

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE



Département d'Automatique

Projet de fin d'études

Pour l'obtention du diplôme

D'Ingénieur d'Etat en Automatique

THÈME

**COMMANDE LINEARISANTE
APPLIQUEE AU REACTEUR
CHIMIQUE CSTR**

Présenté par : Djemai Hakim

Dirigé par : Dr R. ILLOUL

Juin 2015

Ecole Nationale Polytechnique : 10, Avenue Hassen Badi BP182 El-Harrach

Commande linearisante appliquée au réacteur chimique continu parfaitement agité

Résumé :

L'objectif de ce travail est d'utiliser des méthodologies et des outils de la théorie de la commande linéarisante dans la conception des lois de commande linéaire pour stabiliser la température d'une certaine classe de réacteurs : réacteur continu parfaitement agité CSTR, avec des réactions exothermiques. L'avantage de l'application de ce type de lois de commande ; est l'utilisation unique des mesures disponibles, et plus précisément les mesures de la concentration et de la température dans notre travail. La stabilité globale du système est garantie avec le théorème de Lyapunov en exigeant la connaissance précise des paramètres du système.

Mot clefs : Réacteurs chimiques CSTR, commande linearisante.

linear control of continuous stirred tank reactors

Abstract:

The objective of this work is to make use of methodologies and tools from linear control theory in the design of linear control laws for the temperature stabilization of a class of continuous stirred tank reactors with exothermic reactions. Simple output feedback control laws, i.e. control laws that feedback only the available measurements, are designed. It is shown that these controllers yield global stability and require precise knowledge of the system parameters.

Keywords: Chemical reactors CSTR, linearizing control.

إدارة تحكم خطي لمفاعل كيميائي من نوع مستمر.

ملخص:

الهدف من هذا العمل هو الاستفادة من المنهجيات و الأدوات لنظرية التحكم الخطي في تصميم قوانين مراقبة خطية لتثبيت درجة الحرارة من فئة المفاعلات المستمرة , مع التفاعلات الطاردة للحرارة , هذه القوانين لمراقبة ردود الفعل تتطلب فقط القياسات المتوفرة , فقد تم تصميم و توضيح أن هذه الوحدات للتحكم تحقق الاستقرار و لا تتطلب معرفة دقيقة لمعالم النظام.

الكلمات الرئيسية :

مفاعلات كيميائية، إدارة تحكم خطي.

Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

A mes chers parents, ma petite et grande famille

A mon frère

A mes sœurs

A tous ceux qui m'aiment et que j'aime

A tous ceux qui ont contribué de près ou de loin a la réussite de ce travail.

A vous.

Remerciements

Je remercie avant tout Dieu, le tout puissant, pour m'avoir donné le courage, la patience, la volonté et la force nécessaire, pour affronter toutes les difficultés et les obstacles qui se sont hissés au travers de mon chemin, tout au long de ce travail.

Je remercie particulièrement mon promoteur Mr R. ILLOUL pour m'avoir encadré, mais également formé et motivé et qui m'a assuré les précieux conseils tout au long de ce projet. Il trouvera ici ma gratitude et ma reconnaissance profondes.

Mes remerciements vont aussi à Messieurs les membres du jury pour avoir accepté d'évaluer mon travail.

Je tiens à remercier l'ensemble de mes enseignants à l'ENP

Je remercie enfin surtout ma famille, pour avoir supporté et accepté mes choix,

SOMMAIRE

Listes des tableaux et figures.....	vii
Liste des abréviations	ix
Introduction générale.....	1

CHAPITRE I : Généralités sur les réacteurs chimiques

I.1 Introduction aux réacteurs chimiques	4
I.2 Classements des réactions chimiques	5
I.2.1 Le nombre et la nature des phases en présence	5
I.2.2 La stœchiométrie	5
I.2.3 L'avancement à l'équilibre	6
I.2.4 La sensibilité aux conditions physiques	6
I.2.5 Effets thermiques	6
I.3 Classements des réacteurs chimiques	6
I.3.1 Circulation du mélange réactionnel	6
I.3.1.1 Réacteurs fermées (RF), (BATCH).....	6
I.3.1.2 Réacteurs semi fermées (RSF), (FED BATCH)	7
I.3.1.3 Réacteurs ouverts (RO).....	8
I.3.2 Intervention de la variable temps	11
I.3.3 Degrés de mélangeage des substances en réaction à l'intérieur du réacteur	12
I.3.4 Principales caractéristiques de fonctionnement	12
I.4 Problèmes général du calcul d'un réacteur	13
I.5 Notions de réacteur idéal	14
I.6 Classes des réacteurs chimiques	14
I.7 Comparaison des divers types de réacteurs.....	15
I.8 Conclusion	17

CHAPITRE II : Modélisation des réacteurs chimiques

II.1 Introduction.....	19
II.2 Modèles des réacteurs chimiques	19
II.2.1 Modèles empiriques	19
II.2.2 Modèles phénoménologiques	20
II.3 Notions de thermochimie.....	21
II.3.1 Premier principe de la thermodynamique	22
II.3.2 Aspect thermique des réactions chimiques	24
II.3.2.a Réactions exothermiques	24
II.3.2.b Réactions endothermiques	25
II.4 Vitesse et mécanismes des réactions	25
II.4.1 Cinétique des réactions élémentaires	26
II.4.2 Influence de la température : loi d'Arrhenius	28
II.5 Transfert de chaleur	29
II.5.1 Transfert par conduction.....	29
II.5.1.a Loi de Fourier	29
II.5.2 Transfert par convection	31
II.5.3 Transfert par rayonnement.....	32
II.6 Modélisations des réacteurs chimiques continus	32
II.6.1 Modélisation du réacteur parfaitement mélangé (CSTR)	32
II.6.1.a Bilan de matière	34
II.6.1.b Bilan d'énergie	35
II.6.2 Modélisation du réacteur tubulaire (PFTR)	37
II.7 Simulation du réacteur parfaitement mélangé en boucle ouverte.....	40
II.7.1 Commentaires	45
II.8 Profils d'équilibre	45
II.9 Conclusion	47

CHAPITRE III : Commande linéarisante appliqué au réacteur chimique continue parfaitement agité.

III.1 Introduction et notions de base.....	49
III.1.1 Définitions	49
III.1.2 Degré relatif.....	50

III.2 Linéarisation exacte par Feedback	51
III.2.1 Linéarisation Exacte entrée sortie.....	51
III.3 Linéarisation Approximative par Feedback	52
III.3.1 Linéarisation par le jacobien	53
III.3.2 Algorithme de Hunt, cas des systèmes SISO	53
III.4 Application de la linéarisation exacte sur le modèle CSTR	55
III.5 Application de la linéarisation approximative sur le modèle CSTR	56
III.6 Conclusion.....	57

CHAPITRE IV : Résultats de simulation

IV.1 Introduction.....	59
IV.2 Résultats de simulation pour la linéarisation par feedback	59
IV.2.2 Réponse aux perturbations	63
IV.3 Résultats de simulation pour la linéarisation approximative.....	65
IV.4 Conclusion.....	69
CONCLUSION GENERALE	71
Annexe	72
Références bibliographiques	73

LISTE DES TABLEAUX

Tableau (1.1) - Exemple de classes de réacteurs	15
---	----

LISTE DES FIGURES

Figure(1.1) - Réacteur chimique sous son aspect réel	4
Figure (1.2) - Schéma général descriptif d'un réacteur chimique	4
Figure (1.3) - Schéma d'un réacteur chimique fermé	7
Figure (1.4) - Schéma d'un réacteur chimique Fed Batch.	8
Figure (1.5) - Schéma général d'un réacteur parfaitement agité (CSTR).....	9
Figure (1.6) - Schéma général d'un réacteur tubulaire (PFTR)	9
Figure (1.7) - Domaines d'utilisation des quatre principaux types de réacteurs	16
Figure (2.1) - Représentation bloc d'un système.....	20
Figure (2.2) - Conduction à travers un mur	30
Figure (2.3) - Schéma d'un réacteur continu parfaitement mélangé (CSTR).....	32
Figure (2.4) - Schémas des réacteurs chauffés avec chemise et par des bobines	33
Figure (2.5) - Schéma d'un réacteur tubulaire (PFTR)	37
Figure (2.6) - Tranche infinitésimale d'un réacteur tubulaire	37
Figure (2.7) - Profils de température et concentrations, cas du refroidissement.	41
Figure (2.8) - Profils de température et concentrations, cas du chauffage	42
Figure (2.9) - Profils de température et concentrations, cas du taux nul	43
Figure (2.10) – Profils de température et concentrations, cas du chauffage avec perturbation sur la commande	44
Figure (2.11) - Profil d'équilibre de la concentration du produit d'intérêt	46
Figure (4.1) – Profils de température, cas $r=400$ K.....	59
Figure (4.2) - Profils de concentration, cas $r=400$ K	59
Figure (4.3) – Profils de commande, cas $r=400$ K	60
Figure (4.4) – Profils de l'erreur de poursuite en température, cas $r=400$ K.....	60

