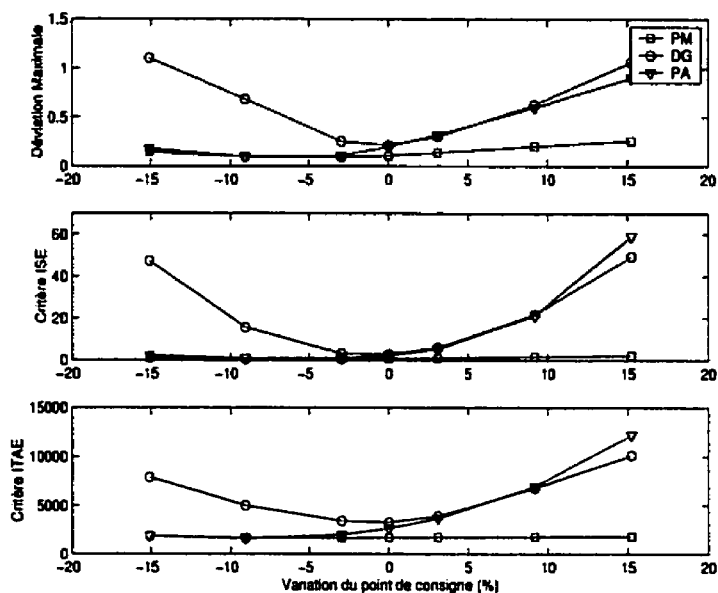


Figure 5.18 Modèle M3 : Performance selon la variation du point de consigne

Les figures 5.18 et 5.19 montrent les performances des algorithmes de commandes par rapport à l'éloignement du point d'opération. Dans le cas d'une variation du point de consigne, la commande PM et la commande DG montrent une performance similaire aux simulations sur le modèle M2. Par contre, la commande PA réagit de façon tout à fait asymétrique. En effet, pour des variations négatives du point de consigne le comportement est similaire au cas des simulations sur le modèle M2 alors que pour des variations positives, les différents critères se dégradent fortement. Cette dégradation est attribuée à l'effet combiné de la sous-estimation de l'anticipation avec celui de la condition frontière du modèle M3 qui fausse l'adaptation. Dans le cas de la variation de k_L , les trois algorithmes de commande ont une performance variant de façon similaire. La commande PA n'a donc plus cet avantage lorsque la structure du modèle est trop différente.

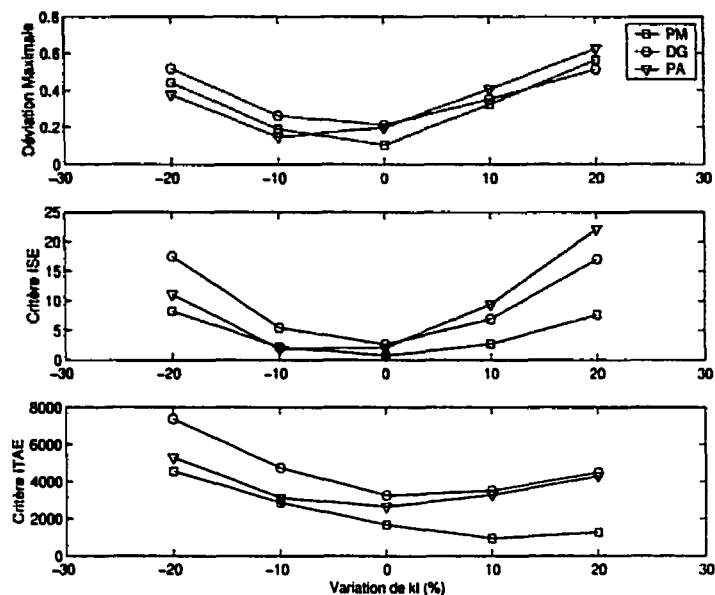


Figure 5.19 Modèle M3 : Performance selon la variation de k_L

5.5 Synthèse des résultats

Les simulations et leurs analyses présentées dans ce chapitre permettent de tirer les conclusions suivantes:

- La commande prédictive avec ajustement de l'échelle temporelle est plus robuste que les deux autres algorithmes proposés par rapport à la structure de la cinétique. En effet, elle permet d'obtenir des performances similaires lors des simulations avec les trois modèles. Toutefois, elle est plus sensible aux perturbations des constantes cinétiques et ne permet pas dans ce cas une bonne compensation des perturbations sur la lignine à l'entrée du réacteur. Cette limitation est attribuable au modèle entrée-sortie utilisé dans l'anticipation;
- La commande par différence globale est facile à mettre en oeuvre. Toutefois,

les approximations grossières utilisées ne permettent pas d'obtenir des performances aussi intéressantes que les autres approches. De plus, l'ajustement des paramètres de la boucle PI externe est ardu;

- La commande par post-approximation permet d'obtenir d'excellents résultats lorsque le système est proche du modèle interne utilisé. Par contre, lorsque la structure du système est trop différente, les performances sont moindres que celle de la commande prédictive. La performance de ce régulateur est directement reliée à la capacité d'adéquation du modèle interne avec le système;
- La performance au changement de point de consigne ne justifie pas l'utilisation d'un modèle à paramètres répartis. Cette utilisation est toutefois justifiée lorsque les constantes cinétiques sont perturbées;
- L'utilisation de la commande par post-approximation permet d'accroître les performances du système si l'éloignement du point d'opération est suffisant pour que la non-linéarité de la cinétique ait un impact.

CONCLUSION

La performance de la commande d'un réacteur tubulaire est limitée principalement par deux facteurs: le comportement non linéaire du système causé par la cinétique de réaction et un délai déterminé par l'hydrodynamique qui peut être très important. Ces problématiques sont des contraintes importantes des stratégies de commande traditionnelles qui sont généralement basées sur un modèle obtenu par une réponse à l'échelon. En effet, ce type de modèle ne permet pas de tenir compte des effets non linéaires lors d'une variation du point d'opération. De plus, la présence du retard de façon explicite dans le modèle force un ajustement conservateur des paramètres de la loi de commande afin d'éviter un comportement oscillatoire.

Afin d'améliorer les performances du système de commande d'un tel système, l'utilisation d'un modèle à paramètres répartis a été considérée dans cette thèse. Dans le cas d'un réacteur piston dispersif, ce modèle correspond à un système d'équations paraboliques tel que présenté dans le chapitre 1. L'hypothèse de base de ce travail est donc que l'utilisation de ce modèle pour la conception du régulateur permet d'accroître les performances du procédé. Pour rester dans un contexte de recherche appliquée et pour favoriser le développement de solutions viables industriellement, une application à un réacteur de blanchiment avec des contraintes industrielles typiques a été considérée. Pour étudier la validité de l'hypothèse de recherche, les objectifs spécifiques suivants ont été considérés:

1. Élaborer des outils de simulation efficaces;
2. Adopter les stratégies de commande existantes à la problématique de la commande de blanchiment;

3. Élaborer une stratégie de commande par post-approximation pour les systèmes commandés par la condition frontière;
4. Comparer les différentes stratégies sur une application.

Le chapitre 2 a présenté différentes stratégies de simulation applicables au système d'équations paraboliques non linéaires. Ainsi, les méthodes classiques de résolution ont d'abord été présentée, soient: la méthode des différences finies, la méthode de collocation orthogonale et la méthode des éléments finis. L'application de ces méthodes au modèle du réacteur de blanchiment a mis en évidence les limites à leur application en ligne dans un algorithme de commande. Une nouvelle approche de résolution numérique a donc été proposée: la méthode par alternance. Cette technique est basée sur la résolution successive à chaque pas de temps des phénomènes de convection, diffusion et réaction. Au prix d'une solution un peu moins précise pour des Peclet plus faibles, cette approche permet une résolution beaucoup plus stable et rapide qui n'est pas affectée par les problèmes de diffusion numérique ou d'oscillation. Elle est donc bien adaptée à la résolution en ligne du système de blanchiment.

Le chapitre 3 a présenté l'adaptation de stratégies de commande existantes à la problématique de la commande d'une tour de blanchiment. Tout d'abord, la commande prédictive de type DMC a été modifiée pour tenir compte des variations du débit en ligne. Ainsi, la commande prédictive avec ajustement de l'échelle de temps ajuste l'échelle temporelle du modèle en fonction du temps et permet d'éliminer les oscillations causées par une mauvaise compensation du retard. Par la suite, l'utilisation des différences globales a été appliquée au cas d'un système parabolique commandé par la frontière. De plus, un modèle interne a été ajouté afin de faire l'adaptation du rapport des paramètres cinétiques.

Le chapitre 4 a présenté le développement d'une stratégie de commande originale par post-approximation. Cette approche est composée de deux boucles de commande: une boucle adaptative avec modèle interne qui permet d'obtenir une estimation des paramètres cinétiques, et une boucle externe qui permet s'assurer le suivi de la consigne à l'aide de composantes par rétroaction et par anticipation. La convergence du modèle vers le système a été démontrée par une analyse de Lyapunov tandis que la solution de l'algorithme anticipatif est assurée par le croisement d'une technique de relaxation et de l'algorithme de tir.

Le chapitre 5 a présenté une analyse des performances des lois de commande développées aux chapitres 3 et 4. Elle est effectuée par simulation sur trois modèles différents, M1, M2, et M3 alors que tous les régulateurs sont construits à partir du modèle M1. Cette analyse montre que la commande prédictive réagit avec des performances similaires quelque soit le modèle sur lequel la commande est effectuée. Par contre, cet algorithme laisse une variabilité importante à la sortie lorsque les constantes cinétiques du système sont perturbées. L'algorithme par différences globales permet de stabiliser le système mais des déviations importantes par rapport à la consigne sont observées dans le cas de toutes les variations analysées. Finalement, les performances de la commande par post-approximation dépendent de l'adéquation entre le modèle interne et le modèle du système utilisé pour la simulation. En effet, si les simulations sont effectuées sur le bon modèle ou sur une structure similaire, le régulateur permet d'obtenir une réponse proche du comportement optimal désiré. Toutefois, si la structure de la cinétique est trop différentes, les performances peuvent être dégradées au point d'être inférieures à celle de la commande prédictive.

Les résultats obtenus dans le chapitre 5 montre bien que l'accroissement des performances du procédé par l'utilisation d'un modèle à paramètres répartis est fonction

principalement de la qualité de l'identification de la cinétique du procédé. En effet, c'est essentiellement l'utilisation directe des cinétiques dans le modèle qui permet d'accroître les performances. En fait, la problématique étudiée ici est relativement la même que l'étude des performances de lois de commande non linéaire par rapport au régulateur linéaire sur un réacteur parfaitement agité. Les conclusions à en tirer sont d'ailleurs identiques: un accroissement de la performance est possible seulement si le procédé est suffisamment perturbé pour que l'éloignement du point d'opération nominal entraîne une dégradation des performances des lois de commande linéaire. Dans le cas contraire, l'amélioration de la performance est négligeable. L'hypothèse de recherche est donc vérifiée pour le réacteur de blanchiment dans les conditions suivantes: l'identification du modèle est précise et le procédé est suffisamment perturbé pour que la performance des lois de commande linéaires soit dégradée.

Le travail effectué lors de cette thèse a permis de réaliser deux contributions originales dans le domaine de la commande des procédés chimiques. Tout d'abord un nouvel algorithme de simulation a été proposé. Cet algorithme n'est pas une contribution au champ des mathématiques appliquées mais bien à celui de la commande en temps réel. En effet, l'utilisation d'un modèle à paramètres répartis dans un algorithme de commande à l'aide des méthodes traditionnelles est difficile compte tenu des temps de simulation importants requis et du manque de robustesse de ces algorithmes aux variations des paramètres d'opérations. La simulation par alternance proposée permet une simulation rapide et robuste au coût d'une certaine perte de précision. Celle-ci demeure toutefois acceptable compte tenu de l'incertitude des mesures industrielles. La seconde contribution originale de cette thèse est le développement d'une loi de commande par post-approximation. Les principes utilisés dans cette loi ont déjà été utilisés pour des systèmes à paramètres localisés mais leur transposition aux systèmes à paramètres répartis est originale. Cette

loi permet d'utiliser la structure du modèle à paramètres répartis afin d'identifier en ligne les paramètres cinétiques d'un modèle interne. Cette information permet d'utiliser efficacement le modèle du système dans une boucle d'anticipation.

Le travail effectué dans cette thèse ne permet en fait que de répondre à certaines facettes de l'hypothèse de recherche de départ car l'application au réacteur de blanchiment limite l'impact de l'utilisation d'un modèle à paramètres répartis. En effet, le peu de capteurs disponibles sur ce système, les perturbations importantes à l'entrée du réacteur et le point de consigne seulement sur la sortie limite fortement les avantages de l'utilisation d'un tel modèle. Toutefois certains axes de recherche sur la commande de ce procédé devraient encore être explorés tel que:

- Plusieurs usines utilisent un capteur au quart de la hauteur de la tour de blanchiment afin d'avoir une rétroaction rapide. Une loi de commande qui utilise l'information de ce capteur pour la rétroaction en plus de l'information sur la sortie serait intéressante;
- La cinétique du blanchiment est encore mal déterminée. L'analyse de différentes cinétiques avec une modification de la structure à modèle interne sur des données d'usine pourrait être une méthode intéressante pour contribuer à la modélisation des cinétiques de blanchiment;
- Le blanchiment de la pâte est réalisé à l'aide d'une séquence de réacteurs. L'utilisation d'un modèle à paramètres répartis représentant l'ensemble des tours comme un seul réacteur avec différents points d'injection des réactifs pourrait être une approche intéressante pour l'optimisation de la séquence complète.

L'étude de la méthode de simulation par alternance proposée au chapitre 2 devrait aussi être poursuivie en explorant les aspect suivants:

- L'analyse des performances de cet algorithme pourrait être étendue à des réacteurs à température et pression distribuées. Une approche par alternance des phénomènes de transport ou par alternance des bilans pourrait donner des résultats intéressants;
- Cet algorithme demeure heuristique pour le moment. Une analyse rigoureuse de l'erreur pourrait être entreprise en considérant l'utilisation d'ordre de résolution différents. En effet, il est possible de minorer et majorer la solution par l'utilisation de séquences différentes.

Finalement, dans l'étude générale de la commande des réacteurs à paramètres distribués, les axes de recherche suivants sont prometteurs:

- L'algorithme de post-approximation utilisé peut aussi être utilisé avec une structure à modèle de référence. Cette approche pourrait être utile dans le cas de réacteurs où la commande d'une erreur minimale sur le profil est désirée.
- L'avenir de la commande par post-approximation est somme toute dans l'utilisation d'un maximum d'informations de ce modèle. Ainsi, la théorie des systèmes de dimension infinie doit être abordée en conjonction avec la théorie des systèmes non linéaires afin d'identifier une stratégie de linéarisation exacte applicable sur un système à paramètre répartis. Cette approche est facilement envisageable dans le cas d'une commande répartie mais elle devrait aussi être transposée au cas d'une commande par la frontière.

BIBLIOGRAPHIE

- Babary, J.P., S. Julien, M.T. Nihtilä, J. Czacot et M. Metzger (1998). New boundary conditions and adaptive control of fixed-bed bioreactors. *To be published*.
- Barrette, M. et M. Perrier (1995). Modelling and control of a hypochlorite bleaching stage for dissolving pulp. In: *Process Control Conference*. pp. 11-22.
- Berger, J.A. et L. Lapidus (1968). An introduction to the stability of distributed systems via a liapunov functional. *AIChE Journal* **14**, 558-568.
- Biermann, C.J. (1996). *Handbook of Pulping and Papermaking*. 2 ed.. Academic Press. New York.
- Bird, R.B., W.E. Stewart et E.N. Lightfoot (1960). *Transport phenomena*. John Wiley & Sons. Toronto.
- Bischoff, K.B. (1961). A note on boundary conditions for flow reactors. *Chemical Engineering Science* **16**(1-2), 131-133.
- Böhm, M., M.A. Demetriou, S. Leitch et I.G. Poulos (1998). Model reference adaptive control of distributed parameter systems. *SIAM Journal of Control and Optimisation* **36**(1), 33-81.
- Bourrel, S. (1996). Estimation et commande d'un procédé à paramètres répartis utilisé pour le traitement biologique de l'eau à potabiliser. Doctorat. Université Paul Sabatier.
- Chkravarti, S. et H. Ray (1997). Boundary identification and control of distributed parameter systems using singular functions. In: *American Control Conference*. Albuquerque. pp. 2223-2227.

- Cho, Y. S. et B. Joseph (1983). Reduced-order steady-state and dynamic models for separation processes. *AIChE* **29**(2), 261–276.
- Christofides, P. et P. Daoutidis (1998). Nonlinear feedback control of parabolic pde systems. *NATO ASI Serie E Applied Science* **353**, 371–401.
- Christofides, P.D. (1996). Nonlinear Control of Two-Time-Scale and Distributed Parameter Systems. Ph.d.. University of Minnesota.
- Christofides, P.D. (1998). Robust control of parabolic pde systems. *Chemical Engineering Science* **53**(16), 2949–2965.
- Christofides, P.D. et P. Daoutidis (1997). Robust control of hyperbolic pde systems. *Chemical Engineering Science* **53**(1), 85–105.
- Crête, D. (2000). Commande prédictive d'un réacteur de blanchiment. Rapport de projet de maîtrise en ingénierie. École Polytechnique.
- Curtain, R.F. (1982). Finite-dimensional compensator design for parabolic distributed systems with point sensors and boundary input. *IEEE Transactions on Automatic Control* **27**(1), 98–104.
- Curtain, R.F. et H.J. Zwart (1995). *An introduction to Infinite-Dimensional Linear Systems Theory*. Springer-Verlag. New York.
- Cutler, C.R. et B. L. Ramaker (1979). Dynamic matrix control. In: *AIChE National Meeting*. Houston.
- Danckwerts, P.V. (1953). Continuous flow systems: Distribution of residence times. *Chemical Engineering Science* **2**(1), 1–13.
- Datko, R. (1970). Extending a theorem of a.m. liapunov to hilbert space. *Journal of Mathematical Analysis and Application* **32**, 610–616.

- Dence, C.W. et Reeve, D.W., Eds.) (1996). *Pulp Bleaching: Principles and Practice*. TAPPI Press. Atlanta.
- Dochain, D. (1994). Contribution to the analysis and control of distributed parameter systems with application to (bio)chemical processes and robotics. Thèse d'agrégation. Université catholique de Louvain.
- Dochain, D. et J. Winkin (1995). Dynamical analysis of a class of distributed parameter fixed bed reactors. In: *34th Conference on Decision and Control*. IEEE. New Orleans. pp. 3225–3230.
- Drakunov, S. et E. Barbieri (1997a). Manifold control of a class of distributed parameter systems using modal expansion. In: *Conference on Decision and Control*. San Diego. pp. 1082–1087.
- Drakunov, S. et E. Barbieri (1997b). Sliding surfaces design for distributed parameter systems. In: *American Control Conference*. pp. 3023–3027.
- Dumont, G.A., J.M. Martin-Sanchez et C.C. Zervos (1989). Comparison of an auto-tuned pid regulator and a adaptive predictive control system on an industrial bleach plant. *Automatica* 25(1), 33–40.
- El Jai, A. et A.J. Pritchard (1986). *Capteurs et actionneurs dans l'analyse des systèmes distribués*. Masson. Paris.
- El Jai, A. et M. Amouroux (1990). *Automatique des systèmes distribués*. Hermès. Paris.
- Farlow, S.J. (1993). *Partial Differential Equations for Scientists and Engineers*. 2 ed.. Dover publications. New York.
- Fattorini, H. (1968). Boundary control systems. *SIAM Journal on Control* 6, 349–385.

- Fogler, H.S. (1992). *Elements of Chemical Reaction Engineering*. Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences. 2 ed.. Prentice Hall. Toronto.
- Gendron, S. (1996). Optimal control of bleaching sequences. Project proposal. Paprican.
- Gendron, S. (1997a). Dynamic model of a chlorine dioxide tower - reaction kinetics and tower dynamics. Project Log Book CL02001. Paprican.
- Gendron, S. (1997b). Prediction of cellulose degradation. Project 483 Log Report BP0003. Paprican.
- Gendron, S., M. Perrier, J. Barrette, M. Amjad, A. Holko et N. Legault (1993). Deterministic adaptive control of siso processes using model weighting adaptation. *International Journal of Control* **58**(5), 1105–1123.
- Gerald, C.F. et P.O. Wheatley (1990). *Applied Numerical Analysis*. Addison-Wesley. New York.
- Glowinski, R. et J.W. He (1996). On control problems for some advection-reaction-diffusion systems. In: *Conference on Decision and Control* (IEEE, Ed.). Kobe, Japan. pp. 3717–3722.
- Gough, B., J. Kay et G. Seebach (1994). Adaptive control application in pulp and paper. *Pulp & Paper Canada* **95**(6), T241–T243.
- Gurel, O. et L. Lapidus (1969). A guide to the generation of liapunov functions. *Industrial and engineering chemistry* **61**(3), 30–41.
- Gustafson, K.E. (1980). *Introduction to Partial Differential equations and Hilbert Space Methods*. John Wiley and Sons. New York.

- Hamelin, J.-F. (1999). Contrôle d'un réacteur de blanchiment à l'aide d'un contrôleur adaptatif à modèles pondérés. Mémoire de maîtrise. École Polytechnique.
- Hanczyc, E.M. et A. Palazoglu (1995). Nonlinear control of a distributed parameter process: The case of multiple characteristics. *Industrial Engineering Chemical Research* **34**, 4406–4412.
- Hanna, O.T. et O.C. Sandall (1995). *Computational Methods in Chemical Engineering*. Prentice Hall. Upper Saddle River, NY.
- Hong, K.S. et J. Bentsman (1994). Direct adaptive control of parabolic systems: Algorithm synthesis and convergence and stability analysis. *IEEE Transaction on Automatic Control* **39**(10), 2018–2033.
- Julien, S., J.P. Babary et M.T. Nihtilä (1995). On modelling of boundary conditions and estimation for fixed-bed bioreactors. *Mathematical Modelling of Systems* **1**(4), 233–243.
- Kayihan, F. (1990). A review of modeling and control in the pulp and paper industries. In: *CPC-IV*. pp. 117–132.
- Khalil, H.K. (1996). *Nonlinear Systems*. 2 ed.. Prentice Hall. Upper Saddle River.
- Kosanovich, K.A., A.R. Moser et M.J. Piosovo (1997). A new family of wavelets: the poisson wavelet transform. *Computers in chemical engineering* **21**(6), 601–620.
- Kreyszig, E. (1978). *Introductory Functional Analysis with Applications*. John Wiley & Sons. New York.
- Kreyszig, E. (1988). *Advanced Engineering Mathematics*. John Wiley & Sons. Toronto.

- Kuo, E. (1998). *Automatic Control*. John Wiley & Sons. New York.
- Lefevre, L., D. Dochain, S. Feye de Azevedo et A. Magnus (2000). Analysis of the orthogonal collocation method when applied to the numerical integration of chemical reactor models. *Computers & Chemical Engineering*.
- Levenspiel, O. (1999). *Chemical Reaction Engineering*. John Wiley & Sons. New York.
- Levenspiel, O. et T.J. Fitzgerald (1983). A warning on the misuse of the dispersion model. *Chemical Engineering Science* **38**(3), 489–491.
- Liou, C.T., H.C. Lim et W.A. Weigand (1974). Liapunov functional method for analysis of nonadiabatic tubular reactors with axial mixing and recycle. *Chemical Engineering Science* **29**(3), 705–711.
- McGreavy, C. et M.A. Soliman (1973). The stability of fixed bed catalytic reactors. *Chemical Engineering Science* **28**(7), 1401–1415.
- Nauman, E. B. et B.A. Buffham (1983). *Mixing in continuous Flow Systems*. John Wiley & Sons. New York.
- Ni, Y, G.J. Kubes et A.R.P. Van Heiningen (1995). Chlorination kinetics of kraft pulp. *Journal of Pulp and Paper Science* **21**(1), 30–36.
- Ogunnaike, B.A. et W.H. Ray (1994). *Process Dynamics, Modeling, and Control*. Oxford University Press. Toronto.
- Park, S.-K. (1995). Application of petrov-galerkin finite element method to non-linear transient diffusion-convection-reaction system. *Chemical Engineering Communication* **139**, 159–200.
- Patankar, S.V. (1980). *Numerical heat transfert and fluid flow*. McGraw-Hill. New York.

- Pazy, A. (1972). On the applicability of lyapunov's theorem in hilbert space. *SIAM Journal of Mathematical Analysis* 3(2), 291–294.
- Pearson, J.R. A. (1959). A note on the danckwerts boundary conditions for continuous flow reactors. *Chemical Engineering Science* 10, 281–284.
- Pudlas, M., P. Tessier et M. Savoie (1999). Implementation of a bleach plant supervisory control system at northwood inc.. In: *Paptac Western Conference* (Paptac, Ed.).
- Rankin, P.A. et W.L. Bialkowski (1984). Bleach plant computer control: Design, implementation and field experience. part ii: Control engineering, performance monitoring and human resources. *Tappi Journal* 67(7), 66–70.
- Ray, W.H. (1981). *Advanced Process Control*. Vol. 376 of *McGraw-Hill Chemical Engineering Series*. McGraw-Hill. Montréal.
- Ray, W.H. et Lainiotis, D.G., Eds.) (1978). *Distributed Parameter Systems*. Dekker. New York.
- Reddy, J.N. (1993). *An Introduction to the Finite Element Method*. McGraw-Hill. Montreal.
- Renou, S., M. Perrier, D. Dochain et S. Gendron (2000a). Direct adaptive control of a linear parabolic system. In: *SYSID 2000* (IFAC, Ed.). Santa-Barbara. pp. ThMD1–1.
- Renou, S., M. Perrier, D. Dochain et S. Gendron (2000b). Nonlinear control design for pulp bleaching. In: *Control System 2000* (PAPTAC, Ed.). PAPTAC. Victoria, Canada. pp. 351–354.
- Renou, S., M. Perrier, D. Dochain et S. Gendron (2000c). Solution of the convection-dispersion-reaction equation by a sequencing method. *Soumis à Computer & Chemical Engineering*.

- Richalet, J.A., A. Rault, J.D. Testud et J. Papon (1978). Model predictive heuristic control: Applications to industrial processes. *Automatica*.
- Rugh, W.J. (1993). *Linear System Theory*. Prentice Hall Information and System Science Series. Prentice Hall. Toronto.
- Salmi, T. et J. Romanainen (1995). A novel exit boundary condition for the axial dispersion model. *Chemical Engineering and Processing* **34**, 359–366.
- Savoie, M. et P. Tessier (1997). A mathematical model for chlorine dioxide delignification. *Tappi Journal* **80**(6), 145–152.
- Sereno, C., A. Rodrigues et J. Villadsen (1991). The moving finite element method with polynomial approximation of any degree. *Computers in Chemical Engineering* **15**(1), 25–33.
- Sereno, C., A. Rodrigues et J. Villadsen (1992). Solution of partial differential equations systems by the moving finite element method. *Computers chemical Engineering* **16**(6), 583–592.
- Shang, H., F. Forbes et M Guay (2000). Feedback control of hyperbolic pde systems. In: *ADCHEM*. Pisa, Italy.
- Tali-Maamar, N. (1994). Modelisation, analyse et commande d'un processe biotechnologique a gradient spatial de concentration. PhD thesis. Université Paul Sabatier de Toulouse.
- Tessier, P., M. Savoie et M. Pudlas (2000). Industrial implementation of an advanced bleach plant control system. *Tappi Journal* **83**(1), 139–143.
- Van Cauwenberghe, A.R. (1966). Further note on dankwerts' boundary conditions for flow reactors. *Chemical Engineering Science* **21**, 203–205.

- Varma, A. et M. Morbidelli (1997). *Mathematical Methods in Chemical Engineering*. Oxford University Press. New York.
- Viel, F., F. Jadot et G. Bastin (1997). Robust feedback stabilization of chemical reactors. *IEEE Transaction on Automatic Control* **42**(4), 473–481.
- Villadsen, J. et M.L. Michelsen (1978). *Solution of differential equation models by polynomial approximation*. Prentice-Hall International series in the physical and chemical engineering sciences. Prentice Hall. Toronto.
- Wang, R. X., J.-C. Tessier et C. P.J. Bennington (1995). Modeling and dynamic simulation of a bleach plant. *AIChE Journal* **41**(12), 2603–2613.
- Wehner, J.F. et R.H. Wilhelm (1956). Boundary conditions of flow reactor. *Chemical Engineering Science* **6**, 89–93.
- Winkin, J., D. Dochain et P. Ligarius (2000). Dynamical analysis of distributed parameter tubular reactors. *Automatica* **36**, 349–361.

Annexe I

Solution of the Convection-Dispersion-Reaction Equation by a Sequencing Method

Ce manuscrit a été soumis en août 2000 à la revue *Computers & Chemical Engineering*.

**SOLUTION OF THE
CONVECTION-DISPERSION-REACTION EQUATION
BY A SEQUENCING METHOD**

**Stéphane Renou, Michel Perrier, Denis Dochain [†]
and Sylvain Gendron [‡]**

Département de génie chimique, École Polytechnique de Montréal

C.P. 6079, succ. Centre-ville Montréal, H3C 3A7

[†] Université Catholique de Louvain, Bâtiment Euler

Av. G. Lemaitre 4-6, 1348 Louvain-La-Neuve, Belgium

[‡] PAPRICAN, 570 Blvd St-Jean, Pointe-Claire, H9R 3J9

Abstract :

A new approach for solving convection-diffusion-reaction equations is presented. The method is based on the separation of the different phenomena. At each time step, convection, diffusion and reaction are applied successively on the reactor mesh. This sequencing method allows to solve both hyperbolic and parabolic equations and to extend the frequency response of the numerical solution. Simulation results are given for linear and nonlinear reaction kinetics. These are compared to the exact solution for the high diffusion case and with up-wind finite difference methods for all cases.

I.1 Introduction

Tubular reactors have a distributed nature and their mathematical formulation leads to a system of partial differential equations (PDEs). Modeling of an isothermal tubular reactor, using mass balances, leads to convection-dispersion-reaction equations. The resulting well-known dispersion model for a non-ideal reactor is composed of second order parabolic equations. Several common numerical methods have been used to approximate PDEs by ordinary differential equations (ODEs) for numerical simulation and control design: finite differences methods (FDM), finite elements methods (FEM) and orthogonal collocation methods (OCM) (Gerald et Wheatley, 1990; Villadsen et Michelsen, 1978; Varma et Morbidelli, 1997; Reddy, 1993). In the specific case of hyperbolic PDEs, the method of characteristics give an exact transformation of the PDEs into ODEs (Farlow, 1993). Recently other developments occurred to address specific problems such as shock wave propagation: moving finite element method (Sereno *et al.*, 1991; Sereno *et al.*, 1992), up-wind finite element method (Park, 1995), wavelet transform approach (Kosanovich *et al.*, 1997) and many others.

Traditional numerical methods lead to satisfactory results in many cases, especially when the system has a clear behavior such as plug-flow reactors (PFR) or continuously stirred tank reactors (CSTR). Unfortunately, none of the above could be applied for the whole range of behaviours. The accuracy of the solution depends on the relative importance of the convection, dispersion and reaction terms. Moreover, for low dispersion systems, many problems may arise such as numerical diffusion or oscillation and even instability caused by the inappropriate use of the Danckwerts' boundary conditions.

The proposed method has been developed in the context of an on-line application,

i.e. the numerical simulation of a PDE model within a control scheme for an industrial application. Therefore, accuracy is not the only key issue of the problem: stability, ease of use, CPU time demand, and adequate frequency response of the numerical scheme are all other important issues.

This paper presents a novel approach for solving partial differential equations. The solution is based on the time occurrence of phenomena instead of using a variational formulation. Here each phenomenon is solved successively at each time step. This simple approach exhibits stability and rapidness properties. Moreover, the frequency response of the scheme is enhanced by treating the convection phenomena separately.

The next section of the paper describes the main concepts of this approach. It is followed in the third section by a detailed description of the algorithm. In the fourth section, the results from the novel approach is compared with the finite difference method and the analytical solution for the linear case. The fifth section shows an application to the nonlinear PDEs of a chlorine dioxide bleaching reactor application.

I.2 Description of the sequencing method

The dynamics of a tubular reactor can be modeled by transient mass balance on a thin transverse section. The resulting unsteady state convection-diffusion-reaction equation may be written as follow:

$$\frac{\partial x(z,t)}{\partial t} = -v \frac{\partial x(z,t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 x(z,t)}{\partial z^2} - r(x(z,t)) = 0 \quad (\text{I.1})$$

with the following closed-closed Danckwerts' boundary conditions and initial concentration profile in the reactor:

$$D \frac{\partial x(0, t)}{\partial z} = v(x(0, t) - x_{in}(t)) \quad (I.2)$$

$$\frac{\partial x(l, t)}{\partial z} = 0 \quad (I.3)$$

$$x(z, 0) = x_0(z) \quad (I.4)$$

In those equations, x represents the concentration in the reactor, v the superficial velocity, D the dispersion coefficient and $r(x(z, t))$ the reaction kinetics.

Traditional numerical methods approximate the solution of Equation (I.1) using space and time approximations. In FDM, a finite approximation is used to transform space partial derivatives to obtain a system of ordinary differential equations (ODE). OCM and FEM use a summation of polynomials for approximating the solution. Each term of the summation is composed of a function of time multiplied by a function of space. The problem is then expressed in a variational formulation in which test functions are used to measure the approximation error in a functional space. The choice of this test function dictates the method to be used. For OCM, Dirac functions are used as test functions. The method then focuses on obtaining exact response at some specific points in the reactor. If approximation polynomials are used as test functions, the Galerkin method is derived. Applying this method over each portion of a mesh leads to the simplest form of FEM. For all of these methods, the resulting ODE system is finally solved using backward finite difference, Runge-Kutta or predictor-corrector algorithms.

The sequencing method proposed in this paper addresses the problem from a different viewpoint. The behavior in time of the system is considered as the framework for the analysis. If one looks at a set of parabolic equations, three phenomena

simultaneously occur at each time step: convection, reaction and dispersion. If the time step is small enough, it is assumed that each phenomenon occurs separately in a sequential fashion. In this way, the formulation of equations, boundary conditions and simulation of each subsystem are easier to determine. This is the main idea behind the sequential algorithm. The solution is passed through a convection, a diffusion and finally a reaction sub-problem successively. For each subsystem, the solution becomes the initial condition of the next subsystem. Mathematically, it can be described by the following algorithm.

For a given reactor, let $x_0(z)$ be the initial profile of the reactor. This profile is used as an initial condition for the following convective subsystem which is solved for one time step Δt :

$$\frac{\partial x^*(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial x^*(z, t)}{\partial z} \quad (1.5)$$

$$x^*(0, t) = x_{in}(t) \quad (1.6)$$

$$x^*(z, t) = x_0(z) \quad (1.7)$$

Next, the result of the convection profile solution is passed through the following diffusion subsystem where it is used as an initial condition such that $x_{\Delta t}^*(z) = x^*(z, \Delta t)$ for a time step Δt :

$$\frac{\partial x^{**}(z, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 x^{**}(z, t)}{\partial z^2} \quad (1.8)$$

$$\frac{\partial x^{**}(0, t)}{\partial z} = 0 \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial x^{**}(l, t)}{\partial z} = 0 \quad (1.10)$$

$$x^{**}(z, 0) = x_{\Delta t}^*(z) \quad (1.11)$$

Finally, the profile solution of the diffusion subsystem is used as the initial condition $x_{\Delta t}^{**} = x^{**}(z, \Delta t)$ of the reaction subsystem for a time step Δt :

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = -r(x(z, t)) \quad (\text{I.12})$$

$$x(z, 0) = x_{\Delta t}^{**}(z) \quad (\text{I.13})$$

The solution of this equation is the solution to the general Equation (I.1) for a time step Δt . The process is repeated until the whole time span has been covered. In fact, at each time step, (1) the whole content of the reactor is moved toward the output according to superficial velocity, (2) dispersion occurs throughout the reactor and (3) a reaction occurs according to the reaction rates at each location in the mesh. This approach can be used equally well for hyperbolic and parabolic equations without changing boundary condition or adapting some tuning parameter based on the Peclet number $Pe = vl/D$ which account for convection-dispersion phenomena ratio.

I.3 Sub-problems resolution

For a time step Δt , N elements of dimension Δz are used to define the reactor mesh. The following values are used:

$$\Delta z = l/N \quad (\text{I.14})$$

$$\Delta t = \Delta z/v \quad (\text{I.15})$$

So the choice of the mesh dimension determines time and space discretization. This approach implies an equally spaced mesh but extension to a variable mesh is also

possible. For varying flow, the time step is adjusted according to the preceding equations.

Resolution of the convection subsystem (I.5)-(I.7) is the simplest part of this algorithm. It is a delay system from an input-output point of view. Thus, at each time step the data are moved one step forward in the mesh, the outlet concentrations are removed and the concentration at the reactor inlet is placed at position one in the mesh.

The dispersion subsystem (I.8)-(I.11) can be solved in many ways. FDM and FEM will lead to a similar formulation of the problem and they are both efficient and stable for a pure dispersion system. FDM has the advantage of a simple formulation but FEM deals more efficiently with Newman boundary conditions. For both approaches, the dispersion sub-problem is transformed into the following linear system:

$$\frac{\partial x^{**}(z, t)}{\partial t} = Mx^{**}(z, t) \quad (\text{I.16})$$

$$x^{**}(z, 0) = x_{\Delta t}^*(z) \quad (\text{I.17})$$

A simple FDM scheme was used for all results presented in this paper. The following central finite difference spatial approximations were used:

$$\frac{\partial^2 x^{**}(z, t)}{\partial z^2} \approx D \frac{x^{**}(z_{i+1}, t) - 2x^{**}(z_i, t) + x^{**}(z_{i-1}, t)}{(\Delta z)^2} \quad (\text{I.18})$$

The following linear system is then obtained:

$$\begin{pmatrix} \dot{x}^{**}(\Delta z, t) \\ \dot{x}^{**}(2\Delta z, t) \\ \dot{x}^{**}(3\Delta z, t) \\ \vdots \\ \dot{x}^{**}(N\Delta z, t) \end{pmatrix} = \frac{D}{(\Delta z)^2} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & -0 & \dots & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^{**}(\Delta z, t_i) \\ x^{**}(2\Delta z, t_i) \\ x^{**}(3\Delta z, t_i) \\ \vdots \\ x^{**}(N\Delta z, t_i) \end{pmatrix} \quad (\text{I.19})$$

Since this system is linear, it can be solved for a given Δt using a transition matrix formulation such as (Rugh, 1993):

$$x^{**}(z, \Delta t) = \exp\left(-\frac{D}{(\Delta z)^2} M * \Delta t\right) * x^{**}(z, 0) \quad (\text{I.20})$$

The computation of the exponential matrix can be done in advance, so the resolution of the dispersion subsystem only implies a matrix-vector multiplication.

The resolution of the reaction sub-problem (I.12)-(I.13) may be the slowest part of this algorithm. In fact, the reaction equation must be calculated at each point of the mesh. This may lead to a large number of independent differential equations to be solved. This problem has a solution using a variable separation approach such as:

$$\int_{x_0}^x \frac{1}{-r(x(z, t))} dx = \int_0^{\Delta t} dt \quad (\text{I.21})$$

which could then be solved to obtain the following relation:

$$f(x, x_0, \Delta t) = 0 \quad (\text{I.22})$$

If x can be expressed as a function of t and x_0 , the solution is straightforward. Unfortunately, if the reaction implies many species, the formulation of the reaction term may lead to a transcendental relationship and sometimes it could not be solved

in x . Two choices are then available: to use a numeric ODE solver on Equations (I.12)-(I.13) or to solve Equation (I.22) numerically.

Overall, this algorithm is easy to implement and many variations can be considered to refine the approach. Its development does not require a specific attention to the Peclet number. In fact, plug flow reactors to highly dispersive systems can be solved in the same way with this algorithm. Thus, this approach is well suited for a system in which some variations of operating conditions have an important influence on the flow type. For instance, a important increase of the flow rate can increase significantly the back-mixing in a tubular reactor. The flow type will then pass from dominant convection to dominant dispersion.

I.4 Sequencing method analysis

A simple linear PDE equation is used as a first test for the sequencing method. Solutions are compared to the solution by FDM and to an analytical solution in the case of dispersive systems. The following system is considered:

$$\frac{\partial x(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial x(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 x(z, t)}{\partial z^2} - kx(z, t) \quad (\text{I.23})$$

$$D \frac{\partial x(0, t)}{\partial z} = v(x(0, t) - x_{in}(t)) \quad (\text{I.24})$$

$$\frac{\partial x(1, t)}{\partial z} = 0 \quad (\text{I.25})$$

$$x(z, 0) = x_0(z) \quad (\text{I.26})$$

where $v = 0.05 \text{ m/min}$, $l = 1 \text{ m}$, $k = 0.057 \text{ min}^{-1}$ and $x_{in} = 1 \text{ g/l}$. Three different values are considered for the Peclet number: 1, 10^4 , 10^8 . A Peclet number of 10^8 represents a near plug-flow situation and a Peclet number of 1 is for a highly

dispersive system that behaves almost like as a continuous stirred tank reactor. Unless specified, all the simulations are performed for a 100-nodes mesh.

The simulation with the sequencing method is done according to the algorithm presented in the preceding section. The simulation code for this system is shown in Figure I.1. Since the reaction subsystem is linear, it has the following simple analytical solution:

$$x(t, z) = \exp(-k * \Delta t) * x_0^{**}(z) \quad (\text{I.27})$$

Simulation by the FDM is done by using the first order backward difference Equation (I.28) for the first order space partial derivative and the second order central difference Equation (I.29) for the second order space partial derivative. A backward difference approach is used to avoid high Peclet number oscillations occurring with central formulations. The following approximations have been used:

$$\frac{\partial x^{**}(z, t)}{\partial t} \approx \frac{x^{**}(z_i, t) - x^{**}(z_{i-1}, t)}{\Delta z} \quad (\text{I.28})$$

$$\frac{\partial^2 x^{**}(z, t)}{\partial z^2} \approx \frac{x^{**}(z_{i+1}, t) - 2x^{**}(z_i, t) + x^{**}(z_{i-1}, t)}{(\Delta z)^2} \quad (\text{I.29})$$

Matlab[©] FDM programs were developed using in-house software for automatic simulation code generation. The time integration of ordinary differential equations obtained is performed with ODE15s.