Figure (4.5) – Profils de température, cas $r=440$ K.....	61
Figure (4.6) – Profils de concentration, cas $r=440$ K.....	61
Figure (4.7) – Profils de commande, cas $r=440$ K	62
Figure (4.8) – Profils de l’erreur de poursuite en température, cas $r=440$ K.....	62
Figure (4.9) – Profils de température, cas $r=400$ K. Avec perturbation sur la commande	63
Figure (4.10) – Profils de concentration, cas $r=400$ K. Avec perturbation sur la commande.	63
Figure (4.11) – Profils de commande, cas $r=400$ K. Avec perturbation sur la commande.....	64
Figure (4.12) – Profils de poursuite en Température, cas $r=400$ K. Avec perturbation sur la commande.....	64
Figure (4.13) – Profil de concentration, le point de fonctionnement P_1	65
Figure (4.14) – Profil de température, le point de fonctionnement P_1	65
Figure (4.15) – Profil de la commande, le point de fonctionnement P_1	66
Figure (4.16) – Profil de l’erreur de poursuite en température, le point de fonctionnement P_1	66
Figure (4.17) – Profil de concentration, le point de fonctionnement P_2	67
Figure (4.18) – Profil de Température, le point de fonctionnement P_2	67
Figure (4.19) – Profil de commande, le point de fonctionnement P_2	68
Figure (4.20) – Profil de l’erreur de poursuite en Température, le point de fonctionnement P_2	68

LISTE DES ABREVIATIONS

Abréviation	Signification	Unité
U	Energie interne	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
W	Travail	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
Q	Chaleur	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
P	Pression	Pascal
H	Enthalpie	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
T	Temps	h
m	Masse	kg
C_p	Chaleur spécifique moyenne	$\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
T	Température	K
T_{in}	Température d'entrée	K
(T_c) T_j	Température de la chemise	K
V	Volume du réacteur	l
ρ	Masse volumique	$\text{kg}\cdot\text{l}^{-1}$
v	Vitesse de réaction	$\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$
\mathcal{R}	Taux de génération	$\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$
k₀	Facteur pré-exponentiel	dépend de la réaction
E₀	Energie d'activation	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
R	Constante des gaz parfaits	$\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
C_{A0}	Concentration d'alimentation	$\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}$
[A]	Concentration du produit A	$\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}$
$\pi(T)$	Profil d'équilibre	$\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}$
n	Nombre de moles	mol
A_r	Surface d'échange	m^2
k_w	Coefficient spécifique à la paroi	$\text{kJ}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$
d	Diamètre	m
F	Débit du fluide	$\text{l}\cdot\text{h}^{-1}$
D	Taux de dilution	h^{-1}
u	Commande	$\text{K}\cdot\text{h}^{-1}$

INTRODUCTION

GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

Les trois objectifs principaux de la commande de procédés sont d'assurer la sécurité, la stabilité et la performance économique des procédés. Généralement, l'utilisation de modèles dynamiques constitue l'instrument de base à la conception de régulateurs qui réalisent ces trois objectifs. Bien qu'il soit possible de construire des modèles fiables des systèmes chimiques à partir des bilans de masse et d'énergie, la difficulté principale ne réside pas dans la structure des modèles mais dans la fiabilité des paramètres de ces derniers. Les paramètres des cinétiques de réactions chimiques et biochimiques sont des exemples typiques de paramètres incertains et difficiles à obtenir *a priori*.

D'autre part, il est clair que la commande des réacteurs constitue la composante centrale de la commande des procédés chimiques. En plus de l'incertitude sur les paramètres, la commande des réacteurs chimiques est une tâche ardue, particulièrement en raison des non-linéarités inhérentes à ce type d'unités.

L'objectif de notre travail est l'application de la théorie de la commande linéarisante à un réacteur chimique continu parfaitement agité. La stratégie de commande utilisée est une recherche d'une commande qui a pour objectif d'amener le système non linéaire à un système linéaire.

Dans cette optique, nous allons diviser notre travail en quatre chapitres :

- Le premier chapitre sera consacré à des généralités sur les réacteurs chimiques, nous évoquerons les différents types de réacteurs, leur classification ainsi qu'une comparaison entre les principaux types.
- Le deuxième chapitre abordera la modélisation des procédés chimiques. Nous évoquerons les différents phénomènes physiques et lois thermodynamiques qui permettent d'établir les modèles dynamiques des réacteurs chimiques les plus fréquemment utilisés. Des simulations numériques en boucle ouverte du réacteur continu parfaitement agité seront effectuées afin de montrer l'intérêt d'application d'une commande linéarisante.

- Le troisième chapitre sera consacré à des notions générales sur la commande linéarisante, et son intérêt sur les systèmes non linéaires.
- Le quatrième chapitre sera constitué de simulations sur la réaction. Ces différentes simulations, nous aideront à mieux cerner les avantages de la commande linéarisante.

Chapitre I

GÉNÉRALITÉS SUR LES RÉACTEURS CHIMIQUES

I.1 Introduction aux réacteurs chimiques :

Un réacteur industriel est un appareil permettant d'accomplir une transformation chimique ou biochimique pour convertir des constituants moléculaires en d'autres constituants. Cependant, cette notion est limitée aux cas où la transformation est effectuée dans l'objectif de produire une ou plusieurs espèces chimiques prédéfinies. Dans une installation industrielle un " réacteur chimique" est généralement associé à un ensemble de composants industriels (exemple: des pompes, des vannes, des réservoirs, des échangeurs de chaleur, des chaudières, etc.), ces composants placés en amont et en aval, permettent les traitements physiques des réactifs et des produits des réactions en cours.

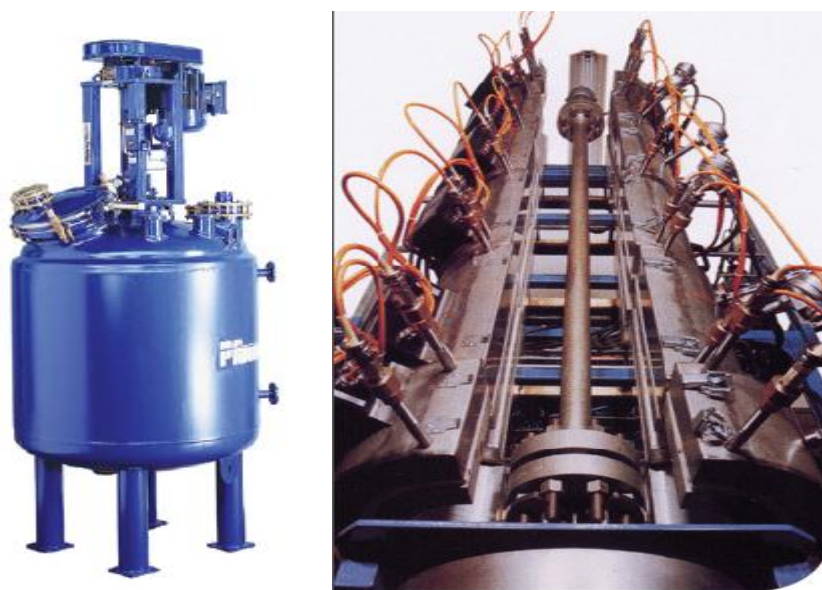


Figure (1.1) : Réacteur chimique sous son aspect réel

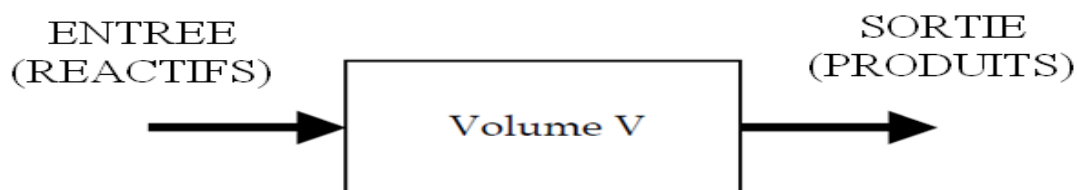


Figure (1.2) : Schéma général descriptif d'un réacteur chimique

Classification et caractéristiques des réacteurs chimiques:

Un réacteur chimique est un appareil dans lequel on met en œuvre une transformation chimique, soit pour l'étudier, soit pour l'utiliser à la production de substances nouvelles, le choix d'un type de réacteur est lié à la nature de la ou des réactions qu'on désire y produire, il est donc assez indiqué de commencer par un classement des réactions chimiques.