Since the reaction term is of first order, the model is linear and the equation has an analytical solution (Winkin *et al.*, 2000) using the framework of infinite dimensional state space systems as shown in (Curtain et Zwart, 1995). Equation (I.1) can be rewritten as a Fattorini model of boundary control (Fattorini, 1968) such as:

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + Bx_{in} \quad (\text{I.30})$$

$$A = D \frac{\partial^2}{\partial z^2} - v \frac{\partial}{\partial z} - k \quad (\text{I.31})$$


```

% Initialisation
v = 0.05;      % superficial velocity
k = 0.057;    % kinetic parameter
D = 0.05;     % Dispersion for Pe=1
N = 100;      % Mesh definition
dz = 1/N;     % Space step
dt = h/v;     % Time step
t = 0:dt:50; % Time span

% Results initialisation

result = zeros(N,length(t));

% Input

x_in = ones(1,length(t));

% Diffusion matrix calculation

matexp = -2/dz^2*eye(N);
for i=1:N-1
    matexp(i,i+1)=1/dz^2;
    matexp(i+1,i)=1/dz^2;
end;
matexp(1,1) = -1/dz^2;
matexp(N,N) = -1/dz^2;
matexp = expm(matexp*D*dt);

% Simulation loop

for i=2:length(t)
% Convection
    result(:,i) = [Lin(i-1);result(1:N-1,i-1)];
% Reaction
    result(:,i) = exp(-kl*dt).*result(:,i);
% Diffusion
    result(:,i) = matexp*result(:,i);
end;

```

Figure I.1 Matlab[©] code for linear case

$$B = v\delta(z) \quad (\text{I.32})$$

in which $\delta(z)$ is the Dirac distribution and A is a Riesz spectral operator on an Hilbert space. The following norm and inner product are used on the Hilbert space $L^2(0, 1)$

$$\forall f, g \in L^2(0, 1), \quad \langle f, g \rangle_2 = \int_0^1 f(z)g(z)dz, \quad \text{and} \quad \|f\|_2 = \sqrt{\langle f, f \rangle_2} \quad (\text{I.33})$$

The mild solution of the abstract inhomogeneous problem (I.30) is:

$$x(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} [e^{\lambda_n t} \langle x_0, \psi_n \rangle \phi_n + \int_0^t e^{\lambda_n(t-s)} \langle f(s), \psi_n \rangle \phi_n ds] \quad (\text{I.34})$$

This solution is obtained by considering the following definitions:

$$\lambda_n = -\frac{s_n^2 + v^2}{4D} - k \quad (\text{I.35})$$

$$\text{with } 0 < s_n < s_{n+1} \text{ solution of } \tan\left(\frac{L}{2D}s\right) = \frac{2vs}{s^2 - v^2} \quad (\text{I.36})$$

$$\phi_n(z) = K_n e^{\frac{v}{2D}z} \left[\cos\left(\frac{s_n}{2D}z\right) + \frac{v}{s_n} \sin\left(\frac{s_n}{2D}z\right) \right] \quad (\text{I.37})$$

$$\psi_n(z) = M_n \phi_n(L - z) \quad (\text{I.38})$$

in which K_n is chosen such that $\|\phi_n\|_2 = 1$ and M_n such that $\int_0^1 \phi_n \psi_n dz = 1$. This spectral solution is applicable for dispersive systems in which the eigenvalues λ_n are well spaced and a small n is enough to give a good representation of the system. In practice, this solution can be used only when the Peclet number is less than 10.

Figures I.2-I.4 show outlet concentration and reactor profile for different Peclet numbers when solving by SM or FDM. The exact solution is also included for $Pe = 1$ and different mesh sizes are used for all approaches. A first examination of results shows that overall, both numerical approaches capture the behavior of the reactor but: (1) the FDM is unable to account for plug flow behavior and (2) SM

does not capture the inlet gradient for high dispersion reactors.

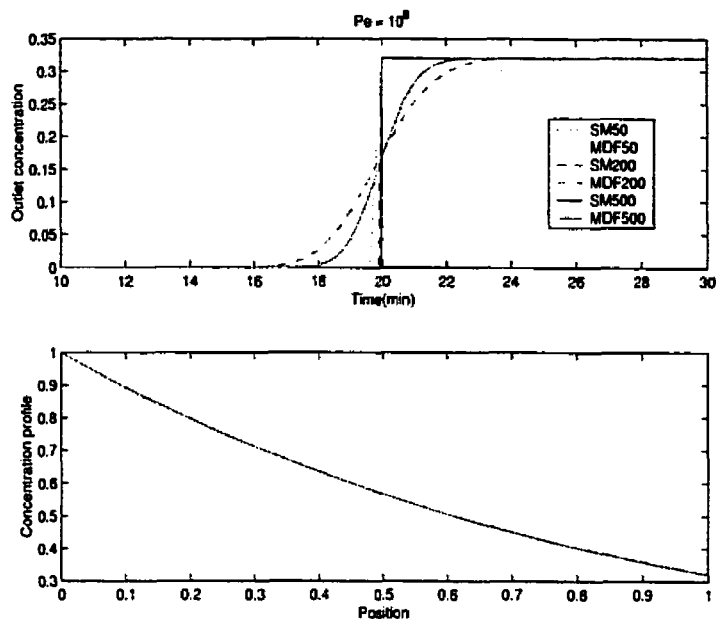
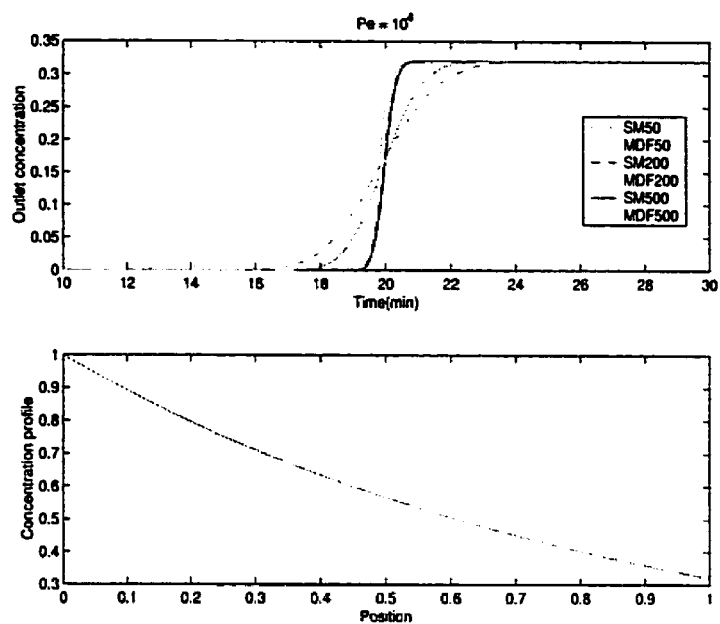
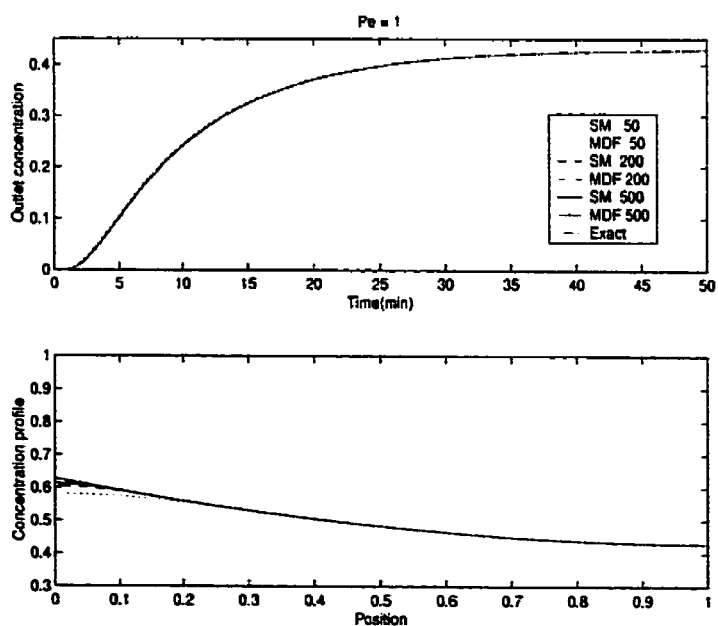


Figure I.2 Linear system solution for $Pe = 10^8$

For the plug flow case, the SM gives the exact response like the method of characteristics since the system is degenerated to a hyperbolic case. Otherwise, FDM induces numerical diffusion for $Pe = 10^8$ and $Pe = 10^4$ as shown in Figures I.2 and I.3. By definition, FDM cannot account for sharp inputs since it corresponds to the well-known tank in series model. For instance, taking one equation of this model leads to:

$$\begin{aligned} \frac{\partial A(t, z_i)}{\partial t} &\approx D \frac{A(t, z_{i+1}) - 2A(t, z_i) + A(t, z_{i-1}))}{(\Delta z)^2} \\ &- v \frac{A(t, z_i) - A(t, z_{i-1}))}{\Delta z} - kA(t, z) \end{aligned} \quad (\text{I.39})$$

Then, applying the Laplace transform on this equation leads to the following ex-

Figure I.3 Linear system solution for $Pe = 10^4$ Figure I.4 Linear system solution for $Pe = 1$

pression:

$$\begin{aligned}
 A(s, z_i) = & \frac{D/(\Delta z)^2 + v/\Delta z}{s + 2D/(\Delta z)^2 + v/\Delta z + k} A(s, z_{i-1}) \\
 & + \frac{D/(\Delta z)^2}{s + 2D/(\Delta z)^2 + v/\Delta z + k} A(s, z_{i+1}) \quad (I.40)
 \end{aligned}$$

This equation shows that each element of the mesh is in fact a low pass filter with a bandwidth which is a function of the dispersion factor, the superficial velocity, the kinetic constant and the mesh definition. To emphasize this point, amplitude Bode diagrams in Figure I.5 shows the difference between the frequency responses of SM and FDM. Thus, for low Peclet number, the frequency responses are similar because the dispersion phenomenon is limiting the reactor bandwidth. Otherwise, for high Peclet numbers, the numerical approximation effect dominates the bandwidth in the case of FDM. The SM does not exhibit this behavior, since its bandwidth is limited only by the mesh precision. Moreover, frequency analysis also shows that the simulation time can be directly related to the frequency content of the input as shown in Figure I.6. The time to solve the SM simulation do not vary with the frequency composition of the input since it is a fixed time step approach. On the other hand, the FDM simulation time grows exponentially as the input frequency grows. This can be explained by the time integration with ODE15s which uses a variable time step to catch input variations and insure stability. Note that the simulation time is independent of the Peclet number for the SM.

For high Peclet numbers, Figures I.2-I.3 show that FDM curves are always slightly higher than SM curves. In fact, FDM leads to a steady state error. This can be demonstrated easily with the analysis of a plug-flow reactor. If the following steady state problem is considered:

$$\frac{dx(z)}{dz} = -\frac{k}{v}x(z) \quad (I.41)$$

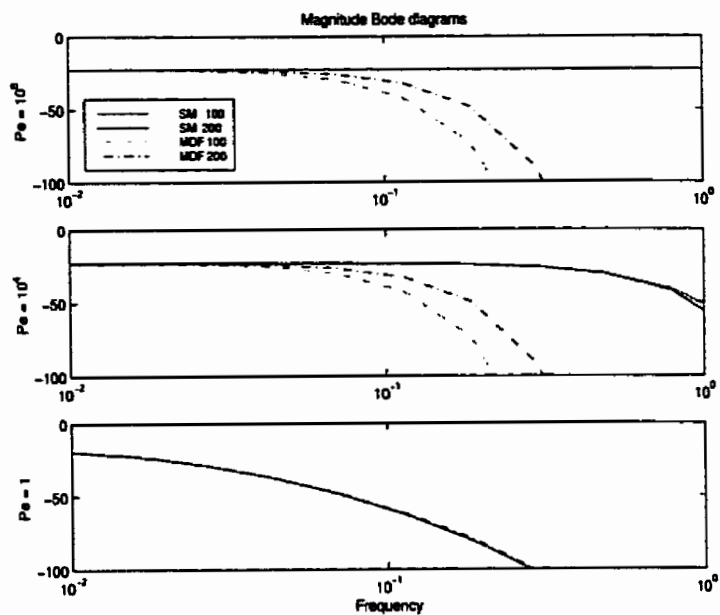


Figure I.5 Frequency analysis

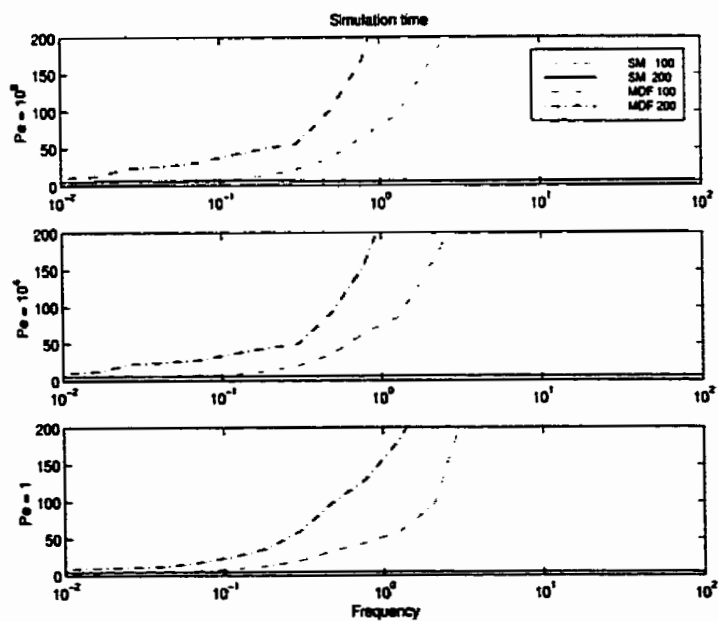


Figure I.6 Simulation time analysis

the solution at steady state is

$$x(z) = e^{az}x(0), \quad a = \frac{k}{v} \quad (\text{I.42})$$

With the FDM approximation, the solution is

$$x(z) = (1 - az/n)^n x(0) \quad (\text{I.43})$$

An error function between two preceding solutions is obtained by considering the following series expansion:

$$e^{-az} = 1 + \frac{-az}{1!} + \frac{-az^2}{2!} + \frac{-az^3}{3!} + \dots$$

$$(1 - az/n)^n = 1 + \frac{-az}{1!} + \frac{-az^2}{2!} \frac{(n-1)}{n} \quad (\text{I.44})$$

$$+ \frac{-az^3}{3!} \frac{(n-1)(n-2)}{n^2} + \dots \quad (\text{I.45})$$

The approximation error is then:

$$\text{error} = \sum_{b=2}^n \frac{(-az)^b}{b!} \left(1 - \frac{n!}{n^b(n-b)!} \right) + \sum_{b=n+1}^{\infty} \frac{-az^b}{b!} \quad (\text{I.46})$$

This error function is a monotonic decreasing function of n . With a finite dimension mesh, a steady state error is expected which explains the systematic overestimation of FDM compare to SM for high Peclet numbers.

For $Pe = 1$, comparison of SM and FDM can be made according to the exact solution. Figure I.4 shows that outlet time response of the reactor is adequately calculated by both algorithms but the SM does not match the inlet of the reactor profile. This can be explained by the modified boundary condition used. The separation of convection and dispersion phenomena at the reactor inlet leads to a loss in the inlet gradient information given by the Danckwerts' boundary conditions.

In order to obtain an adequate gradient, the mesh must be significantly reduced at the beginning of the reactor. Thus, a non-uniform mesh size should be used to improve the solution. Figure I.7 shows the variation of the integral of absolute error related to mesh dimension for the profile and the output concentration response. It shows that SM methods exhibits a higher error than FDM but this error is of the same order of magnitude and have interesting consistency properties. The main source of error in the SM algorithm, after the inlet boundary conditions, is the subsystems resolution sequence. For a linear system, application of dispersion and reaction is commutative since they are both linear applications. Thus, the main error source is due to the application of the convection in a separated manner from the preceding phenomena. It leads to an overestimation of the conversion in the reactor. Fortunately, this error could be well controlled by increasing the mesh definition as shown in figure (I.7).

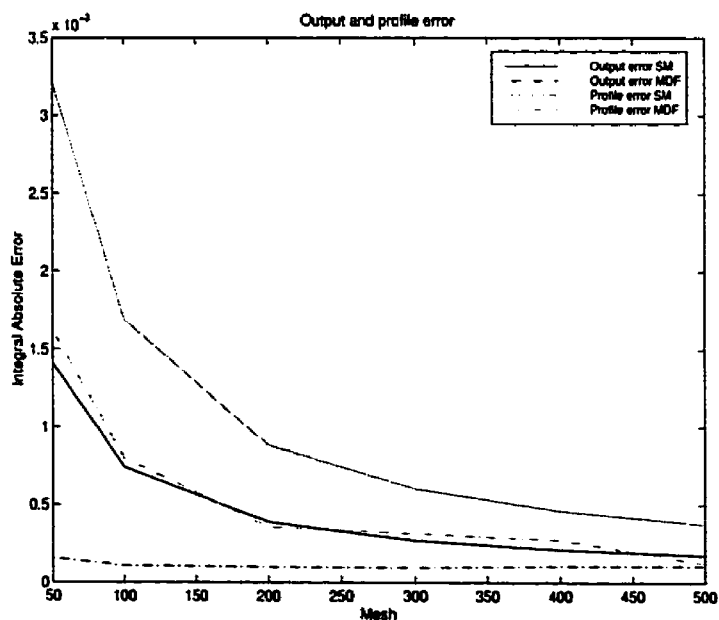


Figure I.7 Error analysis

I.5 Nonlinear PDE: Application to a bleaching reactor

Consider the following system of PDE, describing a chlorine dioxide bleaching reactor (Gendron, 1997a):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial z} + D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - k_C C^3 L^3 \quad (I.47)$$

$$\frac{\partial L}{\partial t} = -v \frac{\partial L}{\partial z} + D \frac{\partial^2 L}{\partial z^2} - k_L C^3 L^3 \quad (I.48)$$

$$\frac{\partial L(0, t)}{\partial z} = \frac{v}{D} (L(0, t) - L_{in}(t)) \quad (I.49)$$

$$\frac{\partial C(0, t)}{\partial z} = \frac{v}{D} (C(0, t) - C_{in}(t)) \quad (I.50)$$

$$\frac{\partial L(1, t)}{\partial z} = 0 \quad (I.51)$$

$$\frac{\partial C(1, t)}{\partial z} = 0 \quad (I.52)$$

$$L(z, 0) = L_0(z) \quad (I.53)$$

$$C(z, 0) = C_0(z) \quad (I.54)$$

where the equations are space normalized to obtain a reactor length of 1 *m*. The parameters values are equal to:

$$k_C = 5.5 \times 10^{-5} \text{ g}^{-3} \text{ l}^3 \text{ \%}^{-2} \text{ min}^{-1} \quad (I.55)$$

$$k_L = 5.7 \times 10^{-7} \text{ g}^{-2} \text{ l}^3 \text{ \%}^{-3} \text{ min}^{-1} \quad (I.56)$$

$$v = 0.05 \text{ m/min} \quad (I.57)$$

Typical industrial influent concentrations of this process are shown in Figure I.8. Figures I.9-I.11 show simulation results for different Peclet number and different simulation approaches. These figures show almost the same characteristics observed

in the linear case namely: (1) FDM has a poor frequency response and (2) SM does not adequately solve the inlet profile for low Peclet numbers.

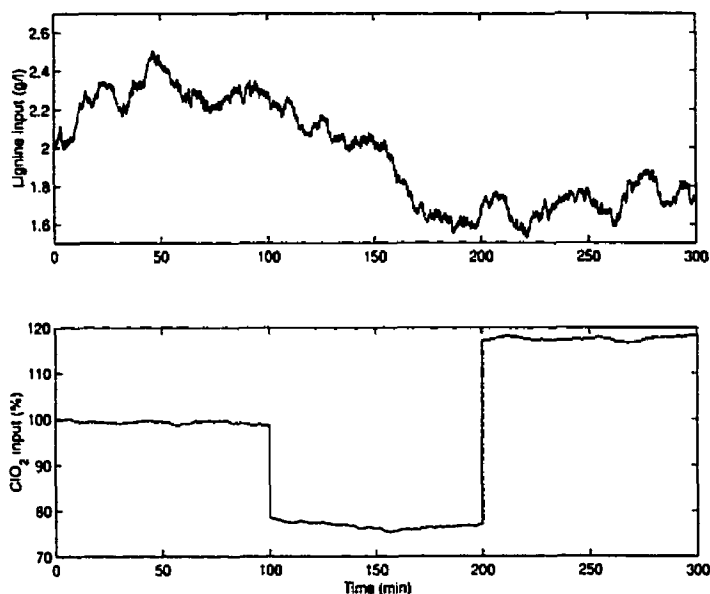


Figure I.8 Input history

Since the reaction subsystem is nonlinear, the sequence of subsystem resolution has to be addressed. Figure I.9-I.10 show that the sequence is not important for systems with slight dispersion. On the other hand, Figure I.11 shows that the solution in the convection-reaction-diffusion (CRD) sequence instead of the convection-diffusion-reaction sequence gives an important error. This error could be explained by the high order of the reaction kinetics involved in Equation (I.47). Figure I.12 shows the integral absolute error between CRD and CDR for different Peclet and mesh definition. Even if both solutions seem to converge to the same solution, the effect of Peclet number is dominant. A variable mesh size with a mesh precision defined by the rate of the reaction could be an efficient way to reduce the error for low Peclet number problems.