I. 2 classements des réactions chimiques :

Sans entrer dans le détail, pour une transformation chimique, les principales caractéristiques à retenir sont :

I.2. 1 le nombre et la nature des phases en présence :

- Réactions homogènes à une phase liquide ou gazeuse.
- Réactions hétérogènes à deux phases :

Gaz – liquide

Gaz –solide

Solide-liquide

Liquide-liquide

A trois phases ou plus

I.2.2 la stœchiométrie :

La stœchiométrie permet de déterminer les proportions suivant lesquelles les éléments réagissent les uns sur les autres elle se traduit par l'écriture d'équations de réactions chimiques qui indiquent combien de moles de réactifs disparaissent lorsqu'un nombre donné de produits sont formées, ces équations ne traduisent donc que des bilans de matière et non pas des mécanismes réactionnels.

- Réactions a stœchiométrie unique, dont l'évolution peut être décrite par un seul paramètre d'avancement qu'il s'agit en général de rendre le plus grand possible au moindre cout.

- Réactions à stœchiométrie multiple (successives, parallèle, mixte...) ou l'on cherche le plus souvent une sélectivité maximale favorisant la formation d'un produit particulier.

I.2.3 l'avancement à l'équilibre :

- Réactions équilibrées (dans les conditions opératoires)
- Réactions totales (dans les conditions opératoires)

I.2.4 la sensibilité aux conditions physiques :

- Réactions dont l'avancement est principalement déterminé par des facteurs chimiques (constatation, nature des catalyseurs)
- Réactions dont l'avancement dépend essentiellement au contraire des facteurs physiques :(vitesse de transfert de matière, de chaleur ...), ce dernier facteur peut être fortement thermique.

I.2.5 effets thermiques :

- Athermique ($\Delta H=0$)
- Endothermique ($\Delta H \geq 0$)
- Exothermique ($\Delta H \leq 0$)

I.3 classements des réacteurs chimiques :

Plusieurs points de vue sont également possibles suivant les critères retenus.

Les principaux critères sont la circulation du mélange réactionnel, l'évolution dans le temps, le degré de mélangeage des substances en réaction et le mode de mise en contact des phases.

I.3.1 circulation du mélange réactionnel :

I.3.1.1 Réacteurs fermés (RF), (BATCH) :

Le réacteur reçoit une charge initiale de réactifs. Pendant la réaction, il n'y a pas d'échange de matière avec l'extérieur, les produits sont extraits en fin d'opération le fonctionnement est nécessairement discontinu.

Pour ce type de réacteurs la spécificité est que les constituants réactifs sont chargés au début de l'opération dans la cuve du réacteur. Une fois la transformation chimique accomplie, le mélange est ensuite soutiré. Pendant le temps où se déroule la réaction, il n'y a pas de flux de matière entrant ou sortant du réacteur.

Les hypothèses liées au modèle du réacteur discontinu sont les suivantes :

- Mélange homogène au niveau moléculaire.
- Température homogène du milieu.
- Volume constant (débit d'entrée et débit de sortie nuls).

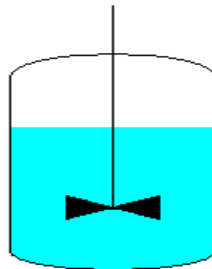


Figure (1.3) : Schéma d'un réacteur chimique fermé.

Avantages:

- Installation simple et offrant une très grande polyvalence.
- Permet des réactions nécessitant des variations de conditions opératoires (notamment le changement de température).

Désavantages:

- Travaille à des concentrations de réactifs élevées au début de la réaction (problème de sécurité, moins bonne conversion en cas d'inhibition par le substrat).
- Nécessite un temps mort entre chaque opération (remplissage, vidange, nettoyage) qui nuit à la performance.

I. 3. 1.2 Réacteurs semi fermés (RSF), (FED BATCH) :

Il y a des échanges de matière avec l'extérieur en cours de réaction, mais il existe au moins un constituant qui n'est ni apporté, ni extrait en cours de réaction.

À l'instar des réacteurs fermés, pour ce type de réacteurs le déchargement des produits se fait là encore à la fin de l'opération. Seulement, les constituants réactifs sont introduits tout au long de la transformation chimique.

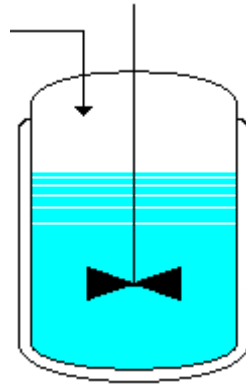


Figure (1.4) : Schéma d'un réacteur chimique Fed Batch.

Les principales hypothèses du modèle sont:

- Mélange homogène au niveau moléculaire.
- Température homogène du milieu.

Avantages:

- Permet un contrôle de la concentration (meilleure sécurité).
- Permet des réactions nécessitant des variations de conditions opératoires (notamment le changement de la concentration des réactifs).
- Meilleure conversion en cas d'inhibition par le substrat.
- Permet d'atteindre de très hautes densités cellulaires en biotechnologie.

Désavantages:

- Nécessite un excellent contrôle du flux d'entrée (danger d'accumulation des réactifs).
- Nécessite un temps mort entre chaque opération (remplissage, vidange, nettoyage) qui nuit à la performance.

I. 3.1.3 Réacteurs ouverts (RO) :

Tous les réactifs sont amenés dans le réacteur et tous les produits sont extraits par des courants de matière.

Concernant les réacteurs continus considérés comme des systèmes ouverts, et à la différence des réacteurs fermés et semi continus, le chargement des constituants réactifs et le déchargement du mélange se font en parallèle durant la transformation chimique.

Pour ce type de réacteurs se manifeste un écoulement interne sous diverses formes, qui dépendent de la structure interne du réacteur et des propriétés physiques du mélange réactionnel. Dans ce sens, il est donc indispensable de définir les types d'écoulements pour définir et classer les cas rencontrés, d'où l'intérêt de faire la différence entre ces modes d'écoulements pour attribuer à chaque type de réacteurs continus ces caractéristiques qui le différencient par rapport aux autres. A cet effet, il existe deux principaux types de réacteurs :

- Réacteurs continus parfaitement agités (CSTR : Continuous Stirred Tank Reactors).
- Réacteurs tubulaires (PFTR : Plug-Flow Tubular Reactor).

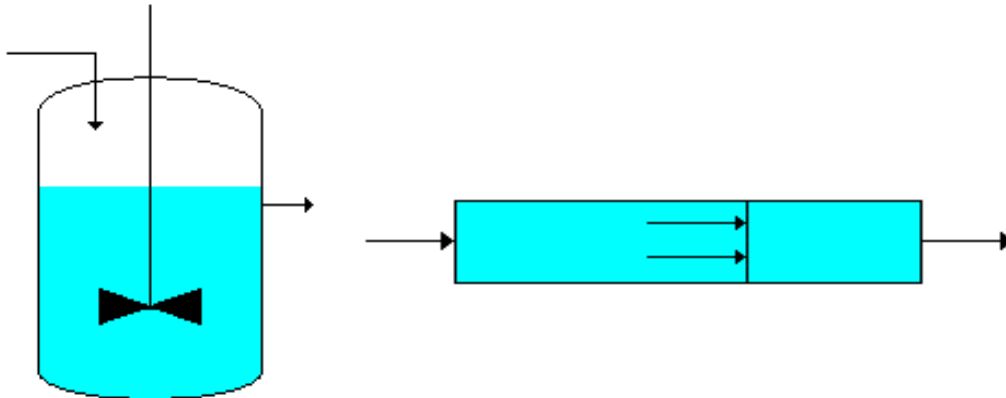


Figure (1.6) : Schéma général d'un réacteur tubulaire (PFTR)

Figure (1.5) : Schéma général d'un réacteur parfaitement agité (CSTR)

- **Réacteurs continus parfaitement agités :**

L'écoulement du mélange réactionnel se fait dans une cuve où le mélange réactionnel est considéré parfaitement agité. Ainsi, les concentrations des constituants réactifs entrant sont différentes de celles du milieu réactionnel qui a une composition identique à celle du flux sortant du réacteur. Ceci dit, à l'entrée du réacteur on a donc une discontinuité des concentrations des constituants réactifs dans le flux entrant, alors que dans l'ensemble du milieu réactionnel les concentrations des divers constituants sont uniformes. Ces réacteurs sont désignés en anglais par l'appellation CSTR (Continuous Stirred Tank Reactors).

Les hypothèses liées au modèle du réacteur continu sont les suivantes :

- Mélange homogène au niveau moléculaire.
- Température homogène du milieu.
- Volume et densité constants (débit d'entrée = débit de sortie).
- Concentrations et température du flux de sortie sont les mêmes que celles dans le réacteur.

Avantages:

- Peu de variation dans la qualité d'un produit sur une longue période de temps.
- Haute performance.
- Bon pour des études cinétiques.
- Travaille à de faibles concentrations de réactifs (meilleure sécurité, meilleure conversion pour des ordres de réactions inférieurs à 1 ou en cas d'inhibition par le substrat).

Désavantages:

- Moins bonne conversion pour des ordres de réactions supérieurs à 1 ou en cas d'inhibition par le produit.
- Nécessite un excellent contrôle des flux (entrée et sortie).
- Ne permet pas de réactions nécessitant des variations de conditions opératoires.

- **Réacteurs tubulaires :**

L'écoulement est de type piston (régime laminaire) avec un flux de matière qui se déplace avec une vitesse désignée dans un tube. Dans ce cas, les constituants se déplacent en se transformant progressivement le long du réacteur. C'est ainsi que ce type de réacteur est parfois qualifié de réacteur à gradient de concentrations. Ainsi, les concentrations de chaque espèce chimique (réactifs, produits) dépendent du temps et de l'espace.

Les hypothèses liées au modèle du réacteur piston sont les suivantes:

- le mélange radial est considéré comme parfait.
- l'écoulement est de type piston.
- la densité constante.
- pas de mélange axial.

Avantages:

- Peu de variation dans la qualité d'un produit sur une longue période de temps.
- Haute performance.

Désavantages:

- Nécessite un excellent contrôle des flux (entrée et sortie).

Dans ces réacteurs continus, l'écoulement du mélange se déroule d'une façon plus complexe, ceci dit il existe un temps de séjour du mélange qui représente le temps de rétention d'une molécule entre son entrée et sa sortie. Ainsi, les modèles des réacteurs continus déjà cités sont à vrai dire idéaux.

I.3 .2 : intervention de la variable temps :

- **Réacteurs en régime transitoire ou fonctionnement discontinue :**

Il existe au moins un paramètre de fonctionnement (composition, débit...) qui est fonction du temps, les réacteurs fermés et semi fermés fonctionnent obligatoirement en régime transitoire ou discontinue.

Réacteurs en régime permanent : ce régime ne s'applique qu'aux réacteurs ouverts. Tous les paramètres sont stationnaires, la variable temps disparaît. On dit aussi que le réacteur fonctionne en continu, c'est évidemment le régime le plus intéressant dans la pratique industrielle.

I.3.3 degrés de mélangeage des substances en réaction à l'intérieur du réacteur :

Un dernier critère de classement repose sur la nature de l'écoulement et le degré de mélangeage des réactifs et des produits au cours de la réaction. Nous verrons que ce dernier facteur peut avoir une grande influence sur les degrés d'avancement et la conversion chimique.

Deux cas limites sont constitués par :

- **le réacteur parfaitement agité :**

La conséquence de l'agitation est que la composition du mélange réactionnel est constante en tous points du réacteur à un instant donné. Le réacteur peut être fermé, semi fermé, ou ouvert. Le mélangeage est maximal.

- **le réacteur à écoulement piston :**

Ce terme signifie que réactifs et produits progressent en bloc (comme un piston dans un cylindre) en tranches parallèles successives n'échangent pas de matière entre elles.

Le degré de mélangeage est nul. La composition varie confinement d'un point à l'autre. Un tel réacteur est évidemment ouvert.

I.3.4 principales caractéristiques de fonctionnement :

- **Réacteur fermé :**

C'est un appareil simple, convenant au traitement de petites quantités, de produits coûteux, ou à des travaux de recherche et de mise au point. Son fonctionnement discontinu est assez coûteux.

- **Réacteur piston en régime permanent :**

Il convient aux réactions rapides, au traitement de grandes quantités de produits bon marché.

On arrive à une excellente qualité de produits mais les servitudes de fonctionnement et de régulation peuvent constituer un investissement coûteux, il est très employé dans l'industrie de pétrole par exemple.

- **Réacteur parfaitement agité ou semi fermé :**

Il se caractérise par sa souplesse et par la facilité du réglage des constatations ou de la température dans le cas des réactions fortement thermique.

Le mélangeage total peut toutefois être un inconvénient.

I.4 problèmes généraux du calcul d'un réacteur :

Le calcul d'un réacteur est un problème complet qui fait intervenir simultanément tous les bilans classiques rencontrés en génie chimie :

- Un bilan de matière qui tient compte notamment des cinétiques de réactions et éventuellement des vitesses de transfert entre phases.
- Un bilan énergie ou intervient en particulier le transfert de chaleur : certains réacteurs peuvent être largement tubulaires des problèmes d'apport ou d'évacuation de chaleur.
- Un bilan quantité de mouvement qui permet notamment d'évaluer la perte de charge à travers le réacteur.
- Une équation d'optimisation qui indique quelle variable de profit on désire rendre maximale :
Production du maximum d'un produit dans le minimum de volume au meilleur compte, production horaire, rendement sélectif en un produit déterminé.....
- Une ou plusieurs équations dynamiques définissant la stabilité, les caractéristiques du régime transitoire, les possibilités de contrôle et de régulation du procédé.....

Lorsque ce problème se pose dans sa généralité il n'est justiciable que d'un traitement automatique par des méthodes numérique ou des procédés de simulation. À quelques rares exceptions près.

Toutefois on pourra résoudre un grand nombre de problèmes réels en utilisant la notation de réacteur idéal.

I.5 Notions de réacteur idéal :

Un réacteur réel est souvent intermédiaire entre plusieurs types définis dans les classifications ci-dessus : mélangeage partiel. Agitation imparfaite.....

Cependant, on peut toujours le rattacher à l'une des grandes familles citées et approcher son comportement par celui d'un, ou d'une association de plusieurs des réacteurs types fonctionnant dans des conditions simples. Il est donc essentiel d'étudier ces modèles en grand détail :

Réacteur parfaitement agité, en écoulement piston, réacteur isotherme, isobare, ou on néglige les pertes de charge, les phénomènes de diffusion, les gradients de concentration de température.

Un tel réacteur est dit idéal, il permet de comprendre quels sont les paramètres critiques pour le réacteur réel qui s'en approche. On peut ensuite perfectionner progressivement le modèle en compliquant les hypothèses.

L'expérience prouve d'ailleurs qu'un grand nombre de réactions se font en pratique dans des réacteurs sensiblement idéaux.

I.6 Classes des réacteurs chimiques :

Ainsi, à partir des critères qu'on vient de citer, il est possible d'établir une classification des types de réacteurs évoqués selon les critères de classification retenus à savoir :

- 1) La nature et le nombre des phases en présence.
- 2) Le mode de fonctionnement du réacteur.
- 3) Le mode d'activation.

Lors de la description détaillée des divers types de réacteurs on s'est basé uniquement sur un seul critère de classification, alors que pour les cas pratiques la classification sera faite selon une combinaison de ces critères. Nous avons indiqué dans le tableau qui suit quelque cas pratiques particulièrement représentatifs des divers types de réacteurs de manière à donner une première idée du caractère concret de cette classification [TRA-96].

Phases en présence	Discontinu	Continu
	Fermé ou Semi-continu	Tubulaire ou CSTR
L	Polymérisation	Estérification
G+L	Fermentation	Absorption de polluants
L+L	Sulfonation d'aromatiques	Hydrolyse d'esters
(L ou G)+S+ Catalyseur	Hydrogénation	Cracking catalytique
(L ou G)+S	Régénération de catalyseur	Combustion en lit fluidisé

(G : gaz, L : liquide, S : solide).

Tableau (1.1) : Exemple de classes de réacteurs

I.7 Comparaison des divers types de réacteurs :

Après avoir décrit les trois types de réacteurs il est intéressant de les comparer sous divers aspects.

- **Phase réactionnelle :**

Pour traiter une phase gazeuse, seul le réacteur tubulaire est bien adapté.

Dans le cas d'une phase liquide, tous les types de réacteurs peuvent convenir.

- **Capacité de production :**

Si on se réfère à la quantité de charge traitée par jour, on peut dire que les systèmes continus l'emportent pour les fortes capacités (> 3650000 t/j). Pour des capacités très faibles, s'il s'agit de réactions en phase liquide, le système discontinu s'impose.

Dans le domaine des capacités intermédiaires, le choix résulte de comparaisons économiques, tenant compte en particulier du fait qu'un système continu nécessite du personnel posté jour et nuit, alors que le travail en discontinu peut être réalisé de jour.