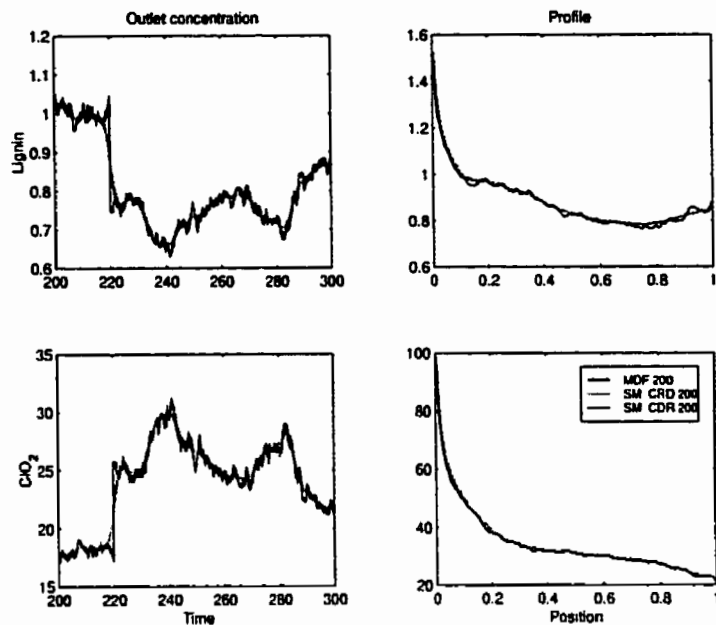


Figure I.9 ClO_2 bleaching system simulation for $Pe = 10^8$

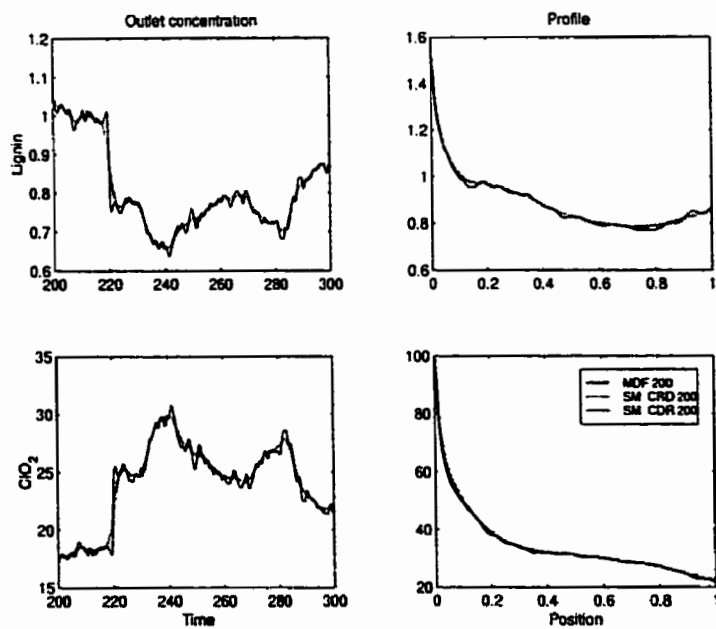


Figure I.10 ClO_2 bleaching system simulation for $Pe = 10^4$

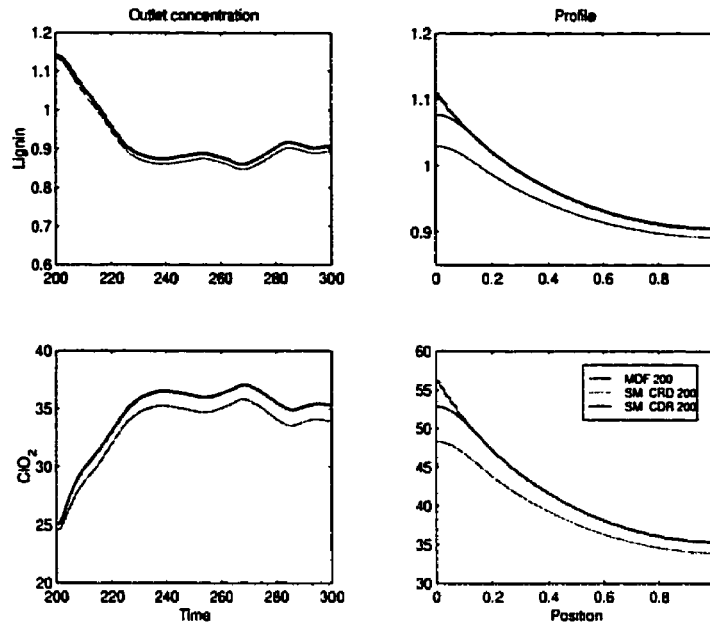


Figure I.11 ClO_2 bleaching system simulation for $Pe = 1$

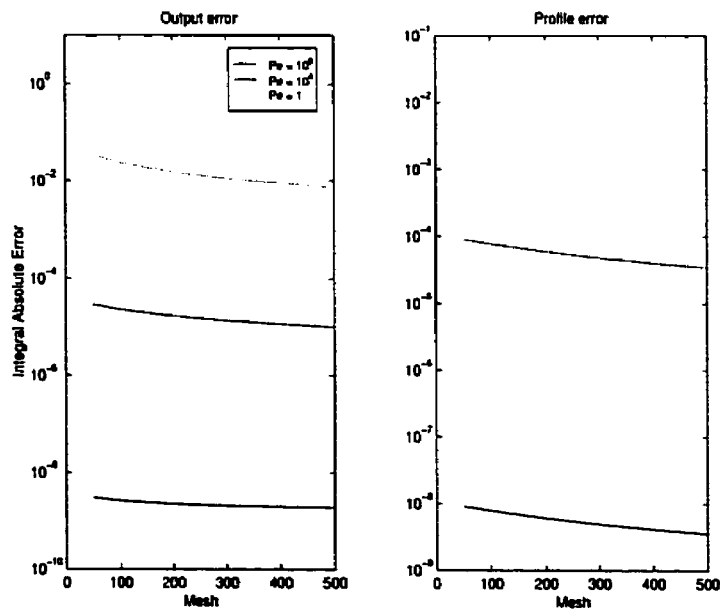


Figure I.12 Error between SM CDR and SM CRD for the bleaching reactor

I.6 Conclusion

A new algorithm for simulation of convection-dispersion-reaction PDE systems has been presented. This algorithm is based on a time solution approach of the PDE model and is validated by phenomenological arguments. It implies the successive solution of a specific sub-problem describing each phenomenon. Its main characteristics include: to solve of parabolic and hyperbolic problems, to enhance numerical model frequency response, to give adequate transient responses to sharp and noisy inputs and robustness to flow type variations. The SM methods can be improved by using a non-uniform or adaptive mesh to compensate for inlet boundary condition error and importance of reaction rate.

Annexe II

Partial Differential Equation Model Based Control: Application to a Bleaching Reactor

Ce manuscrit a été accepté pour le congrès Chemical Process Control IV , Tucson, Arizona

**PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATION MODEL BASED
CONTROL :
APPLICATION TO A BLEACHING REACTOR**

**Stéphane Renou, Michel Perrier, Denis Dochain [†]
and Sylvain Gendron [‡]**

Département de génie chimique, École Polytechnique de Montréal
C.P. 6079, succ. Centre-ville Montréal, H3C 3A7

[†] Université Catholique de Louvain, Bâtiment Euler
Av. G. Lemaitre 4-6, 1348 Louvain-La-Neuve, Belgium

[‡] PAPRICAN, 570 Blvd St-Jean, Pointe-Claire, H9R 3J9

Abstract :

Reactor engineering generally uses distributed parameter models for design purpose. These models are not often used for process control design. May the use of this kind of complex models improve control performance? This paper compares different control strategies based on a distributed parameter model to a time-scaled DMC that only uses a simple input-output model for the control of a bleaching reactor.

II.1 Introduction

The design of tubular reactors is usually performed by using mass and energy balances on a thin slice of the reactor. This modelling approach leads to partial differential equation models. However, process control practice for this type of

reactor often uses lumped models such as first order plus delay transfer functions. Could there be some advantage to use the distributed parameter model for control purposes? On one hand, answering this question is easier when actuators and sensors are also distributed like in furnace heat control. Using a distributed parameter model then allows to use all the information in a structured manner. On the other hand, when sensors and actuators are only present at boundaries, performance enhancement using a distributed parameter model is not obvious. This question will be explored in this paper on a bleaching reactor application.

The bleaching process is the last step of pulp preparation. Its purpose is to improve the brightness of the pulp to a specified level which fulfills customers needs. The control objective for a bleaching reactor is then to obtain the desired brightness with a minimum output brightness variance at the lowest chemical cost. Traditional approaches to this control problem include variations around compensated brightness and scheduling, but the increase of computer power and the introduction of on-line analyzers offer new possibilities for model-based control such as directly using the PDE model.

Different models for the bleaching are presented in the literature for control purposes. Traditionally transfer function or other input-output models are used. But the need for more complex models is pointed out with the use of mixed model. Barrette and Perrier (1995) use multiple CSTR and Wang et al. (1995) use a combination of CSTR and PFR. Recently, a PDE model has been proposed by Renou et al (2000b).

Various approaches have been considered to use a PDE phenomenological model directly. Ray (1981) proposed to divide control approaches on PDEs in two groups. The first group is composed of early lumping methods where a preliminary discretization of the PDE model is used to obtain a set of ODEs. This lumping is often

realized by numerical techniques such as finite difference, orthogonal collocation or finite elements. Early lumping techniques includes the use of global differentiation proposed by Dochain (1994) as an approximation of partial derivative. This approach have been applied to hyperbolic PDE on a bioreactor by Bourrel (1996) and on a bleaching reactor model by the authors (2000*b*). The second group of techniques is based on late lumping methods where the controller design problem is solved directly with the PDE model. When necessary, lumping may be applied for controller implementation. The control of parabolic PDE has been previously addressed by Hong and Bentsman (1994). They provide a design solution for systems in which the control action appears explicitly in the PDE system. For the boundary control problem, the author have proposed a direct adaptive control strategy in Renou et al (2000*a*) for the linear case.

The objective of this study is to present some results on the use of more complex models to enhance control performance. For this purpose, an early lumping and a late lumping strategy are compared to a simple time-scaled Dynamic Matrix Control (DMC) algorithm. The first section of the paper presents the PDE model development for a ClO_2 bleaching reactor. The second section briefly show the design ideas for each controller. The following section presents the main comparative results in terms of response to flow variations, step point changes and kinetic parameter mismatch.

II.2 Bleaching reactor model

The bleaching process for chemical pulp consists of extracting lignin from wood fibre. This brownish colored complex polymer is responsible for wood fiber coloration. It could be degraded by using a strong oxidant like ClO_2 . A PDE model

for this process reactor can be obtained by mass balances on lignin (L) and ClO_2 (C) on a thin section of the reactor. The following space axial dispersion model is then obtained:

$$\frac{\partial L(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 L(z, t)}{\partial z^2} - r_L(L(z, t), C(z, t)) \quad (\text{II.1})$$

$$\frac{\partial C(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 C(z, t)}{\partial z^2} - r_C(L(z, t), C(z, t)) \quad (\text{II.2})$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} &= \frac{v}{D} (L(0, t) - L_{in}(t)) \\ \left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} &= \frac{v}{D} (C(0, t) - C_{in}(t)) \\ \left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \right|_{z=l} &= \frac{\partial C_{out}}{\partial z} = 0 \\ \left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \right|_{z=l} &= \frac{\partial L_{out}}{\partial z} = 0 \end{aligned} \quad (\text{II.3})$$

In this model, reaction kinetics explicitly appears and can be identified by laboratory batch experiments. Hydrodynamical parameters v and D can be determined by tracer analysis. Here the kinetic data obtained by Savoie et Tessier (1997) have been considered and hydrodynamical parameters were deduced from Pudlas et al. (1999) as shown in (Renou *et al.*, 2000b). The following kinetics model and hydrodynamical parameters are used:

$$r_{L1}(L, C) = -k_L C^2 L^2 = -0.0065 C^2 L^2 \quad (\text{II.4})$$

$$r_{C1}(L, C) = -k_C C^2 L^2 = -0.0010 C^2 L^2 \quad (\text{II.5})$$

$$v = 1 \text{ m/s}, D = 0.001 \text{ m}^2/\text{s} \quad (\text{II.6})$$

for a 30 meter tower. Finally we consider the inlet concentration of ClO_2 , C_{in} , and the lignine concentration at the outlet, L_{out} , as the manipulated variable and the controlled variable, respectively. Lignine and ClO_2 measurement are assumed to be available at the both ends of the reactor.

II.3 Time-Scaled DMC

The DMC controller is designed using two dynamic matrices: β_{CL} for ClO_2 input to lignin output response and β_{LL} for lignin input to lignin output response. At each control step, the following criterion is applied:

$$\min_{\Delta u(k)} \phi = \begin{bmatrix} [e(k+1) - \beta_{CL} + K^2 \Delta u(k)^T \Delta u(k)^T]^T \\ [e(k+1) - \beta_{CL} + K^2 \Delta u(k)^T \Delta u(k)^T] \end{bmatrix} \quad (II.7)$$

The prediction error takes the input lignin disturbances into account such as:

$$\begin{aligned} e(k+1) &\equiv y^*(k+1) \\ &- [\hat{y}^0(k) + w(k+1) + \beta_{LL} \Delta L(k)] \end{aligned} \quad (II.8)$$

In the preceding equation, y^* is the set point, \hat{y}^0 is the prediction if no further control action is taken, w is the estimation of disturbance and ΔL is the variation of lignin at the inlet. Traditional DMC is sensitive to flow rate variations since they represent, in fact, a variation of dead-time from an input-output point of view. To overcome this problem efficiently, information about the flow rate has to be transmitted to the controller. To reach this goal, the prediction time span is scaled by the variation of flow rate. Thus, the Δt between each calculation of the control action is scaled by the ratio between the new flow rate and the old flow rate. This approach can be practically implemented by using oversampling or interpolating dynamic matrices and prediction.

II.4 Early lumping approach

One of the problem with the PDE model described by equations (II.1)-(II.3) is that the control action does not appear explicitly in the PDE equations. Dochain (1994) have proposed to use global differences as an approximation for space partial derivatives. This early lumping approach introduces ClO_2 input and lignin output in an approximate model. An exact linearization approach of this model can then be considered. The following approximation are used for both species:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \right|_{z=1} &= \frac{L(1, t) - L(0, t)}{\Delta z} \\ &= L_{out}(t) - L_{in}(t) \end{aligned} \quad (II.9)$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 L(z, t)}{\partial z^2} \right|_{z=1} &= \frac{L(2, t) - L(1, t) - L(0, t)}{\Delta z^2} \\ &= L_{in}(t) - L_{out}(t) \end{aligned} \quad (II.10)$$

To obtain the approximate model, system mass balances are expressed at the reactor outlet, global differences are introduced and both equations are combined by their kinetic term. These operations give the following result:

$$\begin{aligned} \frac{dL_{out}(t)}{dt} &= -v(L_{out}(t) - L_{in}(t)) + D(L_{in}(t) - L_{out}(t)) \\ &+ \frac{k_{L1}}{k_{C1}} \left(\frac{dC_{out}(t)}{dt} + v(C_{out}(t) - C_{in}(t)) \right. \\ &\left. - D(C_{in}(t) - C_{out}(t)) \right) \end{aligned} \quad (II.11)$$

Using a backward finite difference to approximate the ClO_2 time derivative, an input-output relation between ClO_2 input and lignin output can be obtained. Exact linearization principle can be applied on this equation to obtain the following

control law in which λ and γ are external loop tuning parameters:

$$C_{in}(t) = \frac{1}{v + D} (vC_{out}(t) + DC_{out} + \frac{C_{out}(t) - C_{out}(t-1)}{\Delta t} + \frac{k_{C1}}{k_{L1}} [u + v(L_{out}(t) - L_{in}(t)) + D(L_{in} - L_{out})]) \quad (\text{II.12})$$

$$u(t) = \lambda [(L_{sp} - L_{out}(t)) + \gamma \int_0^t (L_{sp} - L_{out}(t)) dt] \quad (\text{II.13})$$

To insure more robustness to this algorithm, an adaptation mechanism is added for the reaction rate ratio as shown in figure II.1. A model is simulated in parallel with a variable k_{L1} , noted k_A , which is modified according to the error between the adaptation model and the system model on lignin using a linear first order filter.

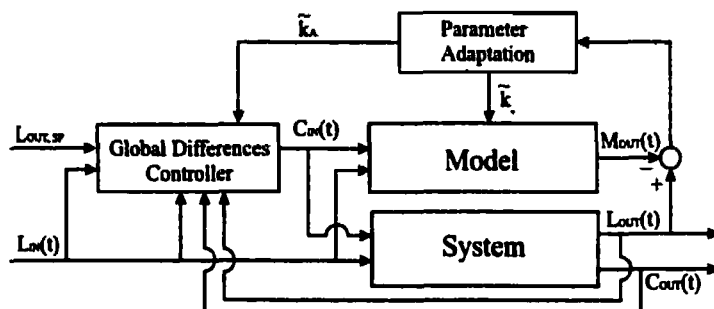


Figure II.1 Global differences controller

II.5 Late lumping approach

To use the whole information of the PDEs model an internal model approach is considered. The error between the model and the system is then used in direct

adaptive control scheme. To account for lignin inlet variation a feedforward compensation is added to this controller. The feedforward controller action is divided in two parts. The first part uses an internal model of the process to give an estimation of the reference output to the controller. The second part directly gives a correction of C/O_2 needed to compensate for the deviation of lignin from the nominal operating point. Those calculation are based on a relaxation algorithm. Figure II.2 shows the proposed control structure. The controller design is performed us-

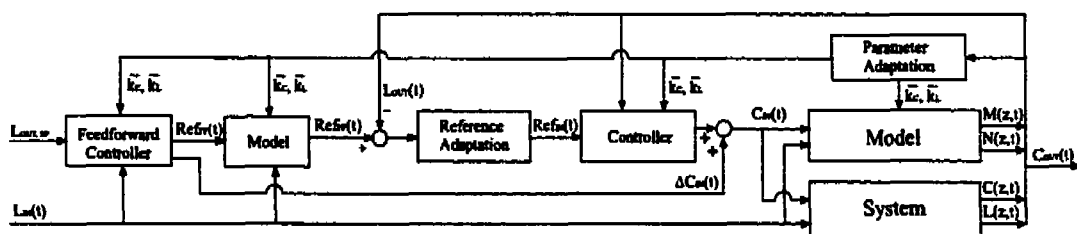


Figure II.2 Late lumping internal model controller

ing the Lyapunov second method following the approach presented in (Renou *et al.*, 2000a). The controller and adaptation laws are defined by:

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{C}}_{in} &= \frac{(C_{in} - Ref_{in})^2}{w + (C_{in} - Ref_{in})^2} \tilde{C}_{in} \\ &+ \frac{(C_{in} - Ref_{in})}{w + (C_{in} - Ref_{in})^2} f_c \end{aligned} \quad (II.14)$$

$$\dot{\tilde{C}}_{in} = \tilde{C}_{in} \quad (II.15)$$

$$\begin{aligned} f_c &= \langle e_C, -v \frac{\partial e_C}{\partial z} \rangle + \langle e_L, -v \frac{\partial e_L}{\partial z} \rangle \\ &+ \langle e_C, \tilde{k}_C Q \rangle + \langle e_L, \tilde{k}_L Q \rangle \\ &+ \frac{\theta}{\epsilon} (C_{in} - Ref_{in}) \dot{Ref}_{in} \end{aligned} \quad (II.16)$$

$$\dot{Ref}_{in} = -\theta(L_{out}(t) - Ref_{ff}(t)) \quad (II.17)$$

$$\dot{\tilde{k}}_L = -a \langle e_L, Q \rangle \quad (II.18)$$

$$\dot{\tilde{k}}_C = -b \langle e_C, Q \rangle \quad (II.19)$$

using the following error functions:

$$e_L(z, t) = L(z, t) - M(z, t) \quad (\text{II.20})$$

$$e_C(z, t) = C(z, t) - N(z, t) \quad (\text{II.21})$$

$$Q(z, t) = L^2 C^2 - M^2 N^2 \quad (\text{II.22})$$

In those equations, $M(z, t)$ and $N(z, t)$ are the lignin and chlorine dioxide model profiles, respectively. The controller law uses, for implementation purposes, only information from sensors at both ends of the reactor. Overall this control structure will behave as a feedforward controller if the model matches the system. Otherwise the feedback part will account for model mismatch.

II.6 Simulation results

Numerical simulation of the control algorithm applied to the system has been performed using a sequencing algorithm with a 100 node mesh (Renou *et al.*, 2000c). In this algorithm, convection, dispersion and reaction phenomena are successively considered at each time step. The controller parameters have been chosen to minimize overshoot and oscillations.

Simulations are started at steady state with $L_{in} = 31$ Kappa and $C_{in} = 2.35$ g/l. A sequence of events is applied to deviate the process from its nominal operating point as shown in Figure II.3.