- Temps de séjour :

Sur ce plan, le réacteur discontinu offre une grande souplesse permettant, sans inconvénient, d'avoir un temps de séjour pouvant atteindre 10 ou 20 h. Le réacteur tubulaire est beaucoup plus limité ($\theta < 1$ h). Le réacteur parfaitement agité permet d'atteindre des temps de séjour de 5 à 6 h, sans grosses difficultés. Il faut cependant noter que le temps de séjour θ n'a pas la même signification pour les trois types de réacteurs.

La figure suivante donne les domaines d'utilisation des divers réacteurs en se basant sur la capacité de production et le temps de séjour [TRA-96].

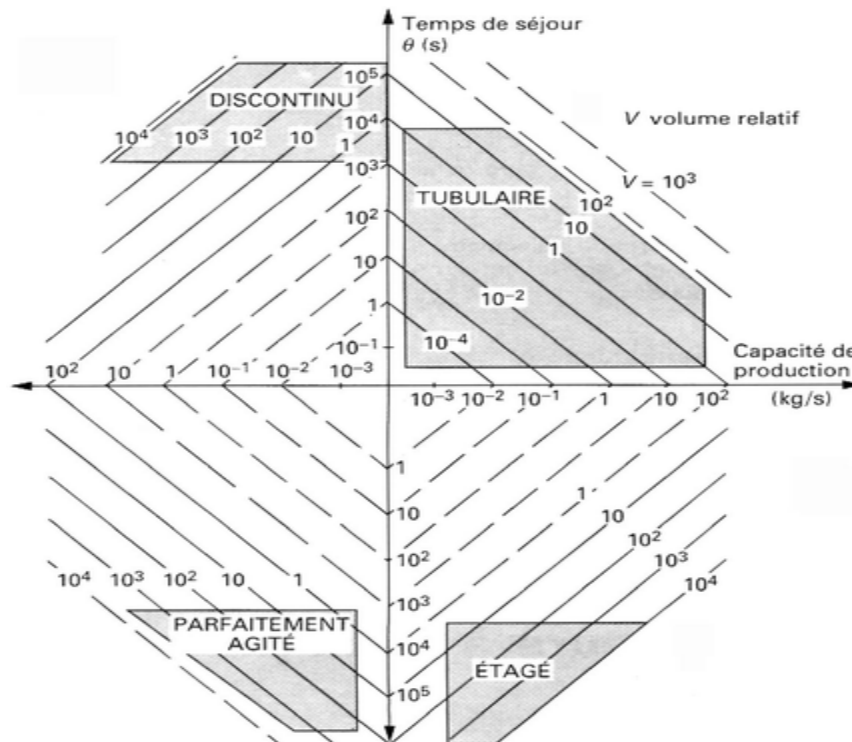


Figure (1.7) : Domaines d'utilisation des quatre principaux types de réacteurs

I.8 Conclusion :

Nous avons évoqué dans ce chapitre la classification des différents types de réacteurs chimiques et les critères de classification, ceci a permis de définir un certain nombre de catégories de réacteurs. Cette démarche de classification met en évidence les différences entre les réacteurs utilisés dans l'industrie.

Chapitre II

MODÉLISATION DES RÉACTEURS CHIMIQUES

II.1 Introduction :

Dans ce chapitre on va présenter la modélisation des réacteurs chimiques en tenant compte des phénomènes chimiques et physico-chimiques qui peuvent avoir lieu, et qui représentent un critère de classification des réacteurs industriels. La modélisation des réacteurs chimiques sera abordée en évoquant la modélisation des processus thermiques en s'appuyant sur les équations de bilans des différents types de réacteurs. Les modèles obtenus seront combinés avec ceux des réactions chimiques pour reproduire les modèles mathématiques des réacteurs. Par la suite, on va simuler le réacteur qui représente l'objet de notre étude, le réacteur continu parfaitement agité, en boucle ouverte afin de déduire certaines propriétés importantes de cette classe de réacteurs.

II.2 Modèles des réacteurs chimiques :

Pour modéliser un procédé chimique on dispose de plusieurs possibilités parmi les différents types de modèles à savoir [KHA-07]:

- **Modèles empiriques** : tel que les modèles de fonctions de transfert continues ou discrètes déduites de données entrées-sorties du procédé ; modèle de réseaux de neurones...etc.
- **Modèles phénoménologiques** : ce sont des modèles mathématiques basés sur les principes physico-chimiques de conservation : de la matière et de l'énergie.

En réalité, c'est l'objectif (commande, analyse...etc.) qui va définir quel est le modèle le plus adéquat qu'on doit employer.

II.2.1 Modèles empiriques :

D'après leur appellation, les modèles empiriques sont décrits sur la base d'expériences et ils sont souvent employés en automatique. Ils décrivent en temps continu ou discret le comportement dynamique des systèmes concernés. Seulement, qu'ils soient linéaires ou non linéaires, les modèles empiriques doivent faire l'objet d'une identification

de leurs propres paramètres pour reproduire un comportement plus proche au comportement réel du système modélisé.

Les modèles linéaires peuvent être des fonctions de transfert continues ou discrètes ; c'est-à-dire, ils constituent une relation linéaire entre l'entrée et la sortie et ne faisaient pas intervenir les variables d'état.

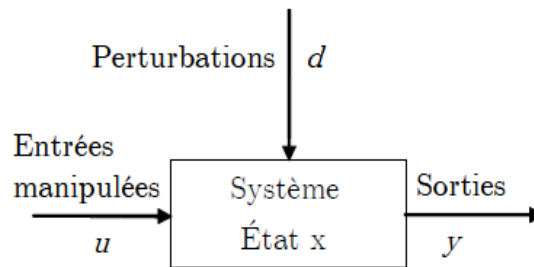


Figure (2.1) - Représentation bloc d'un système

Par contre les modèles dans l'espace d'état font intervenir en plus des entrées/sorties, les variables d'état. Dans l'espace d'état en temps continu, un système dynamique est représenté par la forme générale :

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x, u, t) \\ y = h(x) \end{cases}$$

Où x est le vecteur d'état de dimension n , u le vecteur d'entrée de dimension w , y le vecteur de sortie de dimension m .

II.2.2. Modèles phénoménologiques :

En génie des procédés on fait appel le plus souvent à des modèles qui décrivent le système à l'échelle macroscopique, car quand il s'agit d'employer le modèle pour un problème lié à l'analyse ou la commande, il est tout à fait inutile de concevoir un modèle trop détaillé à l'échelle moléculaire vu qu'il sera complexe. Le modèle macroscopique utilise les coefficients de transport entre phases, les constantes cinétiques pour décrire les opérations unitaires (réacteur, colonne de distillation, d'absorption, d'extraction, etc.) qui constituent un procédé complet.

Considérons un système réactif ouvert limité par une surface de contrôle. Parmi les équations qui constituent le modèle du procédé se trouvent les équations fondamentales de conservation : bilan de conservation de l'énergie, bilan de matière...etc.

Le transport à travers la surface de contrôle du système se fait par diffusion moléculaire ou par conduction. La génération et la consommation sont dues aux réactions chimiques qui se déroulent dans le réacteur considéré. Le modèle complet est la combinaison de ces équations qui seront différentielles ordinaires et accompagnées de conditions initiales, et cela lorsqu'il s'agit de systèmes à paramètres localisés (exemples : réacteur fermés, réacteur continu parfaitement agité) ; la représentation dans l'espace d'état est donc utilisée dans ce cas. Pour les systèmes à paramètres distribués (exemples : réacteur tubulaire, réacteur colonne fluidisée), le modèle est constitué d'équations aux dérivées partielles, accompagnées de conditions initiales et de conditions aux limites. Ces modèles utiles pour l'analyse et le dimensionnement sont moins commodes pour la commande [KHA-07].

II.3. Notions de thermochimie :

La thermochimie est un domaine de la chimie qui étudie les phénomènes thermiques qui accompagnent les réactions chimiques. Certaines réactions peuvent dégager de la chaleur, elles sont exothermiques et d'autres en absorbent, elles sont endothermiques. Marcellin Berthelot est considéré comme le fondateur de la thermochimie. Il créa la bombe calorimétrique et participa au perfectionnement du calorimètre. La bombe calorimétrique, qui est une très grande invention, permet de mesurer le pouvoir calorifique d'un combustible; la capacité d'un combustible à produire de l'énergie. Mise au point en 1881, elle est encore en usage aujourd'hui.

Au cours du XX^e siècle, la thermochimie s'est considérablement développée. L'application des principes de la thermodynamique aux systèmes chimiques a permis de prévoir le sens des réactions, le positionnement des équilibres chimiques et donc de définir le rendement et la composition du système après réaction.