Figure II.4 shows the response of the system to flow rate variations. In each case the response of the controller to the variation of the delay is adequate. This result is guaranteed in the DMC case by the time-scaling of the model. In PDE based models, the time delay is implicit, and therefore, including flow rate variation

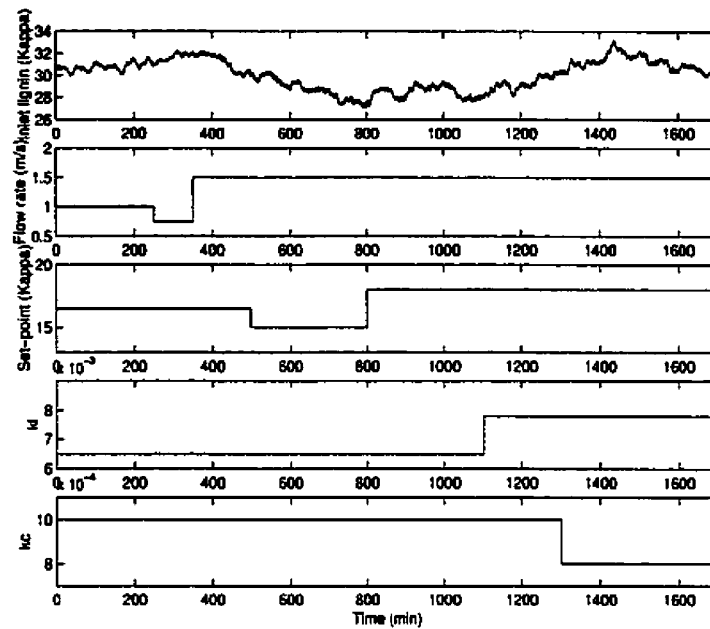


Figure II.3 Operating conditions variations

directly in the control law accounts for time delay variation. The late lumping controller gives the less important deviation from set point in transient.

Figure II.5 shows the response of the system to set-point variations. In this simulation, time-scaled DMC and late lumping controller give similar results that match open-loop dynamics of the reactor. The early lumping controller exhibits an overshoot in case of set-point variation : this is due to the use of important simplifications in the PDE model. This overshoot can be reduced at the cost of a slower response time.

Figure II.6 shows the response of the system to kinetic parameter disturbances and parameter adaptations in PDE-based controller are shown in Figure II.7. In this simulation time-scaled DMC exhibits oscillations. The linear model use in this controller is showing its limits to the successive deviations from the nominal

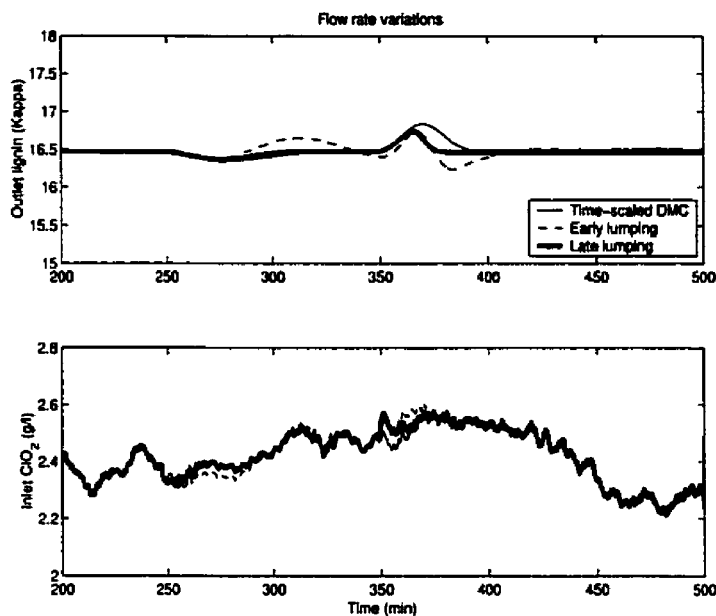


Figure II.4 Flow rate variations

operating point. The early lumping controller induces a large deviation from the set point as for the set-point variation, but the transient is still smooth. The late lumping controller provides a fast response to kinetic parameter variation. This fast adaptation is guaranteed by two factors in this case: the use of a sensor at the inlet of the reactor and the kinetic structure. The sensitivity to a variation of kinetic parameter is then at a maximum at the reactor inlet.

II.7 Conclusion

A comparison between three levels of modeling for control have been presented: time-scaled DMC, an early lumping approach based on global differentiation of partial derivatives and a late lumping approach based on Lyapunov second method with feedforward action. The simulation results show the improvement by using a

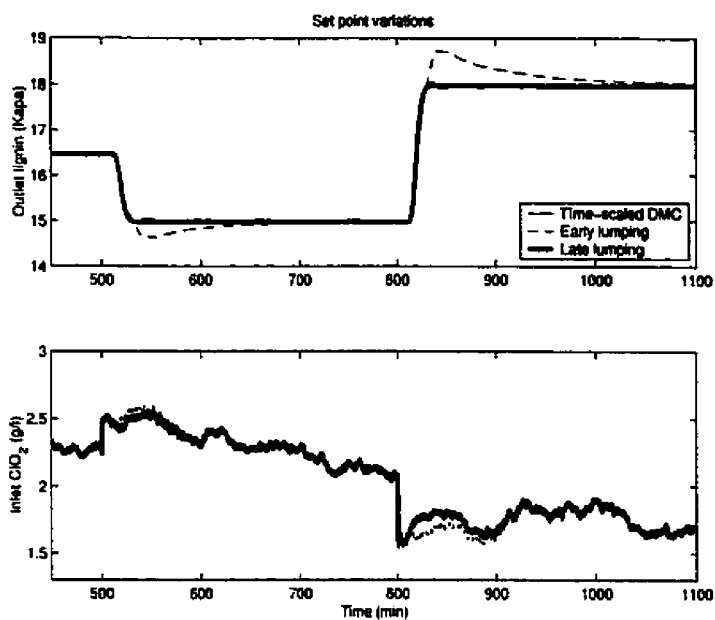


Figure II.5 Set-point variations

PDE model for tubular reactors. This improvement is particularly important when the process moves away from its nominal operating point where the nonlinearities in the kinetics cannot be followed adequately by a simple linear model.

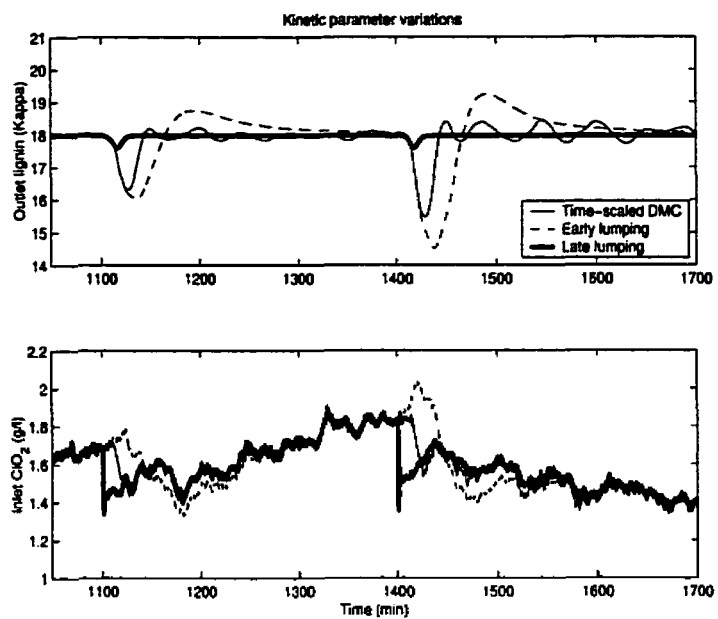


Figure II.6 Model perturbations

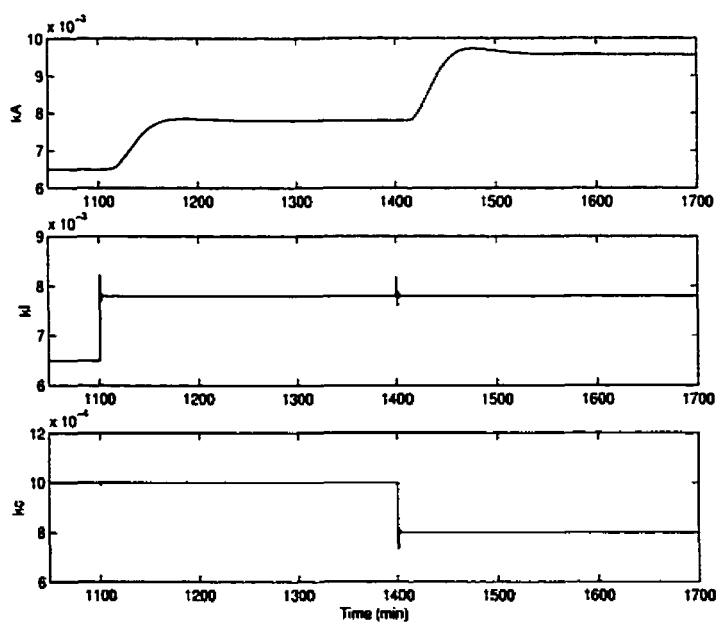


Figure II.7 Kinetic parameter estimations

Annexe III

Commande adaptative d'un système parabolique

Cet article est accepté pour le congrès CIMASI 2000, Casablanca, Maroc.

COMMANDE ADAPTATIVE D'UN SYSTÈME PARABOLIQUE

Stéphane Renou, Michel Perrier

*Département de génie chimique, École Polytechnique de Montréal
C.P. 6079, succ. Centre-Ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3A7*

Denis Dochain

*Université Catholique de Louvain, Bâtiment Euler, Av. G. Lemaître 4-6
1348 Louvain-La-Neuve, Belgique*

Sylvain Gendron

PAPRICAN, 570 Blvd St-Jean Pointe-Claire (Québec), Canada, H9R 3J9

III.1 Introduction

Plusieurs systèmes réels peuvent être décrits par un modèle à paramètres répartis. Une classe importante de ces modèles est formée par les systèmes paraboliques de type convection-diffusion-réaction. Par contre, ce type de modèle, formé d'équations aux dérivées partielles (EDP), est peu utilisé pour la conception de contrôleurs. Ainsi, les fonctions de transfert ou d'autres modèles linéaires sont privilégiés afin d'utiliser la théorie des systèmes linéaires. Ces approches utiliseront généralement des composantes adaptatives ou prédictives afin de tenir compte des nonlinéarités du système et des problèmes d'adéquation de modèle (Ogunnaïke et Ray, 1994). L'utilisation directe de modèles répartis est toutefois prometteuse, car ces modèles

sont beaucoup plus près de la physique de certains systèmes et donc plus riches en informations. De plus, ils fournissent un cadre privilégié pour l'analyse de problèmes appliqués tel que le positionnement des capteurs et des actionneurs.

Les efforts de recherche dans le domaine de la conception de contrôleur pour un modèle à paramètre répartis sont divisés principalement entre les méthodes de pré-approximation et les méthodes de post-approximation (Ray, 1981). La pré-approximation consiste à utiliser une simplification préalable des EDPs sous la forme d'un système d'équations différentielles ordinaires. Cette approximation est généralement réalisée à l'aide de techniques d'approximations numériques telles que les différences finies, les éléments finis ou la colocation orthogonale. Compte tenu du nombre d'équation différentielles important généré par ces méthodes, des techniques de réduction de modèles doivent généralement être utilisées (Christofides, 1996). Ainsi, la conception du contrôleur peut être réalisée en utilisant cette approximation du modèle original. Finalement, des composantes robustes ou adaptatives peuvent être incluses dans la loi de commande pour assurer une bonne performance. À l'inverse, la post-approximation utilise directement le modèle à paramètres répartis pour la conception du contrôleur. Les approximations des dérivées partielles sont utilisées seulement lors de l'application de la loi de contrôle.

Cet article présente une approche de post-approximation pour la commande d'un système parabolique constitué de deux équations. Une approche adaptative est proposée car les coefficients des termes de réaction sont inconnus et peuvent varier dans le temps. Ce problème a été étudié précédemment par Hong and Bentsman (1994) et plus récemment par Böhm et al (1998) dans un cadre plus théorique. Ces

auteurs proposent une solution au problème lorsque l'action de commande apparaît explicitement dans le système d'EDP. Le problème considéré ici est la commande d'un système parabolique où l'action de commande est située à la frontière d'entrée alors que le point de consigne est assigné à la sortie du système. Il s'agit donc d'un problème de contrôle par la frontière. Bourrel (1996) a considérée ce problème dans une application sur un bioréacteur. Elle propose une loi de contrôle basée sur les méthodes de linéarisation exacte dans le cas d'un système hyperbolique.

Cet article propose donc une stratégie de contrôle adaptatif avec modèle de référence pour un système d'EDP. La section suivante présente le développement du contrôleur basé sur la seconde méthode de Lyapunov. Par la suite, divers résultats de simulation seront présentés pour des changement de consigne ainsi que des perturbations des paramètres du terme de réaction.

III.2 Design du contrôleur

Soit le système à paramètres répartis suivant, composé de deux équations différentielles paraboliques et de leurs conditions frontières:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(z, t)}{\partial t} &= -v \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 C(z, t)}{\partial z^2} \\ &- k_1 C(z, t) - k_2 L(z, t) \end{aligned} \quad (\text{III.1})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial L(z, t)}{\partial t} &= -v \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 L(z, t)}{\partial z^2} \\ &- k_3 C(z, t) - k_4 L(z, t) \end{aligned} \quad (\text{III.2})$$

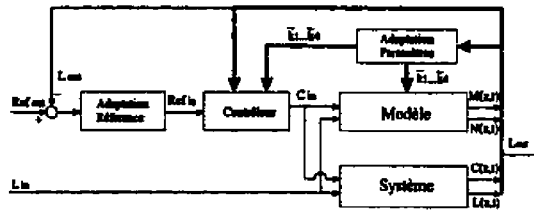


Figure III.1 Structure du contrôleur.

$$\left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{v}{D}(L(0, t) - L_{in}(t)) \quad (\text{III.3})$$

$$\left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{v}{D}(C(0, t) - C_{in}(t)) \quad (\text{III.4})$$

$$\left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \right|_{z=1} = \left. \frac{\partial C_{out}}{\partial z} \right|_{z=1} = 0 \quad (\text{III.5})$$

$$\left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \right|_{z=1} = \left. \frac{\partial L_{out}}{\partial z} \right|_{z=1} = 0 \quad (\text{III.6})$$

Dans ces équations, les paramètres de transport v et D sont supposés connus alors que les paramètres de réaction $k_1 - k_4$ sont inconnus. Le point de consigne est sur la variable L à $z = 1$ alors que l'effort de contrôle C_{in} est situé à $z = 0$. Les EDPs suivantes sont utilisées comme modèle de référence avec les mêmes conditions frontières que le système original:

$$\begin{aligned} \frac{\partial M(z, t)}{\partial t} &= -v \frac{\partial M(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 M(z, t)}{\partial z^2} \\ &\quad - \bar{k}_1 M(z, t) - \bar{k}_2 N(z, t) \end{aligned} \quad (\text{III.7})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial N(z, t)}{\partial t} &= -v \frac{\partial N(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 N(z, t)}{\partial z^2} \\ &\quad - \bar{k}_3 M(z, t) - \bar{k}_4 N(z, t) \end{aligned} \quad (\text{III.8})$$

La Figure 1 présente la structure du contrôleur proposé. L'entrée C_{in} est manipulée afin que la sortie L_{out} suive la référence. Les signaux L_{in} et C_{out} sont libres. La

seconde méthode de Lyapunov est utilisé pour concevoir les lois de contrôle et d'adaptation des paramètres. Soit les équations d'erreur suivantes:

$$e_C(z, t) = C(z, t) - M(z, t) \quad (\text{III.9})$$

$$e_L(z, t) = L(z, t) - N(z, t) \quad (\text{III.10})$$

ainsi que les équations d'erreur d'estimation de paramètres suivantes:

$$\psi_1(t) = \bar{k}_1(t) - k_1 \quad (\text{III.11})$$

$$\psi_2(t) = \bar{k}_2(t) - k_2 \quad (\text{III.12})$$

$$\psi_3(t) = \bar{k}_3(t) - k_3 \quad (\text{III.13})$$

$$\psi_4(t) = \bar{k}_4(t) - k_4 \quad (\text{III.14})$$

La dérivée par rapport au temps des équations (III.9)-(III.14) permet d'obtenir:

$$\begin{aligned} \dot{e}_C &= -v \frac{\partial e_C}{\partial z} + D \frac{\partial^2 e_C}{\partial z^2} - k_1 e_C M \\ &\quad - k_2 e_L + \psi_1 M + \psi_2 N \end{aligned} \quad (\text{III.15})$$

$$\begin{aligned} \dot{e}_L &= -v \frac{\partial e_L}{\partial z} + D \frac{\partial^2 e_L}{\partial z^2} - k_3 e_C M \\ &\quad - k_4 e_L + \psi_3 M + \psi_4 N \end{aligned} \quad (\text{III.16})$$

$$\dot{\psi}_1 = \dot{\bar{k}}_1 \quad (\text{III.17})$$

$$\dot{\psi}_2 = \dot{\bar{k}}_2 \quad (\text{III.18})$$

$$\dot{\psi}_3 = \dot{\bar{k}}_3 \quad (\text{III.19})$$

$$\dot{\psi}_4 = \dot{\bar{k}}_4 \quad (\text{III.20})$$

La seconde méthode de Lyapunov utilise une fonction définie positive $V(x, t)$ avec des dérivées partielles de premier ordre par rapport au temps telle que $V(0, t) = 0$.

Cette fonction doit être choisie de sorte que la dérivée $\dot{V}(x, t)$ de cette fonction est définie négative. Dans ce cas, le système est asymptotiquement stable. De plus, si $V(x, t)$ n'a pas de limite radiale, cette propriété est globale. Soit la fonction de Lyapunov suivante:

$$\begin{aligned}
 V(z, t) &= \frac{1}{2}\langle e_C, e_C \rangle + \frac{1}{2}\langle e_L, e_L \rangle \\
 &+ \frac{1}{2\epsilon}(C_{in} - Ref_{in})^2 \\
 &+ \frac{1}{2\gamma}(C_{out} - Ref_{out})^2 \\
 &+ \frac{1}{2a}\psi_1^2 + \frac{1}{2b}\psi_2^2 \\
 &+ \frac{1}{2c}\psi_3^2 + \frac{1}{2d}\psi_4^2
 \end{aligned} \tag{III.21}$$

La dérivée par rapport au temps de cette fonction est:

$$\begin{aligned}
 \dot{V} &= \langle e_C, \dot{e}_C \rangle + \langle e_L, \dot{e}_L \rangle \\
 &+ \frac{1}{\gamma}(C_{out} - Ref_{out})\dot{C}_{out} \\
 &+ \frac{1}{\epsilon}(C_{in} - Ref_{in})(\dot{C}_{in} - \dot{R}ef_{in}) \\
 &+ \frac{1}{a}\psi_1\dot{\psi}_1 + \frac{1}{b}\psi_2\dot{\psi}_2 \\
 &+ \frac{1}{c}\psi_3\dot{\psi}_3 + \frac{1}{d}\psi_4\dot{\psi}_4
 \end{aligned} \tag{III.22}$$

En insérant (III.15) dans (III.22), on obtient:

$$\begin{aligned}
 \dot{V} &= \langle e_C, -v\frac{\partial e_C}{\partial z} \rangle + \langle e_C, D\frac{\partial^2 e_C}{\partial z^2} \rangle \\
 &+ \langle e_C, -k_1 e_C \rangle + \langle e_C, -k_2 e_L \rangle \\
 &+ \langle e_C, \psi_1 M \rangle + \langle e_C, \psi_2 N \rangle \\
 &+ \langle e_L, -v\frac{\partial e_L}{\partial z} \rangle + \langle e_L, D\frac{\partial^2 e_L}{\partial z^2} \rangle \\
 &+ \langle e_L, -k_3 e_C \rangle + \langle e_L, -k_4 e_L \rangle
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \langle e_L, \psi_3 M \rangle + \langle e_L, \psi_4 N \rangle \\
& + \frac{1}{\epsilon} (C_{in} - Ref_{in}) (\dot{C}_{in} - \dot{Ref}_{in}) \\
& + \frac{1}{a} \psi_1 \dot{\psi}_1 + \frac{1}{b} \psi_2 \dot{\psi}_2 \\
& + \frac{1}{c} \psi_3 \dot{\psi}_3 + \frac{1}{d} \psi_4 \dot{\psi}_4 \\
& + \frac{1}{\gamma} (C_{out} - Ref_{out}) \dot{C}_{out}
\end{aligned} \tag{III.23}$$

L'intégration par partie des termes de second ordre permet d'obtenir:

$$\begin{aligned}
\dot{V} & = \langle e_C, -v \frac{\partial e_C}{\partial z} \rangle + \langle \frac{\partial e_C}{\partial z}, -D \frac{\partial e_C}{\partial z} \rangle \\
& + e_C D \frac{\partial e_C}{\partial z} \Big|_{out} - e_C D \frac{\partial e_C}{\partial z} \Big|_{in} \\
& + \langle e_C, -k_1 e_C \rangle + \langle e_C, -k_2 e_L \rangle \\
& + \langle e_C, \psi_1 M \rangle + \langle e_C, \psi_2 N \rangle \\
& + \langle e_L, -v \frac{\partial e_L}{\partial z} \rangle + \langle \frac{\partial e_L}{\partial z}, -D \frac{\partial e_L}{\partial z} \rangle \\
& + e_L D \frac{\partial e_L}{\partial z} \Big|_{out} - e_L D \frac{\partial e_L}{\partial z} \Big|_{in} \\
& + \langle e_L, -k_3 e_C \rangle + \langle e_L, -k_4 e_L \rangle \\
& + \langle e_L, \psi_3 M \rangle + \langle e_L, \psi_4 N \rangle \\
& + \frac{1}{\epsilon} (C_{in} - Ref_{in}) (\dot{C}_{in} - \dot{Ref}_{in}) \\
& + \frac{1}{a} \psi_1 \dot{\psi}_1 + \frac{1}{b} \psi_2 \dot{\psi}_2 \\
& + \frac{1}{c} \psi_3 \dot{\psi}_3 + \frac{1}{d} \psi_4 \dot{\psi}_4 \\
& + \frac{1}{\gamma} (C_{out} - Ref_{out}) \dot{C}_{out}
\end{aligned} \tag{III.24}$$

En utilisant la loi de contrôle suivante:

$$\begin{aligned}
\dot{Ref}_{in} & = \theta (L_{out} - Ref_{out}) \\
\dot{C}_{in} & = -\frac{\epsilon}{(C_{in} - Ref_{in})} \langle e_C, -v \frac{\partial e_C}{\partial z} \rangle
\end{aligned} \tag{III.25}$$

$$\begin{aligned}
& + e_C D \frac{\partial e_C}{\partial z} \Big|_{out} - e_C D \frac{\partial e_C}{\partial z} \Big|_{in} \\
& + \langle e_L, -v \frac{\partial e_L}{\partial z} \rangle + e_L D \frac{\partial e_L}{\partial z} \Big|_{out} \\
& - e_L D \frac{\partial e_L}{\partial z} \Big|_{in} \\
& + \frac{1}{\gamma} (C_{out} - R e f_{out}) \dot{C}_{out} \\
& - \theta (L_{out} - R e f_{out}) \\
& - \bar{k}_2 \langle e_C, e_L \rangle - \bar{k}_3 \langle e_C, e_L \rangle
\end{aligned} \tag{III.26}$$

La fonction de Lyapunov devient:

$$\begin{aligned}
\dot{V} & = \langle \frac{\partial e_C}{\partial z}, -D \frac{\partial e_C}{\partial z} \rangle + \langle \frac{\partial e_L}{\partial z}, -D \frac{\partial e_L}{\partial z} \rangle \\
& + \langle e_C, -k_1 e_C \rangle + \langle e_L, -k_4 e_L \rangle \\
& + \langle e_L, \psi_1 M \rangle + \langle e_C, \psi_2 N \rangle \\
& + \langle e_C, \psi_2 e_L \rangle + \langle e_L, \psi_3 e_C \rangle \\
& + \langle e_L, \psi_3 M \rangle + \langle e_L, \psi_4 N \rangle \\
& + \frac{1}{a} \psi_1 \dot{\psi}_1 + \frac{1}{b} \psi_2 \dot{\psi}_2 \\
& + \frac{1}{c} \psi_3 \dot{\psi}_3 + \frac{1}{d} \psi_4 \dot{\psi}_4
\end{aligned} \tag{III.27}$$

Finalement, il suffit d'utiliser les lois d'adaptation suivantes:

$$\dot{\psi}_1 = -a \langle e_C, M \rangle \tag{III.28}$$

$$\dot{\psi}_2 = -b (\langle e_C, N \rangle + \langle e_C, e_L \rangle) \tag{III.29}$$

$$\dot{\psi}_3 = -c (\langle e_L, M \rangle + \langle e_L, e_C \rangle) \tag{III.30}$$

$$\dot{\psi}_4 = -d \langle e_L, N \rangle \tag{III.31}$$

pour obtenir l'expression finale de la fonction de Lyapunov:

$$\begin{aligned} \dot{V} &= \left\langle \frac{\partial e_C}{\partial z}, -D \frac{\partial e_C}{\partial z} \right\rangle + \langle e_C, -k_1 e_C \rangle \\ &+ \left\langle \frac{\partial e_L}{\partial z}, -D \frac{\partial e_L}{\partial z} \right\rangle \\ &+ \langle e_L, -k_4 e_L \rangle \end{aligned} \quad (\text{III.32})$$

Comme cette expression est définie négative, l'ensemble formé du système, de la loi de contrôle et des lois d'adaptation est asymptotiquement stable. Pour éliminer les discontinuités possibles de la loi de commande, l'expression suivante est utilisée:

$$\dot{\tilde{C}}_{in} = \frac{(C_{in} - Ref_{in})^2}{(w + C_{in} - Ref_{in})^2} \tilde{C} \quad (\text{III.33})$$

$$+ \frac{(C_{in} - Ref_{in})}{(w + C_{in} - Ref_{in})^2} f_c$$

$$\dot{C}_{in} = \tilde{C}_{in} \quad (\text{III.34})$$

$$\begin{aligned} f_c &= \left\langle e_C, -v \frac{\partial e_C}{\partial z} \right\rangle + \left\langle e_L, -v \frac{\partial e_L}{\partial z} \right\rangle \\ &+ e_C D \frac{\partial e_C}{\partial z} \Big|_{out} - e_C D \frac{\partial e_C}{\partial z} \Big|_{in} \\ &+ e_L D \frac{\partial e_L}{\partial z} \Big|_{out} - e_L D \frac{\partial e_L}{\partial z} \Big|_{in} \\ &+ \frac{1}{\gamma} (C_{out} - Ref_{out}) \dot{C}_{out} \\ &- \theta (L_{out} - Ref_{out}) \\ &- \tilde{k}_2 \langle e_C, e_L \rangle - \tilde{k}_3 \langle e_C, e_L \rangle \end{aligned} \quad (\text{III.35})$$

Le paramètre w doit être ajusté, autour d'une faible valeur positive, afin d'optimiser la performance. Il est possible de vérifier que la loi de commande originale et la loi modifiée sont en fait identiques pour $\dot{\tilde{C}}_{in} = 0$.

III.3 Résultats et discussion

La simulation numérique du système et de l'algorithme de commande est réalisée par la méthode séquentielle avec un maillage de 100 éléments pour un éléments de 1 mètre de long (Renou *et al.*, 2000c). Dans cet algorithme les phénomènes de convection, dispersion et réaction sont considérés de façon successive à chaque pas de temps.

Les paramètres de départ du système sont:

$$\begin{aligned} v &= 0.05 \text{ m/min} & k_2 &= 0.02 \text{ 1/min} \\ D &= 0.05 \text{ m}^2/\text{min} & k_3 &= 0.05 \text{ 1/min} \\ k_1 &= 0.03 \text{ 1/min} & k_4 &= 0.04 \text{ 1/min} \end{aligned}$$

Les paramètres du contrôleur ont été choisis afin de minimiser le dépassement et les réponses oscillatoires. L'objectif principal est de rejeter les perturbations et les variation des paramètres du système plutôt que d'optimiser le suivi de trajectoire. Les simulations débutent en régime permanent pour des entrées de L et C égales à 1. Les paramètres ajustables sont alors:

$$\begin{aligned} \epsilon &= 1 & \theta &= .05 & \gamma &= 100 \\ a &= 2 & b &= 2 \\ c &= 2 & d &= 2 \\ Ref_{out} &= 0.1854 \text{ g/l} \end{aligned}$$

La Figure III.2 montre la réponse du système à une variation échelon du point de consigne de L de 0.17 de 0.20 g/L. Les courbes à la sortie $z = 1$ sont lisses et avec un faible dépassement tel que requis. Une adéquation parfaite entre les réponses

du système et du modèle est observée. De plus, aucune adaptation des paramètres de réaction n'est observée.

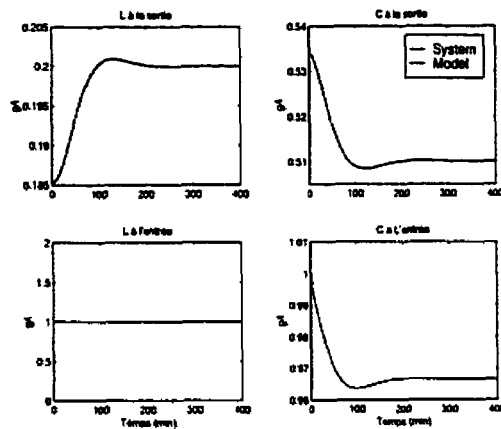


Figure III.2 Variation de la référence Ref_{out} .

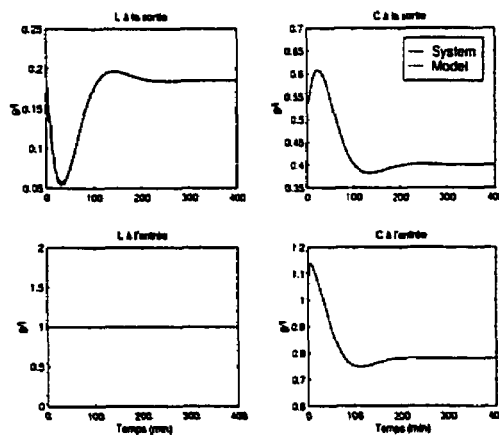


Figure III.3 Perturbation du modèle.

La Figure III.3 présente la réponse du système asservi à une variation d'un paramètre de cinétique de réaction. Ces paramètres ont été modifiés de la façon suivante:

$$\begin{aligned} k_1 &= 0.03 \text{ 1/min} & k_2 &= 0.02 \text{ 1/min} \\ k_3 &= 0.06 \text{ 1/min} & k_4 &= 0.05 \text{ 1/min} \end{aligned}$$

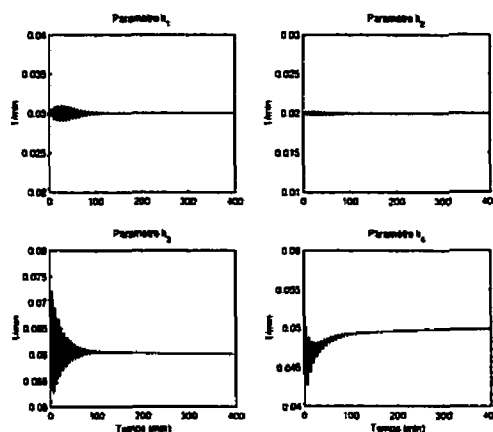


Figure III.4 Adaptation des paramètres.

La figure III.4 permet de voir que le mécanisme d'adaptation est oscillatoire mais permet une convergence rapide aux véritables valeurs du système. Les réponses dynamiques du système et du contrôleur sont relativement identiques, seule une légère perturbation de la courbe du modèle est observable. Ceci suggère une certaine oscillation entre les différentes solutions possibles pour la convergence des paramètres. La sortie L admet une importante variation du point de consigne mais retourne rapidement à ce point sans erreur en régime permanent. Ce comportement peut être expliqué par la lenteur du mécanisme d'adaptation de la référence utilisée. Par contre, le type de perturbation de modèle est agressif et peu réaliste en pratique. Il peut donc être considéré comme une analyse du pire cas.

La Figure III.5 présente la réponse du système asservi à la combinaison d'une variation de point de consigne et de variation des paramètres. Comme les courbes d'adaptation des paramètres sont similaires à celles présentées à la Figure III.4, elle ne sont pas reproduites ici. Cette similitude montre bien que le mécanisme d'adaptation dépend essentiellement de l'erreur entre le modèle et le système plutôt

que des caractéristiques de l'entrée.

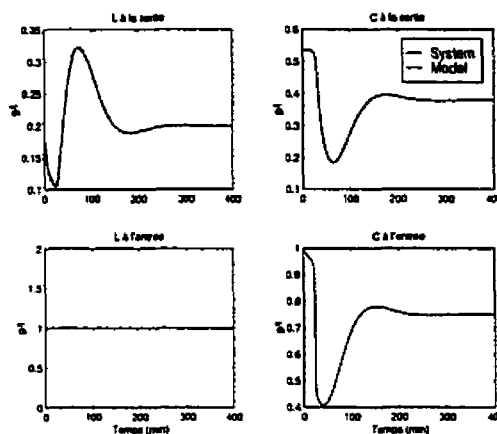


Figure III.5 Variation de la référence et des paramètres du système.

Finalement la Figure III.6 montre l'effet de l'ajout d'un bruit sur l'entrée L sur les mêmes conditions de simulation que précédemment. La convergence vers le point de consigne ainsi que le mécanisme d'adaptation présente les mêmes caractéristiques dynamiques que précédemment. Par contre, les perturbations sur L ne sont pas rejetées efficacement.

III.4 Conclusion

Un contrôleur adaptatif à modèle de référence a été présenté pour un système à paramètres répartis avec contrôle par la frontière d'entrée de la frontière de sortie. Cet algorithme inclut un modèle de référence à paramètres répartis, une loi de modification de la référence et une loi d'adaptation des paramètres des termes de réaction. L'analyse par simulation a montré une bonne réponse à une variation du point de consigne ainsi qu'une estimation efficace des paramètres cinétiques. Par

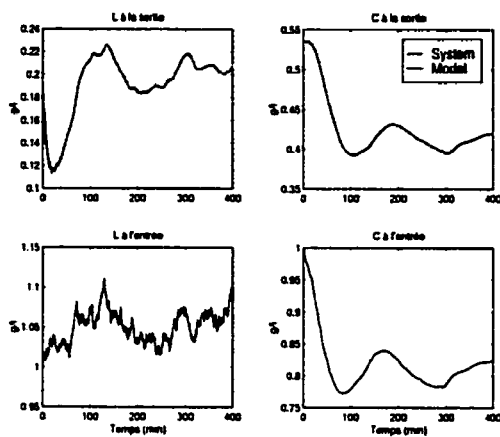


Figure III.6 Variation de la référence, des paramètres du système et de l'entrée *Lin*

contre, la réponse aux perturbations de l'entrée libre doit être améliorée. Ceci pourrait probablement être réalisé à l'aide d'une stratégie d'adaptation de la référence qui inclut une composante anticipative.

Annexe IV

Direct Adaptive Control of a Linear Parabolic System

IFAC System Identification Symposium, Acte de conférence sur CD-ROM, article ThMD1-1, Santa-Barbara, 2000, 5 pages.

DIRECT ADAPTIVE CONTROL OF A LINEAR PARABOLIC SYSTEM

**Stéphane Renou, Michel Perrier, Denis Dochain [†]
and Sylvain Gendron [‡]**

Département de génie chimique, École Polytechnique de Montréal

C.P. 6079, succ. Centre-ville Montréal, H3C 3A7

[†] Université Catholique de Louvain, Bâtiment Euler

Av. G. Lemaître 4-6, 1348 Louvain-La-Neuve, Belgium

[‡] PAPRICAN, 570 Blvd St-Jean, Pointe-Claire, H9R 3J9

Abstract :

This paper presents an adaptive model reference algorithm for a linear distributed parameter system with input boundary control and output boundary reference. The control and adaptation laws are based a model reference adaptive control approach. This controller is applied to a tubular reactor model with unknown kinetic parameters. Simulation results are shown for set-point changes, variation of kinetic parameters and input perturbation.

IV.1 Introduction

Several chemical reactors are essentially distributed processes and their dynamics can be appropriately represented by partial differential equations (PDE). For instance, a tubular reactor modeled by mass balances leads to parabolic PDE which account for convection, dispersion and reaction phenomena occurring in the reac-

tor. Traditional process control uses a transfer function representation obtained by input/output identification for those systems. Feedback controllers designed with these models often include adaptive or predictive strategies to account for process nonlinearities and model mismatch (Ogunnaike et Ray, 1994). Using a PDE model represents an interesting approach since it gives a more accurate representation of reality and then more information for the process engineer. Moreover, it gives an interesting framework for the analysis of sensor and actuator location.

Various approaches have been considered to use the PDE phenomenological model directly. Ray (1981) proposed to divide control approaches on PDEs in two groups. The first group is composed of early lumping methods where a preliminary discretization of the PDE model is used to obtain a set of ODEs. This lumping is often realized by numerical techniques such as finite difference, orthogonal collocation or finite elements. Regarding the numerous equations obtained, model reduction techniques may also be used (Christofides, 1996). Finally, lumped control design methods can be applied on the resulting ODE models. The other group is based on late lumping methods where the controller design problem is solved directly with the PDE model. When necessary, lumping may be applied for controller implementation.

The problem addressed here is the control of a tubular reactor by a late lumping approach. The dynamics of the reactor are defined by two parabolic equations representing mass balances on two reacting species. It is assumed that the reaction kinetics are not well known and could vary with time, thus requiring an adaptive approach. The control of parabolic PDE have been addressed previously by Hong and Bentsman (1994) and more recently in a more theoretical framework by Böhm et al (1998). They provide a design solution for systems in which the control action appears explicitly in the PDE system. In this tubular reactor problem,

the controller action is the concentration of one of the reactants at the inlet. The problem to be solved is then a boundary control problem. Bourrel (1996) have addressed this problem for bioreactor control and they have proposed a feedback control law based on exact linearization in the case of hyperbolic systems of PDEs

We propose in this paper an adaptive controller using a reference model based on a parabolic PDE system. The first part of this paper shows the development of the model based adaptive controller using a Lyapunov approach. In the second part, simulation results are shown for set-point changes and for perturbation in the kinetic parameters.

IV.2 Model Reference Controller Design

A tubular isothermal chemical reactor can be modeled using mass balances on each reactant. This leads to the well-known dispersive model. A reactor with two species is modeled here with two mass balances. The first one is on reactant L for which a set-point is specified at the end of the reactor. The concentration L is variable at the inlet. The second reactant C , is used as the control variable at the inlet. This leads to the following distributed parameter system (DPS) described by two parabolic linear equations and their boundary conditions:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(z, t)}{\partial t} &= -v \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 C(z, t)}{\partial z^2} \\ &- k_1 C(z, t) - k_2 L(z, t) \end{aligned} \quad (\text{IV.1})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial L(z, t)}{\partial t} &= -v \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 L(z, t)}{\partial z^2} \\ &- k_3 C(z, t) - k_4 L(z, t) \end{aligned} \quad (\text{IV.2})$$

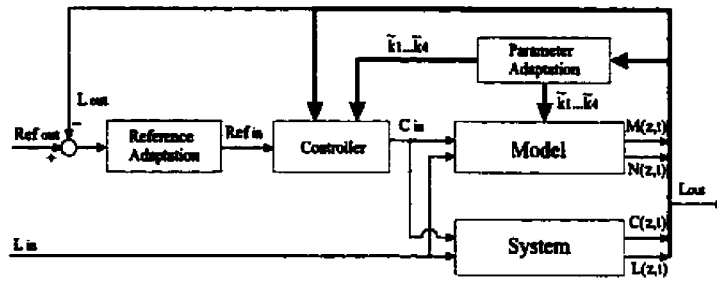


Figure IV.1 Controller structure.

$$\left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{v}{D} (L(0, t) - L_{in}(t)) \quad (\text{IV.3})$$

$$\left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{v}{D} (C(0, t) - C_{in}(t)) \quad (\text{IV.4})$$

$$\left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \right|_{z=1} = \left. \frac{\partial C_{out}}{\partial z} \right|_{z=1} = 0 \quad (\text{IV.5})$$

$$\left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \right|_{z=1} = \left. \frac{\partial L_{out}}{\partial z} \right|_{z=1} = 0 \quad (\text{IV.6})$$

In these equations, the parameters v and D can be determined from hydrodynamic experiments on the process but parameters $k_1 - k_4$ are considered unknown. The following PDEs are then used as a reference model with the same boundary conditions:

$$\begin{aligned} \frac{\partial M(z, t)}{\partial t} &= -v \frac{\partial M(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 M(z, t)}{\partial z^2} \\ &\quad - \bar{k}_1 M(z, t) - \bar{k}_2 N(z, t) \end{aligned} \quad (\text{IV.7})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial N(z, t)}{\partial t} &= -v \frac{\partial N(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 N(z, t)}{\partial z^2} \\ &\quad - \bar{k}_3 M(z, t) - \bar{k}_4 N(z, t) \end{aligned} \quad (\text{IV.8})$$

In this approach we consider that one input, C_{in} , is used as the control variable and the other variable input, L_{in} , is free. The controlled output will be L_{out} while