II.3.1. Premier principe de la thermodynamique :

Le premier principe de la thermodynamique stipule que lors de toute transformation, il y a conservation de l'énergie. Ou bien : « Rien ne se crée, rien ne se perd, mais tout se transforme ».

Dans le cas des systèmes thermodynamiques, il s'énonce de la manière suivante :

« Au cours d'une transformation quelconque d'un système fermé, la variation de son énergie est égale à la quantité d'énergie échangée avec le milieu extérieur, sous forme de chaleur et sous forme de travail. » [OUA-07]

On pourra donc caractériser un système par son énergie et l'évolution du système par la variation de cette énergie. Cette grandeur, caractéristique d'un état donné du système, est une fonction d'état, c'est-à-dire que la variation de cette grandeur, lorsque le système évolue, ne dépend que des états initial et final. On l'appelle *énergie interne* et on la désigne par la lettre U .

Le travail est noté par la lettre W et la chaleur par Q .

$$U = W + Q \quad (2.1)$$

La variation infinitésimale de l'énergie interne peut s'écrire donc sous la forme :

$$dU = \partial W + \partial Q \quad (2.2)$$

La convention de signe pour ∂W et ∂Q est la suivante :

- $\partial W > 0$ et $\partial Q > 0$ quand ils sont reçus par le système.
- $\partial Q < 0$ et $\partial W < 0$ quand ils sont cédés par le système.

Le travail élémentaire s'écrit en grandeur et en signe en fonction de la pression P et du volume V [OUA-03] :

$$\partial W = -P\partial V \quad (2.3)$$

Ainsi si au cours de la transformation il n'y a pas variation de volume, le travail élémentaire est nul;

Définissons une nouvelle fonction d'état que nous appellerons enthalpie du système :

$$H = U + PV \quad (2.4)$$

En prenant la forme différentielle de la définition de l'enthalpie, on aura :

$$dH = dU + PdV + VdP \quad (2.5)$$

En prenant les dérivées par rapport au temps, on aura :

$$\frac{dH}{dt} = \frac{dU}{dt} + P \frac{dV}{dt} + V \frac{dP}{dt} \quad (2.6)$$

En prenant la définition de l'énergie et du travail, on aura finalement :

$$\frac{dH}{dt} - V \frac{dP}{dt} = \frac{dQ}{dt} \quad (2.7)$$

Pour les liquides la variation de pression est négligeable dans un réacteur [LUY-99]:

$$\frac{dP}{dt} = 0 \quad (2.8)$$

Comme l'énergie est une quantité qui est conservée au cours d'une réaction, et pour les réacteurs à volumes constants le travail est nul ; donc la chaleur est aussi conservée.

Montrons maintenant la relation entre la chaleur de réaction et la température ; pour cela on part du principe que l'énergie est influencée essentiellement par la température. En effet, l'enthalpie peut être écrite sous forme de produit de température absolue et de capacité calorifique moyenne qui est une constante [LUY-99] :

$$H = mC_p T \quad (2.9)$$

En prenant la dérivée par rapport au temps, et la définition de la masse, on aura :

$$\frac{dH}{dt} = \rho V C_p \frac{dT}{dt} \quad (2.10)$$

Ce qui nous conduit à l'équation finale :

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = \dot{Q} \quad (2.11)$$

II.3.2. Aspect thermique des réactions chimiques :

Au cours d'une réaction chimique, le système échange de l'énergie avec le milieu extérieur sous forme de chaleur. On distingue deux types des réactions chimiques selon leur aspect thermique.

II.3.2.1. Réactions exothermiques :

Ces réactions libèrent de l'énergie, ce qui se traduit par les possibilités suivantes :

- Libération sous forme de chaleur : La chaleur qui est libérée entraîne une élévation de la température ou provoque une transformation endothermique qui absorbe cette chaleur

L'énergie des réactifs est plus grande que celles des produits. Cet excédent d'énergie est donné à la solution faisant ainsi augmenter la température.

Dans le cas d'une réaction exothermique l'enthalpie de cette réaction est négative ($\Delta H < 0$).

II.3.2.2. Réactions endothermiques :

Ces transformations absorbent de l'énergie, ce qui se traduit par les possibilités suivantes :

- Absorption de chaleur : la chaleur absorbée peut entraîner une baisse de température du milieu et peut nécessiter un apport constant d'énergie

Les réactifs empruntent de l'énergie qu'il faut pour se transformer en produits. Cet emprunt fait diminuer la température de la solution. L'enthalpie de cette réaction est positive ($\Delta H > 0$)

II.4. Vitesse et mécanismes des réactions:

On appelle loi de vitesse d'une réaction la variation des réactifs ou des produits par unité de temps. La loi de vitesse est une relation qui existe entre la vitesse et tous les facteurs qui ont une influence sur celle-ci.

Parmi ces facteurs, on distingue d'une part les facteurs physiques (et en particulier la température) et, d'autre part, les quantités (ou les concentrations) des substances présentes dans le milieu réactionnel (et en particulier les réactifs).

La loi de vitesse peut se mettre sous la forme d'un produit de deux fonctions [NAU-08]:

$$v = k(T)g(C_i) \quad (2.12)$$

Le premier facteur $k(T)$ est le coefficient de vitesse (ou constante de vitesse) qui dépend notamment de la température, le second est une fonction des quantités (ou des concentrations) des substances présentes dans le milieu réactionnel.

La loi de vitesse doit être établie expérimentalement à partir de séries d'expériences judicieusement conçues en faisant varier différents facteurs.

Dans certains cas, la fonction $g(C_i)$ peut se mettre sous la forme d'un monôme :

$$g(C_i) = \prod_i C_i^{n_i} \quad (2.13)$$

On dit alors que la réaction admet un ordre et l'on appelle ordre de réaction la somme :

$$n = \sum n_i \quad (2.14)$$

n_i Est l'ordre partiel de la réaction par rapport à l'espèce i .

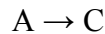
Il est à noter que les ordres partiels ne sont pas nécessairement égaux aux coefficients stœchiométriques, ils ne sont même pas nécessairement entiers ni positifs, ils peuvent même être des nombres fractionnaires et même des nombres réels. Si la loi de vitesse ne peut pas se mettre sous la forme d'un monôme avec les concentrations comme facteurs, on dit que la réaction n'admet pas d'ordre. Cependant, pour les réactions dites élémentaires les ordres sont égaux aux coefficients stœchiométriques [NAU-08]. μ

II.4.1. Cinétique des réactions élémentaires :

Une réaction est dite élémentaire si les réactifs réagissent simultanément en un même point pour donner directement les produits sans former d'espèces intermédiaires. La vitesse de réaction dépend donc de la probabilité de rencontre des réactifs donc de la fréquence des chocs. Cette fréquence est proportionnelle à leur concentration. Par ailleurs, plus la température est élevée, plus les rencontres sont probables (agitation thermique) et plus l'énergie cinétique des réactifs au moment du choc est élevée ce qui permet de franchir la barrière d'activation, donc la température a également un rôle important qui est explicité dans la loi d'Arrhenius.

On appelle molécularité le nombre d'entités (molécules, ions) qui entrent simultanément en contact lors d'une réaction élémentaire. Les réactions élémentaires sont dites mono moléculaires, biomoléculaires ou tri moléculaires selon la valeur de leurs molécularités (respectivement 1, 2 ou 3). Comme la probabilité que plus de 3 entités se trouvent simultanément en un même point est quasiment nulle, on considère qu'il n'existe pas de réaction élémentaire de molécularité supérieure à 3 ; la probabilité de chocs triples étant elle-même très faible.

Pour une réaction élémentaire, son ordre est égal à sa molécularité. Prenons comme exemple une réaction élémentaire mono moléculaire :



La loi de vitesse prendrait comme forme :

$$-\frac{d[A]}{dt} = +\frac{d[C]}{dt} = \mathcal{R} = k[A] \quad (2.15)$$

D'ordre global 1 (ordre partiel 1 par rapport au réactif). K est la constante de vitesse dépendant notamment de la température et éventuellement d'autres facteurs physiques. Ici, l'unité de k est l'inverse du temps, qui peut être des secondes, minutes, heures, ou même des jours. On désigne le produit $k[A]$ aussi par le terme 'taux de génération' noté par le symbole \mathcal{R} .

Pour une réaction élémentaire biomoléculaire :



La loi de vitesse prendrait la forme :

$$-\frac{d[A]}{dt} = -\frac{d[B]}{dt} = +\frac{d[C]}{dt} = k[A][B] \quad (2.16)$$

D'ordre global 2 (ordre partiel 1 par rapport à chaque réactif). Ici, l'unité de k est un volume divisé par mole par unité de temps.

Si, par contre :



La loi de vitesse est :

$$-\frac{d[A]}{dt} = +\frac{d[C]}{dt} = k[A]^2 \quad (2.17)$$

II.4.2. Influence de la température : loi d'Arrhenius

La température est le facteur ayant la plus grande influence sur la vitesse des réactions chimiques. Dans un très grand nombre de cas la vitesse de la réaction augmente d'un facteur 2 à 3 lorsque la température augmente de 10 degrés. La dépendance de la vitesse de réaction en fonction de la température a fait l'objet d'études expérimentales intensives à la fin du XIX^e siècle. Plusieurs équations empiriques ont alors été proposées, mais c'est la « loi d'Arrhenius » qui s'est imposée au début du XX^e siècle. Cette loi a été vérifiée depuis pour un très grand nombre de réactions.

Selon la loi d'Arrhenius la température intervient dans un facteur exponentiel, ainsi la constante de vitesse s'écrit comme étant [OUA-03]:

$$k(T) = k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (2.18)$$

Dans laquelle R la constante des gaz parfaits, T la température en Kelvin, et k_0 un facteur pré-exponentiel dépendant de la réaction. E_a Est l'énergie d'activation, c'est la quantité d'énergie nécessaire pour lancer une réaction. En effet, pour démarrer un processus chimique, on doit souvent faire face à une barrière énergétique (c'est-à-dire apporter un minimum d'énergie pour le démarrage). Cette quantité est exprimée, selon le système international d'unités, en $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$.

Outre son importance pratique, la loi d'Arrhenius a une grande importance théorique car elle est compatible avec la théorie des collisions qui permet de jeter un pont entre la représentation microscopique (à l'échelle des molécules) de la réaction chimique et l'observation macroscopique de sa vitesse. Cependant, toutes les réactions ne suivent pas forcément la loi d'Arrhenius. C'est en particulier le cas des réactions explosives, des réactions catalysées par les enzymes ou ayant d'autres modes d'activation que l'activation purement thermique (activation par rayonnement, par électrochimie ou par micro-ondes).

II.5. Transfert de chaleur :

II.5.1. Transfert par conduction :

La conduction thermique est la propagation de la chaleur, de molécule à molécule, dans un corps ou dans plusieurs corps contigus et non réfléchissants, sans qu'il y ait mouvement du milieu ou que ce mouvement intervienne dans la transmission.

Ce mode de transmission caractérise essentiellement les transferts de chaleur dans les solides ou entre corps solides contigus. La conduction intervient également dans les liquides et les gaz mais, sauf dans le cas des liquides très visqueux ou des gaz emprisonnés dans des matériaux poreux, son effet est marginal par rapport à celui de la convection.

Le transfert de chaleur par conduction caractérise tous les transferts de chaleur qui s'effectuent dans les parois séparant deux corps à des températures différentes. C'est le cas des surfaces d'échange des échangeurs de chaleur, mais c'est aussi celui des murs et vitrages d'un bâtiment, des cuves contenant des liquides chauds ou froids, des parois des fours, etc.

Il est courant que les parois soient constituées de plusieurs matériaux ayant chacun un rôle spécifique (réfractaire, revêtement anticorrosion, isolant thermique, etc.) et qui sont des parois composites à travers lesquelles s'effectue le transfert de chaleur.

II.5.1.1 Loi de Fourier :

La loi de Fourier traduit la relation existant, en chaque point d'un corps, entre le flux thermique et le gradient de température. Cette caractérisée par une seule dimension (paroi plane, cylindrique ou sphérique par exemple), s'écrit [LEL-00]:

$$\frac{d\phi}{dA} = \frac{-\lambda dT}{dx} \quad (2.19)$$

Avec :

- ϕ : flux de chaleur ($\text{kJ}\cdot\text{s}^{-1}$).
- T : température(K).
- A : surface d'échange (m^2).
- x : coordonnée du point considéré (m).
- λ : conductivité thermique ($\text{kJ}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$).

Le calcul intégral permet de généraliser la loi de Fourier à des corps de forme quelconque. Cette loi traduit le fait que le flux de chaleur est proportionnel au gradient de température. La direction de l'écoulement de chaleur coïncide avec celle du gradient de température. Le signe moins caractérise le fait que l'écoulement de chaleur s'effectue dans le sens des températures décroissantes : du chaud vers le froid.

Par exemple, dans le cas d'un mur, le calcul intégral donne :

$$\phi = \frac{\lambda}{e} A(T_1 - T_2) \quad (2.20)$$

$e = x_1 - x_2$ Est l'épaisseur de la paroi

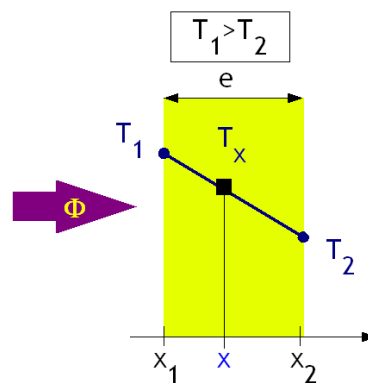


Figure (2.2) - Conduction à travers un mur

II.5.2 Transfert par convection :

Imaginons un solide baignant dans un fluide en mouvement. Si le solide et le fluide ne sont pas à la même température, de la chaleur est échangée entre le solide et les particules fluides qui sont à son contact. Cet échange se fait par conduction, la particule fluide rencontre, au cours de son déplacement, d'autres particules fluides avec lesquelles elle échange de la chaleur [LEL-00].

Le mécanisme élémentaire de transfert de chaleur est la conduction thermique mais le phénomène global, qui est la convection thermique, résulte de la combinaison de cette conduction avec les mouvements du fluide qui obéissent à des lois spécifiques.

Deux types de convection sont généralement distingués :

- La convection naturelle dans laquelle le mouvement résulte de la variation de la masse volumique du fluide avec la température ; cette variation crée un champ de forces gravitationnelles qui conditionne les déplacements des particules du fluide ;
- La convection forcée dans laquelle le mouvement est provoqué par un procédé mécanique indépendant des phénomènes thermiques; c'est donc un gradient de pression extérieur qui provoque les déplacements des particules du fluide.

L'étude de la transmission de chaleur par convection est donc étroitement liée à celle de l'écoulement des fluides.

Les applications du transfert de chaleur par convection sont nombreuses. Elles interviennent chaque fois que l'on chauffe ou que l'on refroidit un liquide ou un gaz, qu'il s'agisse de faire bouillir de l'eau dans une casserole, du radiateur de chauffage central, du radiateur associé au moteur d'une voiture ou de l'échangeur dans un procédé, évaporateur ou condenseur.

La convection s'applique même si la surface d'échange n'est pas matérialisée par une paroi, ce qui est le cas des condenseurs par mélange ou des réfrigérants atmosphériques, voire des sècheurs à air chaud.

II.5.3. Transfert par rayonnement :

Le rayonnement, synonyme de radiation en physique, désigne le processus d'émission ou de transmission d'énergie impliquant une particule porteuse. Ce type de transfert de chaleur n'a aucun effet sur les bilans thermiques dans les réacteurs chimiques.

II.6 Modélisation des réacteurs continus:

II.6.1 Modélisation du réacteur parfaitement agité (CSTR):

Cette section présente la modélisation d'un réacteur CSTR tel que présenté à la figure suivante :

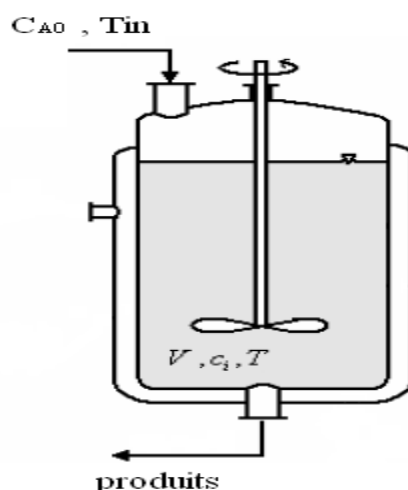


Figure (2.3) - Schéma d'un réacteur continu parfaitement mélangé (CSTR)

Le réacteur est alimenté par un produit dont sa concentration est constante, avec une certaine température T_{in} . L'intérieur du réacteur est le siège des réactions chimiques, le mélange est constamment agité grâce à un mélangeur.

On commande le réacteur en apportant un taux de chaleur, il y a principalement deux façons d'apporter de la chaleur selon la géométrie du réacteur [LUY-07] :

- Réacteurs chauffés par un fluide circulant dans la chemise entourant le réacteur. Ces réacteurs sont les plus couramment utilisés.