C_{out} is free. The proposed controller structure is shown in Figure IV.1. A Lyapunov approach is used to design the adaptation mechanism and the control law. Let us first define the error equations of the system:

$$e_C(z, t) = C(z, t) - M(z, t) \quad (IV.9)$$

$$e_L(z, t) = L(z, t) - N(z, t) \quad (IV.10)$$

and the parameter estimation errors:

$$\psi_1(t) = \tilde{k}_1(t) - k_1 \quad (IV.11)$$

$$\psi_2(t) = \tilde{k}_2(t) - k_2 \quad (IV.12)$$

$$\psi_3(t) = \tilde{k}_3(t) - k_3 \quad (IV.13)$$

$$\psi_4(t) = \tilde{k}_4(t) - k_4 \quad (IV.14)$$

Time differentiation of equations (IV.9)-(IV.14) those errors leads to:

$$\begin{aligned} \dot{e}_C &= -v \frac{\partial e_C}{\partial z} + D \frac{\partial^2 e_C}{\partial z^2} - k_1 e_C M \\ &\quad - k_2 e_L + \psi_1 M + \psi_2 N \end{aligned} \quad (IV.15)$$

$$\begin{aligned} \dot{e}_L &= -v \frac{\partial e_L}{\partial z} + D \frac{\partial^2 e_L}{\partial z^2} - k_3 e_C M \\ &\quad - k_4 e_L + \psi_3 M + \psi_4 N \end{aligned} \quad (IV.16)$$

$$\dot{\psi}_1 = \dot{\tilde{k}}_1 \quad (IV.17)$$

$$\dot{\psi}_2 = \dot{\tilde{k}}_2 \quad (IV.18)$$

$$\dot{\psi}_3 = \dot{\tilde{k}}_3 \quad (IV.19)$$

$$\dot{\psi}_4 = \dot{\tilde{k}}_4 \quad (IV.20)$$

The above equations can be used to design control and adaptation laws based on the Lyapunov second method. The objective is then to find a positive definite

function with continuous first partial time derivative $V(x, t)$ such that $V(0, t) = 0$. If the derivative of this function $\dot{V}(x, t)$ is definite negative then the system is asymptotically stable. If $V(x, t)$ is radially unbounded, this property is global. Consider the following Lyapunov function:

$$\begin{aligned}
 V(z, t) &= \frac{1}{2}\langle e_C, e_C \rangle + \frac{1}{2}\langle e_L, e_L \rangle \\
 &+ \frac{1}{2\epsilon}(C_{in} - Ref_{in})^2 + \frac{1}{2\gamma}(C_{out} - Ref_{out})^2 \\
 &+ \frac{1}{2a}\psi_1^2 + \frac{1}{2b}\psi_2^2 + \frac{1}{2c}\psi_3^2 + \frac{1}{2d}\psi_4^2
 \end{aligned} \tag{IV.21}$$

The time derivative of this function is equal to:

$$\begin{aligned}
 \dot{V} &= \langle e_C, \dot{e}_C \rangle + \langle e_L, \dot{e}_L \rangle + \frac{1}{\gamma}(C_{out} - Ref_{out})\dot{C}_{out} \\
 &+ \frac{1}{\epsilon}(C_{in} - Ref_{in})(\dot{C}_{in} - \dot{Ref}_{in}) \\
 &+ \frac{1}{a}\psi_1\dot{\psi}_1 + \frac{1}{b}\psi_2\dot{\psi}_2 + \frac{1}{c}\psi_3\dot{\psi}_3 + \frac{1}{d}\psi_4\dot{\psi}_4
 \end{aligned} \tag{IV.22}$$

Introducing equation (IV.15) into (IV.22) leads to:

$$\begin{aligned}
 \dot{V} &= \langle e_C, -v\frac{\partial e_C}{\partial z} \rangle + \langle e_C, D\frac{\partial^2 e_C}{\partial z^2} \rangle + \langle e_C, -k_1 e_C \rangle \\
 &+ \langle e_C, -k_2 e_L \rangle + \langle e_C, \psi_1 M \rangle + \langle e_C, \psi_2 N \rangle \\
 &+ \langle e_L, -v\frac{\partial e_L}{\partial z} \rangle + \langle e_L, D\frac{\partial^2 e_L}{\partial z^2} \rangle + \langle e_L, -k_3 e_C \rangle \\
 &+ \langle e_L, -k_4 e_L \rangle + \langle e_L, \psi_3 M \rangle + \langle e_L, \psi_4 N \rangle \\
 &+ \frac{1}{\epsilon}(C_{in} - Ref_{in})(\dot{C}_{in} - \dot{Ref}_{in}) \\
 &+ \frac{1}{a}\psi_1\dot{\psi}_1 + \frac{1}{b}\psi_2\dot{\psi}_2 + \frac{1}{c}\psi_3\dot{\psi}_3 + \frac{1}{d}\psi_4\dot{\psi}_4 \\
 &+ \frac{1}{\gamma}(C_{out} - Ref_{out})\dot{C}_{out}
 \end{aligned} \tag{IV.23}$$

Integration by part gives:

$$\begin{aligned}
 \dot{V} = & \langle e_C, -v \frac{\partial e_C}{\partial z} \rangle + \langle \frac{\partial e_C}{\partial z}, -D \frac{\partial e_C}{\partial z} \rangle \\
 & + e_C D \frac{\partial e_C}{\partial z} \Big|_{out} - e_C D \frac{\partial e_C}{\partial z} \Big|_{in} + \langle e_C, -k_1 e_C \rangle \\
 & + \langle e_C, -k_2 e_L \rangle + \langle e_C, \psi_1 M \rangle + \langle e_C, \psi_2 N \rangle \\
 & + \langle e_L, -v \frac{\partial e_L}{\partial z} \rangle + \langle \frac{\partial e_L}{\partial z}, -D \frac{\partial e_L}{\partial z} \rangle \\
 & + e_L D \frac{\partial e_L}{\partial z} \Big|_{out} - e_L D \frac{\partial e_L}{\partial z} \Big|_{in} + \langle e_L, -k_3 e_C \rangle \\
 & + \langle e_L, -k_4 e_L \rangle + \langle e_L, \psi_3 M \rangle + \langle e_L, \psi_4 N \rangle \\
 & + \frac{1}{\epsilon} (C_{in} - Ref_{in}) (\dot{C}_{in} - \dot{Ref}_{in}) \\
 & + \frac{1}{a} \psi_1 \dot{\psi}_1 + \frac{1}{b} \psi_2 \dot{\psi}_2 + \frac{1}{c} \psi_3 \dot{\psi}_3 + \frac{1}{d} \psi_4 \dot{\psi}_4 \\
 & + \frac{1}{\gamma} (C_{out} - Ref_{out}) \dot{C}_{out}
 \end{aligned} \tag{IV.24}$$

Using the following control law:

$$Ref_{in} = \theta (L_{out} - Ref_{out}) \tag{IV.25}$$

$$\begin{aligned}
 \dot{C}_{in} = & - \frac{\epsilon}{(C_{in} - Ref_{in})} \left(\langle e_C, -v \frac{\partial e_C}{\partial z} \rangle \right. \\
 & + e_C D \frac{\partial e_C}{\partial z} \Big|_{out} - e_C D \frac{\partial e_C}{\partial z} \Big|_{in} \\
 & + \langle e_L, -v \frac{\partial e_L}{\partial z} \rangle + e_L D \frac{\partial e_L}{\partial z} \Big|_{out} \\
 & - e_L D \frac{\partial e_L}{\partial z} \Big|_{in} + \frac{1}{\gamma} (C_{out} - Ref_{out}) \dot{C}_{out} \\
 & - \theta (L_{out} - Ref_{out}) \\
 & \left. - \bar{k}_2 \langle e_C, e_L \rangle - \bar{k}_3 \langle e_C, e_L \rangle \right)
 \end{aligned} \tag{IV.26}$$

the derivative of the Lyapunov function becomes:

$$\begin{aligned}
 \dot{V} &= \left\langle \frac{\partial e_C}{\partial z}, -D \frac{\partial e_C}{\partial z} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial e_L}{\partial z}, -D \frac{\partial e_L}{\partial z} \right\rangle \\
 &+ \langle e_C, -k_1 e_C \rangle + \langle e_L, -k_4 e_L \rangle \\
 &+ \langle e_L, \psi_1 M \rangle + \langle e_C, \psi_2 N \rangle \\
 &+ \langle e_C, \psi_2 e_L \rangle + \langle e_L, \psi_3 e_C \rangle \\
 &+ \langle e_L, \psi_3 M \rangle + \langle e_L, \psi_4 N \rangle \\
 &+ \frac{1}{a} \psi_1 \dot{\psi}_1 + \frac{1}{b} \psi_2 \dot{\psi}_2 + \frac{1}{c} \psi_3 \dot{\psi}_3 + \frac{1}{d} \psi_4 \dot{\psi}_4
 \end{aligned} \tag{IV.27}$$

Finally, the following adaptation laws are used:

$$\dot{\psi}_1 = -a \langle e_C, M \rangle \tag{IV.28}$$

$$\dot{\psi}_2 = -b (\langle e_C, N \rangle + \langle e_C, e_L \rangle) \tag{IV.29}$$

$$\dot{\psi}_3 = -c (\langle e_L, M \rangle + \langle e_L, e_C \rangle) \tag{IV.30}$$

$$\dot{\psi}_4 = -d \langle e_L, N \rangle \tag{IV.31}$$

The final expression for the derivative of the Lyapunov function is then:

$$\begin{aligned}
 \dot{V} &= \left\langle \frac{\partial e_C}{\partial z}, -D \frac{\partial e_C}{\partial z} \right\rangle + \langle e_C, -k_1 e_C \rangle \\
 &+ \left\langle \frac{\partial e_L}{\partial z}, -D \frac{\partial e_L}{\partial z} \right\rangle + \langle e_L, -k_4 e_L \rangle
 \end{aligned} \tag{IV.32}$$

This expression is negative definite, ensuring the asymptotic stability of the adaptation and control laws. To avoid division by zero in equation ??, the following modified control law is considered:

$$\begin{aligned}
 \ddot{C}_{in} &= \frac{(C_{in} - Ref_{in})^2}{(w + C_{in} - Ref_{in})^2} \ddot{C} \\
 &+ \frac{(C_{in} - Ref_{in})}{(w + C_{in} - Ref_{in})^2} f_c
 \end{aligned} \tag{IV.33}$$

$$\dot{C}_{in} = \tilde{C}_{in} \quad (IV.34)$$

$$\begin{aligned} f_c = & \left(\langle e_C, -v \frac{\partial e_C}{\partial z} \rangle + \langle e_L, -v \frac{\partial e_L}{\partial z} \rangle \right. \\ & + e_C D \frac{\partial e_C}{\partial z} \Big|_{out} - e_C D \frac{\partial e_C}{\partial z} \Big|_{in} \\ & + e_L D \frac{\partial e_L}{\partial z} \Big|_{out} - e_L D \frac{\partial e_L}{\partial z} \Big|_{in} \\ & + \frac{1}{\gamma} (C_{out} - Ref_{out}) \dot{C}_{out} \\ & - \theta (L_{out} - Ref_{out}) \\ & \left. - \tilde{k}_2 \langle e_C, e_L \rangle - \tilde{k}_3 \langle e_C, e_L \rangle \right) \quad (IV.35) \end{aligned}$$

were w is a tuning parameter with a small positive value. Note that both version of the control law are identical for $\dot{C}_{in} = 0$.

IV.3 Results and Discussion

Numerical simulation of the control algorithm applied to the system has been performed by using a sequencing algorithm with a 100 node mesh for a 1 meter reactor (Renou *et al.*, 2000c). In this algorithm, convection, dispersion and reaction phenomena are considered successively for each time step. Initial parameters of the system are:

$$\begin{aligned} v &= 0.05 \text{ m/min} & k_2 &= 0.03 \text{ 1/min} \\ D &= 0.0005 \text{ m}^2/\text{min} & k_3 &= 0.04 \text{ 1/min} \\ k_1 &= 0.02 \text{ 1/min} & k_4 &= 0.03 \text{ 1/min} \end{aligned}$$

Controller parameters have been chosen to minimize overshoot and oscillatory response. The objective here is to reject disturbances and model parameters variation rather than reference tracking. Simulations are started at steady state for an input

of L and C equals to 1. The tuning parameters are equal to:

$$\epsilon = .1 \quad \theta = .05 \quad \gamma = 100 \quad (IV.36)$$

$$a = 2 \quad b = 2 \quad c = 2 \quad d = 2$$

$$Ref_{out} = 0.1745 \text{ g/l} \quad (IV.37)$$

Figure IV.2 shows the response of the system to a L set-point step from 0.17 to 0.20 g/L. The output curves of L and C are smooth and do not present any overshoot as required. A perfect match between the model and system is obtained and no variation of adaptation parameters is observed.

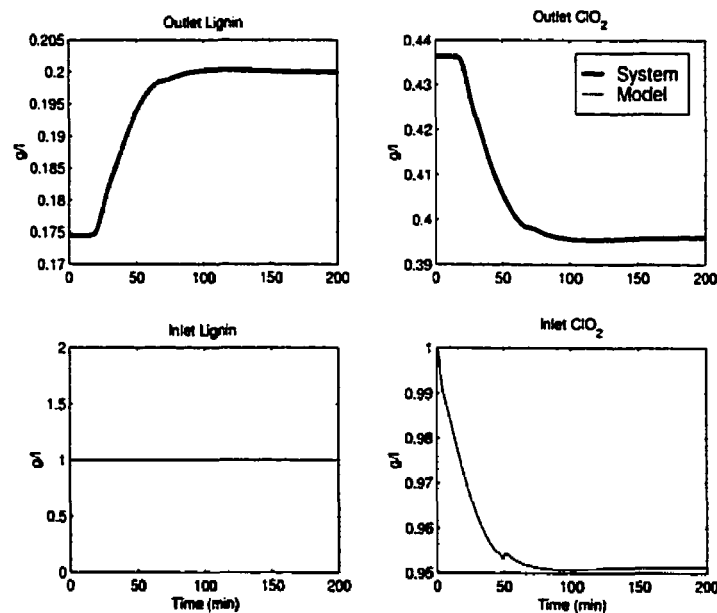


Figure IV.2 Set point change on Ref_{out} .

Figure IV.3 shows the response of the controlled system after a variation of kinetic

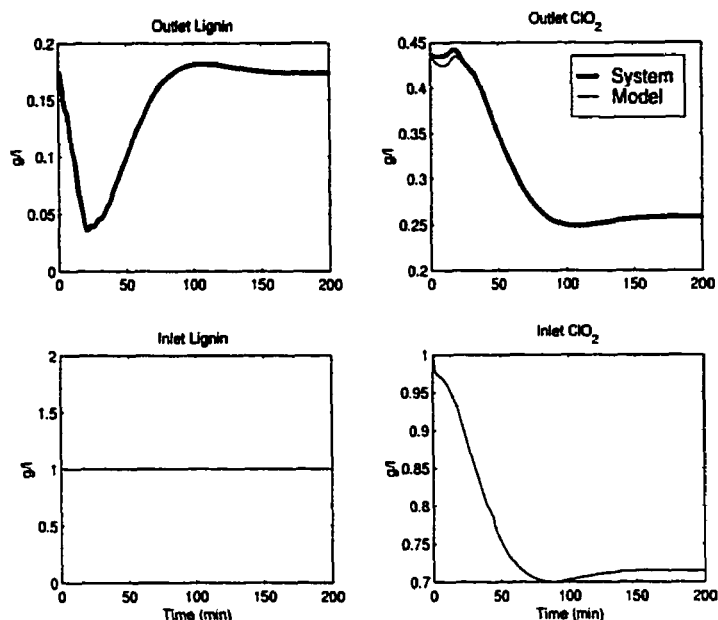


Figure IV.3 Model perturbation.

parameters. The rate constants have been modified to the following values:

$$k_1 = 0.03 \text{ 1/min} \quad k_2 = 0.02 \text{ 1/min}$$

$$k_3 = 0.05 \text{ 1/min} \quad k_4 = 0.04 \text{ 1/min}$$

The adaptation mechanism is oscillatory but rapidly converges to the system values as shown in Figure IV.4. Model and system simulation curves show differences for a shorter time than the adaptation mechanism. This situation suggests some oscillations between multiple possible choices for parameter convergence. Output L admits an important deviation but returns to set point without steady state error. This behavior can be explained by the slow output reference adaptation mechanism used. But in practice, rate constants are not changing so aggressively, thus the simulated case can be considered as a worst case situation.

Figure IV.5 shows the response of the system to a set point step change combined

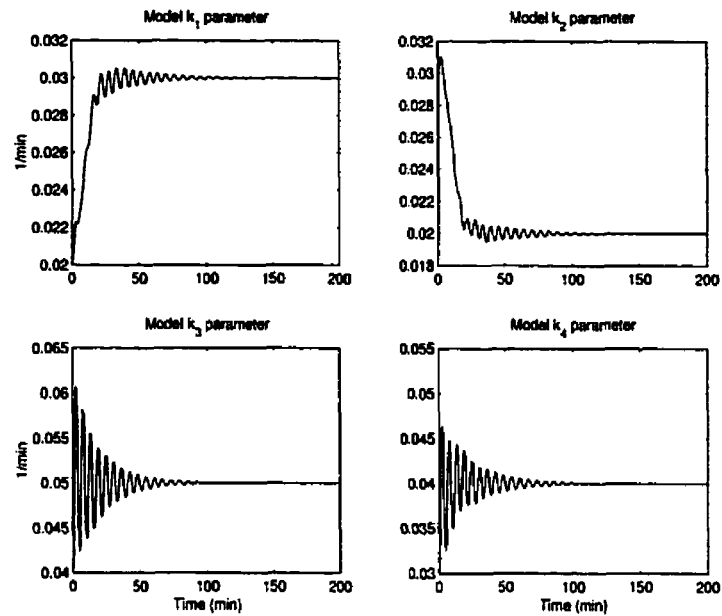


Figure IV.4 Parameters adaptation.

to variation of kinetic parameters. The parameter adaptation curves are similar to those observed in Figure IV.4 and are not reproduced here. This indicates that the adaptation mechanism is a function of the error between the model and the system instead of the characteristics of the input. Figure IV.6 shows the effect of adding noise to the input L for the same conditions of previous simulation. The convergence around the set point and adaptation mechanism are again similar to the previous case but the variation of L affects directly the output and is not rejected efficiently.

IV.4 Conclusion

An adaptive model reference controller has been presented for a distributed parameter system with input boundary control and output boundary reference. This

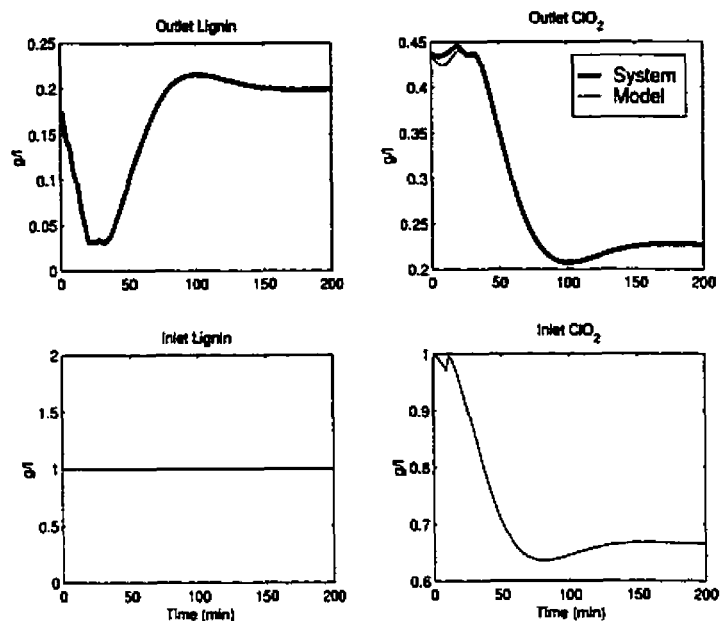


Figure IV.5 Set point change and model perturbation.

algorithm includes a PDE model reference, an adaptation law and a reference modification law. Simulations have shown a good set-point step response and efficient parameter tracking. Response to noisy input of the uncontrolled reactant L needs to be improved. This could probably be done by using a feedforward strategy in the reference modification law. Moreover, the nonlinear kinetics case has to be studied to cover a wider class of applications in reactor control field.

IV.5 Acknowledgements

This paper presents research results of the Belgian Programme on Inter-University Poles of Attraction initiated by the Belgian State, Prime Minister's office for Science, Technology and Culture. The scientific responsibility rests with its authors.

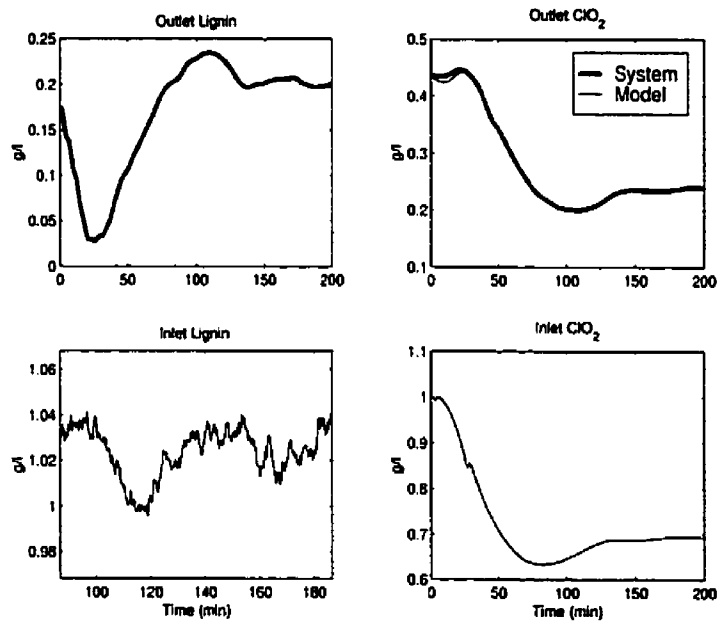


Figure IV.6 Set point change, model perturbation and L_{in} variation.

Annexe V

Nonlinear Control Design for Pulp Bleaching

Control System 2000, PAPTAC, Victoria, mai 2000, p.351-354.

NONLINEAR CONTROL DESIGN FOR PULP BLEACHING

Stéphane Renou, Michel Perrier, Denis Dochain [†]
and Sylvain Gendron [‡]

Département de génie chimique, École Polytechnique de Montréal
C.P. 6079, succ. Centre-ville Montréal, H3C 3A7

[†] Université Catholique de Louvain, Bâtiment Euler
Av. G. Lemaître 4-6, 1348 Louvain-La-Neuve, Belgium

[‡] PAPRICAN, 570 Blvd St-Jean, Pointe-Claire, H9R 3J9

Abstract :

A ClO_2 bleaching reactor is modeled by mass balances leading to a partial differential equations system. Using global differences, an approximate input-output model is obtained and this model is used to design a nonlinear control law. The performance of this control law is compared by simulation to dynamic matrix control (DMC) and to a time-scaled DMC. Results show controllers abilities regarding lignin disturbances, flow variations, model mismatch and set-point variations.

V.1 Introduction

The bleaching process is the last step of pulp preparation. Its purpose is to improve the brightness of the pulp to a specified level which fulfills customers needs. The control objective for a bleaching reactor is then to obtain the desired brightness with a minimum output brightness variance for the lowest chemical cost. Tradi-

tional approaches to this control problem include variations around compensated brightness and scheduling, but increasing computer power and introduction of on-line Kappa analyzer offer new possibilities for model-based control.

Different kinds of models and control approaches have been presented in the literature. Several adaptive control schemes have appeared to account for process variability. Gough and Kay (1994), Rankin and Bialkowski (1984), Dumont et al. (1989) and Gendron et al. (1993) propose different kinds of algorithms to make on-line identification of simple models. Bleaching reactor modeling is discussed in Barrette and Perrier (1995) where they used multiple CSTR and in Wang et al. (1995) who used a combination of CSTR and PFR. Reaction kinetics have also been studied extensively; for instance, Savoie and Tessier (1997) presents kinetics for chlorine dioxide delignification. This approach led to a bleach plant control design presented by Pudlas et al. (1999).

Dumont et al. (1989) reports that using an adaptive scheme instead of auto-tuned PID is not necessarily an overall improvement. The same question can be asked about modeling: Will the use of a more complex model significantly enhance control performance? This paper addresses this problem on the specific case of a ClO_2 bleaching reactor. It considers the design of a controller based on a partial differential equations (PDE) model. Simulation results will be compared to a classical dynamic matrix control (DMC) predictive algorithm which uses input-output knowledge of the system. Furthermore, a modified DMC will be proposed to account for flow variations.

The first section of the reactor presents the PDE model development for a ClO_2 . The second section presents controller designs based on nonlinear approaches and DMC approach. The following section shows main comparative results between predictive and nonlinear algorithms in response to flow variations, step point changes

and model mismatch. Finally some conclusions will be drawn on controller performance.

V.2 PDE modeling

A PDE model for the bleaching reactor can be obtained by mass balances on lignin and ClO_2 over a thin section of the reactor. The following space normalized axial dispersion model can then be obtained:

$$\frac{\partial L(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 L(z, t)}{\partial z^2} - r_L(L, C) \quad (V.1)$$

$$\frac{\partial C(z, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 C(z, t)}{\partial z^2} - r_C(L, C) \quad (V.2)$$

$$\left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{v}{D} (L(0, t) - L_{in}(t)) \quad (V.3)$$

$$\left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{v}{D} (C(0, t) - C_{in}(t)) \quad (V.4)$$

$$\left. \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \right|_{z=1} = \frac{\partial C_{out}}{\partial z} = 0 \quad (V.5)$$

$$\left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \right|_{z=1} = \frac{\partial L_{out}}{\partial z} = 0 \quad (V.6)$$

In this model, reaction kinetic appears explicitly and can be identified by laboratory batch experiments. Hydrodynamic parameters v and D could be determined by tracer analysis on the tower. For the purpose of this study, kinetic data obtain by Savoie et Tessier (1997) where used and hydrodynamic parameters where deduced from Pudlas et al. (1999).

Two models are identified using least squares optimization on the error between data and batch reactor simulation. Identification is performed assuming the fol-

lowing choice of kinetic structure, where exponents are integer:

$$r_L(L, C) = -k_L C^\alpha L^\beta \quad (\text{V.7})$$

$$r_C(L, C) = -k_C C^\alpha L^\beta \quad (\text{V.8})$$

The first kinetic model (r_{L1}, r_{C1}) is obtained by using the whole set of data. The second model (r_{L2}, r_{C2}) is obtained by using Savoie et Tessier (1997) observations on the initial reaction. They proposed a model based on two time scale reactions: a fast reaction occurring at the beginning of the reactor or in static mixers at the reactor inlet and a slow reaction in the tower. To account for those observations, the first point of batch result is omitted for the least squares optimization. Initial variations of concentration are introduced in the boundary conditions at the inlet: -9 kappa for the lignin and -1.3 g/l for ClO_2 . Figure V.1 shows simulations of the batch reactor and corresponding data for the following identified kinetics:

$$r_{L1}(L, C) = -k_{L1} C^2 L^2 = -0.0065 C^2 L^2 \quad (\text{V.9})$$

$$r_{C1}(L, C) = -k_{C1} C^2 L^2 = -0.0010 C^2 L^2 \quad (\text{V.10})$$

$$r_{L2}(L, C) = -k_{L2} CL = -0.035 CL \quad (\text{V.11})$$

$$r_{C2}(L, C) = -k_{C2} CL = -0.006 CL \quad (\text{V.12})$$

Hydrodynamic parameters are deduced from the CSTR-PFR model of Pudlas et al. (1999). They use a CSTR-PFR model in which 25% of volume is a CSTR. Performing tracer simulation with that model and with the axial dispersion model leads to a superficial velocity of $v = 1/30$ and a dispersion coefficient $D = 0.03/30$ for a space-normalized reactor.

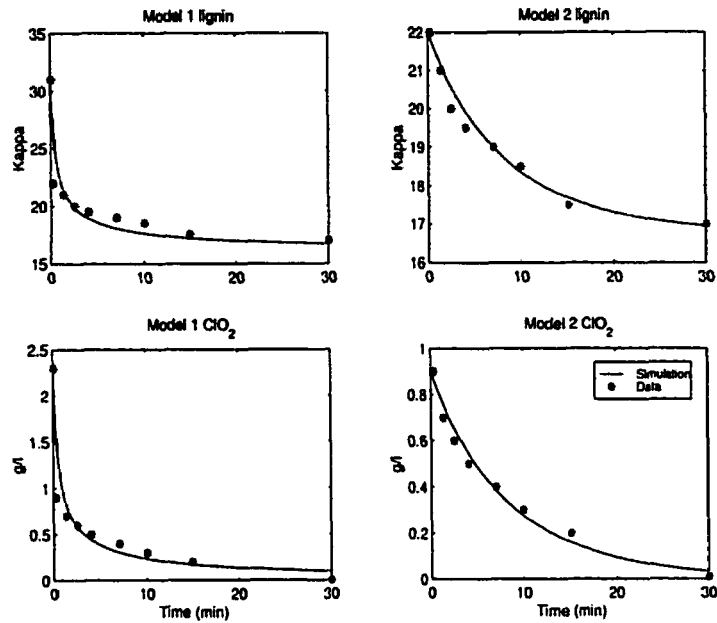


Figure V.1 Model 1 and 2 kinetic analysis

V.3 Control Design

Three controller designs are described in this section. The first one is done using directly the PDE model. The two others designs are based on predictive control strategies using only input-output identification. All controllers are designed using kinetic model 1. The other kinetic model will be used for the model mismatch analysis.

V.3.0.1 Nonlinear Controller

One of the problem with the PDE model described by equations (V.1)-(V.6) is that the control action and the controlled output do not appear explicitly in the

equations. Dochain have proposed in (1994) to use global differences as an approximation for space partial derivatives. This approach introduces ClO_2 input and lignin output in an approximate model. An exact linearization approach can then be considered. The following approximation are used for both species:

$$\left. \frac{\partial L(z, t)}{\partial z} \right|_{z=1} = \frac{L(1, t) - L(0, t)}{\Delta z} = L_{out}(t) - L_{in}(t) \quad (V.13)$$

$$\left. \frac{\partial^2 L(z, t)}{\partial z^2} \right|_{z=1} = \frac{L(2, t) - L(1, t) - L(0, t)}{\Delta z^2} = L_{in}(t) - L_{out}(t) \quad (V.14)$$

To obtain the approximate model, system (V.1)-(V.2) is expressed at the reactor outlet, approximations are introduced and both equations are combined by their kinetic term. These operations give the following result:

$$\begin{aligned} \frac{\partial L_{out}(t)}{\partial t} &= -v(L_{out}(t) - L_{in}(t)) + D(L_{in}(t) - L_{out}(t)) \\ &+ \frac{k_{L1}}{k_{C1}} \left(\frac{\partial C_{out}(t)}{\partial t} + v(C_{out}(t) - C_{in}(t)) \right. \\ &\left. - D(C_{in}(t) - C_{out}(t)) \right) \end{aligned} \quad (V.15)$$

Using a backward finite difference to approximate the ClO_2 time derivative, an input-output relation between ClO_2 input and lignin output can be obtained. Exact linearization principle can be applied on this equation to obtain the following control law in which λ and γ are PI tuning parameters:

$$\begin{aligned} C_{in}(t) &= \frac{1}{v + D} \left(vC_{out}(t) + DC_{out} \right. \\ &+ \frac{C_{out}(t) - C_{out}(t-1)}{\Delta t} + \frac{k_{C1}}{k_{L1}} \left[u \right. \\ &\left. + v(L_{out}(t) - L_{in}(t)) + D(L_{in} - L_{out}) \right] \end{aligned} \quad (V.16)$$

$$u(t) = \lambda \left[(L_{sp} - L_{out}(t)) \right]$$

$$+ \gamma \int_0^t (L_{sp} - L_{out}(t)) dt] \quad (V.17)$$

To insure more robustness to this algorithm, an adaptation mechanism is added for the reaction rate ratio. A model is simulated in parallel with a variable k_{L1} , noted k_A , which is modified according to the error between the adaptation model and the system model on lignin output. This approach is implemented with the following equations:

$$\frac{dk_A}{dt} = -\mu(L_{out}(t) - M_{out}(t)) \quad (V.18)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial M(z, t)}{\partial t} &= -v \frac{\partial M(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 M(z, t)}{\partial z^2} \\ &\quad - k_A(t) M^2 N^2 \end{aligned} \quad (V.19)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial N(z, t)}{\partial t} &= -v \frac{\partial N(z, t)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 N(z, t)}{\partial z^2} \\ &\quad - k_{C1} M^2 N^2 \end{aligned} \quad (V.20)$$

$$\left. \frac{\partial M(z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{v}{D} (M(0, t) - L_{in}(t)) \quad (V.21)$$

$$\left. \frac{\partial N(z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{v}{D} (N(0, t) - C_{in}(t)) \quad (V.22)$$

$$\frac{\partial M_{out}}{\partial z} = 0 \quad (V.23)$$

$$\frac{\partial N_{out}}{\partial z} = 0 \quad (V.24)$$

V.3.0.2 DMC controller

This controller is designed using two dynamic matrices: β_{CL} for ClO_2 input to lignin output response and β_{LL} for lignin input to lignin output response. At each control step, the following criterion is applied:

$$\min_{\Delta u(k)} \phi = [e(k+1) - \beta_{CL} + K^2 \Delta u(k)^T \Delta u(k)^T]^T$$

$$[e(k+1) - \beta_{CL} + K^2 \Delta u(k)^T \Delta u(k)^T] \quad (\text{V.25})$$

The prediction error takes in account the input lignin perturbations such as:

$$\begin{aligned} e(k+1) &\equiv y^*(k+1) \\ &- [\hat{y}^0(k) + w(k+1) + \beta_{LL} \Delta L(k)] \end{aligned} \quad (\text{V.26})$$

In the preceding equation, y^* is the set point, \hat{y}^0 is the prediction if no further control action is taken, w is the estimation of disturbance and ΔL is the variation of lignin at the inlet.

V.3.0.3 Time-scaled DMC

Traditional DMC is sensitive to flow rate variations since they represent, in fact, a variation of dead-time from an input-output point of view. To overcome this problem efficiently, information about the flow rate have to be transmitted to the controller. To fulfill this goal, the prediction time span is scaled by the variation of flow rate. Thus, the Δt between each calculation of the control action is scaled by the ratio between the new flow rate and the old flow rate. Practically this approach can be implemented by using an over sampling or interpolating dynamic matrices and prediction.

V.4 Simulation Results

Simulations are performed using the sequencing algorithm (2000c) using a 100 node mesh. Nonlinear controller design parameters are: $\lambda = -0.05$, $\gamma = 0.02$ and $\mu = 0.00002$. DMC tuning parameter are conservative to limit oscillations. In both cases, the prediction horizon is equal to the unit step response dimension, and control horizon is set to 1. The penalty on the control action K is 600 in the case of the DMC and 200 in the case of the time scaled DMC. All controllers are designed using the kinetic model 1. All simulations are performed with kinetic model 1 except for results presented in Figure 5, where kinetic model 2 have been used.

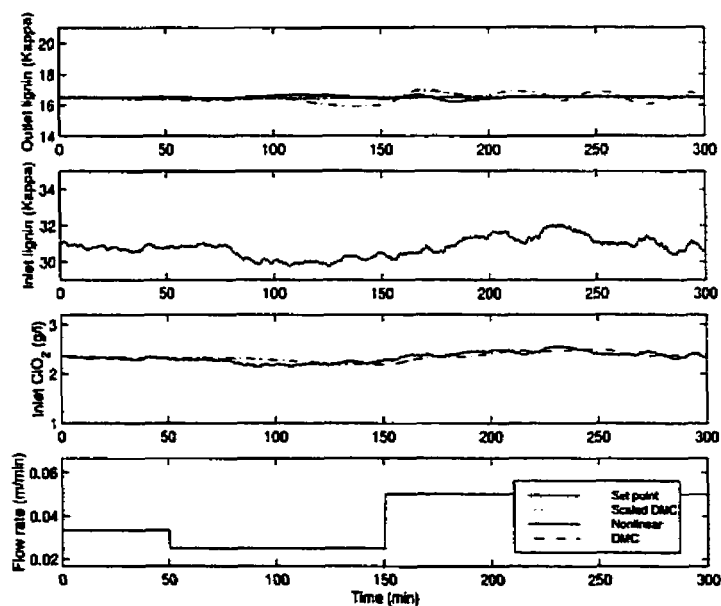


Figure V.2 Effect of flow rate variation

Figure V.2 shows the effect of a flow rate variation for each controller. It shows that the nonlinear controller and the time scaled DMC can maintain the set point.

However the DMC has an oscillatory behavior. Those oscillations could be withdrawn by increasing the penalty on the control action but this will be at the cost of reducing the feedforward impact of β_{LL} . The smoother inlet ClO_2 for DMC shows the actual reduction of feedforward information for the chosen tuning. This tradeoff can be reduced by using time scaled DMC as shown by the lower K value used in this case.

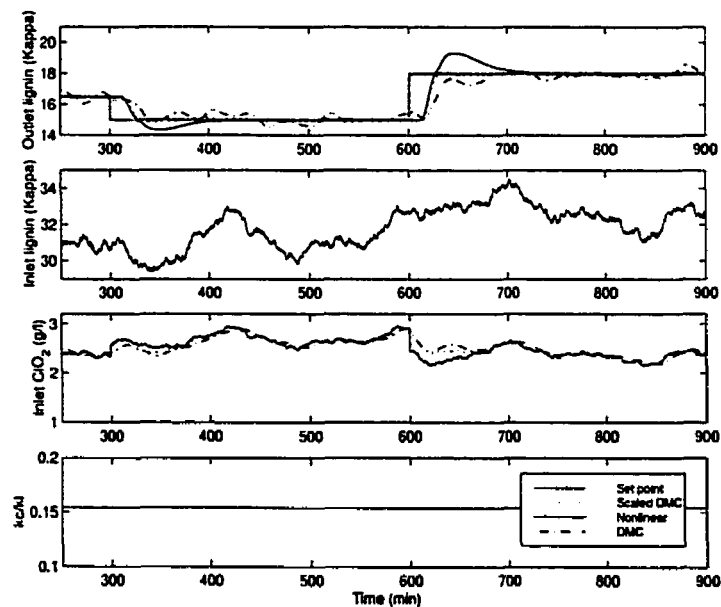


Figure V.3 Effect of set-point variation

Figure V.3 shows the response to set point changes for each controller when the flow rate is maintained at 150% of its nominal value. Once again, DMC control oscillates and is perturbed by variation of inlet lignin. The nonlinear controller has an important overshoot which is dependent of the amplitude of the set-point change. This overshoot can be reduced by using a less aggressive tuning but at the cost of reaching the set point more slowly. The time scaled DMC shows an ideal response reaching directly the set point. A zoom around the set point reveals that

this controller is more influenced by lignin variations than the nonlinear controller when the set point is reached. This could be explain by the penalty factor on control action, once again.

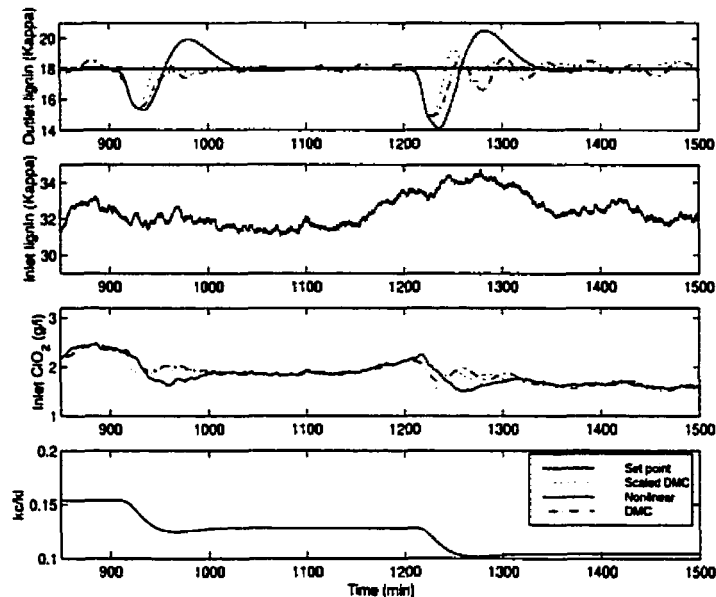


Figure V.4 Effect of variation of kinetic rate

Figure V.4 shows response to rate constant variations keeping the operating conditions prevailing at the end of the preceding simulation. At 900 minutes k_{L1} is increased to 120% of its nominal value and at 1200 minutes k_{C1} is decreased to 80% of its nominal value. These variations are applied uniformly on the whole reactor. For all controllers, an important deviation toward lower kappa values is notice. This behavior is caused by the dead-time of the reactor. Nonlinear control causes an important overshoot toward high kappa before the set point is reached again. This may be explained by the integral action inserted in the control law. Both DMC-based controller do not exhibit this behavior but both oscillate after the second perturbation. In fact, DMC controllers will oscillate when successive

events push the system far away from the model which have been used for identification. The nonlinear controller can be more accurate since the adaptation loop adjust continuously the model.

Figure V.5 shows response to set point changes for each controller when the kinetic

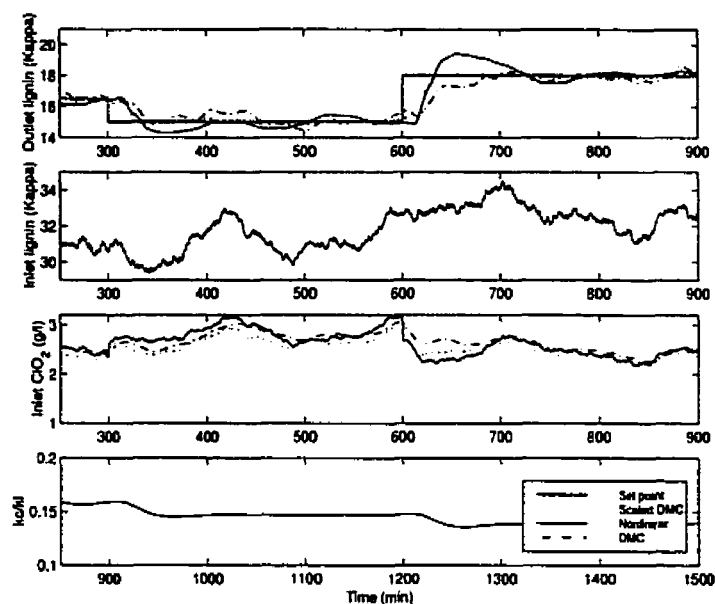


Figure V.5 Effect of kinetic structure

structure of the system mismatch the kinetic structure used for controllers design. This simulation shows limitation for the nonlinear controller which deviates more from the set-point compare to the time scaled DMC. This shows the importance of a good identification of the structure of the reaction kinetics. If the rate constant could be estimated by adaptive techniques, the structure of the reaction kinetic can not be changed on-line easily.

V.5 Conclusion

A comparative study between different control strategies has been made for a bleaching tower. A nonlinear controller based on mass balance model has been proposed and compared to DMC and time-scaled DMC. Results show better feedforward behavior of the nonlinear controller but DMC approaches show better performances in the case of model mismatch. The time scaled DMC approach account well for flow rate variation, but it can shows oscillatory behavior as traditional DMC if the operating conditions deviate enough from model identification conditions. The nonlinear controller shows better reduction of lignin input variability since its feedforward capacities are not affected by a penalty on control action as DMC.