- Réacteurs chauffés par un fluide circulant à l'intérieur de serpentins installés à l'intérieur du réacteur.

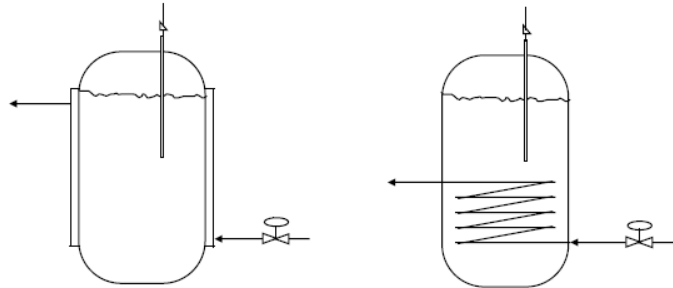
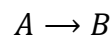


Figure (2.4) – Schémas des réacteurs chauffés avec chemise et par des bobines

Afin de modéliser ce réacteur, nous considérons les hypothèses suivantes :

- Mélange homogène au niveau moléculaire.
- Température homogène du milieu.
- Volume et densité constants (débit d'entrée = débit de sortie).
- Concentrations et température du flux de sortie sont les mêmes que celles dans le réacteur.

Nous prenons comme exemple le système de réactions suivant, connu sous le nom de Van de Vusse :



Le réacteur dans ce cas-là est alimenté par un seul produit :

Le produit A pour avoir le produit B après réaction.

II.6.1.a Bilan de matière :

D'après la loi fondamentale de la conservation de matière 'Lavoisier' ; rien ne se crée, rien ne se perd, mais tout se transforme.

Nous considérons une quantité de matière :

La quantité de matière (ou nombre de moles) relatif au produit A :

$$n_1 = VC_a \quad (2.21)$$

c_a dénote la concentration du produit, en mol.l^{-1} , et V est le volume du réacteur en litres.

Le bilan de matière est :

$$\left[\begin{array}{c} \text{Taux} \\ d'accumulation \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Taux d'entrée} \\ \text{par convection} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Taux de sortie} \\ \text{par convection} \end{array} \right] + [\text{Taux de génération}]$$

Ce qui donne :

$$\frac{d(VC_a)}{dt} = FC_{Ain} - FC_a - Vk_1(T)C_a \quad (2.22)$$

C_{Ain} Étant la concentration d'entrée du composant d'alimentation A. F le débit d'entrée et de sortie.

Les coefficients $k_i(T)$ sont les coefficients qui interviennent selon un facteur exponentiel d'après la loi d'Arrhenius.

Comme les débits d'entrée et de sortie sont égaux, par conséquent volume est constant dans le réacteur, on divise les deux équations par ce volume pour obtenir les équations finales :

$$\frac{dC_a}{dt} = D(C_{Ain} - C_a) - k_1(T)C_a \quad (2.23)$$

$D = \frac{F}{V}$ Est appelé le taux de dilution.

II.6.1.b Bilan d'énergie :

Nous avons vu précédemment que la chaleur dans un réacteur continu parfaitement agité est conservée, et varie selon l'équation (2.11):

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = \dot{Q} \quad (2.24)$$

En appliquant ce principe de conservation on aura [WEL-00]:

$$\begin{aligned} \left[\begin{array}{c} \text{Taux} \\ \text{d'accumulation} \end{array} \right] &= \left[\begin{array}{c} \text{Taux d'entrée} \\ \text{par convection} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Taux de sortie} \\ \text{par convection} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} \text{Taux de génération} \end{array} \right] \\ &+ \left[\begin{array}{c} \text{Taux d'échange à la paroi} \\ \text{par conduction} \end{array} \right] \end{aligned}$$

La chaleur spécifique moyenne C_p étant supposée constante, les taux d'entrée et de sortie sont :

- $[Taux d'entrée] = \rho C_p F T_{in}$
- $[Taux de sortie] = \rho C_p F T$
- Le taux d'échange à la paroi selon la loi de conduction est : $[Taux d'échange à la paroi] = q_c \rho C_p \left\{ 1 - \exp\left(\frac{-hA}{q_c P C_p}\right) \right\} (T_c - T)$, $T_j = T_c$ dans le cas du réacteur avec chemise. L'indice 'j' s'apparente à la chemise (jacket en anglais) du réacteur, ce type de réacteurs sont considérés pour la suite de notre étude. Dans le cas du réacteur chauffé par des bobines, le taux d'échange est égal à un flux de chaleur \dot{Q}_{fluide} .

La chaleur générée par une réaction est donnée par le terme $-V\Delta H_R \mathcal{R}$; \mathcal{R} étant le taux de génération donné par la loi de vitesse. Le signe négatif est ajouté au terme pour respecter la convention de l'enthalpie ; lorsque par exemple la réaction est exothermique, c'est-à-dire $\Delta H_R < 0$, la chaleur augmente d'où le signe négatif [NAU-08].

Le volume est ajouté à l'expression car l'unité de l'enthalpie est en $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

Lorsque plusieurs réactions se présentent, il faut procéder à une sommation de toutes les enthalpies de réaction :

$$-V \sum_{\text{réactions}} (\Delta H_R)_i \mathcal{R}_i \quad (2.25)$$

D'où le taux de génération dans notre cas :

$$[\text{Taux de génération}] = -k_1(T) V C_a \Delta H_{rAB}$$

En divisant l'équation $\rho V C_p$ on trouve l'équation finale de la température:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V} [T_0 - T] - \frac{K_0 C_a}{p C_p} (\Delta H) \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) + \frac{qc}{V} \left\{1 - \exp\left(\frac{-hA}{q_c p C_p}\right)\right\} (T_c - T) \quad (2.26)$$

On peut généraliser les équations du système sous cette forme :

$$\begin{cases} \frac{dc_a}{dt} = \frac{F}{V} (C_{ain} - C_a) - K_0 C_a \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \\ \frac{dT}{dt} = \frac{F}{V} [T_0 - T] - \frac{K_0 C_a}{p C_p} (\Delta H) \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) + \frac{qc}{V} \left\{1 - \exp\left(\frac{-hA}{q_c p C_p}\right)\right\} (T_c - T) \end{cases} \quad (2.27)$$

Si on note $T_c = u$, $C_A = x_1$, $T = x_2$ Donc on aura :

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = 1 - x_1 - 7.2 * 10^{10} x_1 \exp\left(-\frac{10^4}{x_2}\right) \\ \dot{x}_2 = 350 - 2x_2 + 1.44 * 10^{13} x_1 \exp\left(-\frac{10^4}{x_2}\right) + u \end{cases} \quad (2.28)$$

II.6.2 Modélisation du réacteur tubulaire(PFTR) :

Cette section présente la modélisation d'un réacteur tubulaire tel que présenté à la figure suivante :

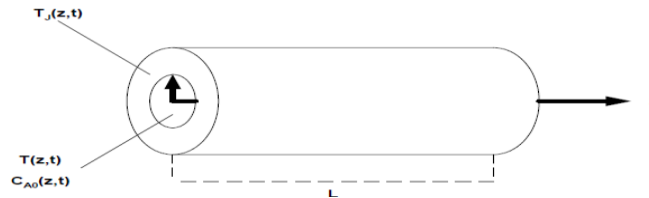


Figure (2.5) Schéma d'un réacteur tubulaire (PFTR)

Les bilans de matière et d'énergie permettent d'obtenir les équations de concentration et de température pour les réacteurs tubulaires. La figure suivante présente une tranche infinitésimale du réacteur, en supposant que le transfert de matière est principalement l'effet de la convection ; le transfert par rayonnement est négligé.

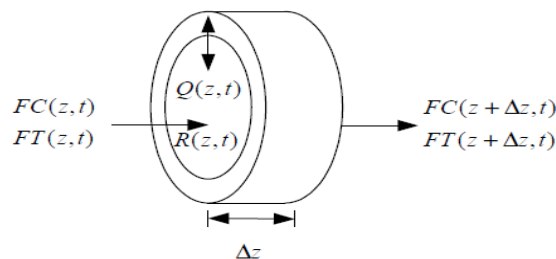


Figure (2.6) – Tranche infinitésimale d'un réacteur tubulaire

Avec :

- F : débit du fluide
- C : le vecteur $n \times 1$ des profils de concentrations
- T et T_J : les profils de température dans le réacteur et dans la chemise, respectivement.
- R : représente le vecteur $r \times 1$ des cinétiques de la réaction
- Q : le taux d'échange thermique à la paroi.

En supposant la masse volumique constante le long de la paroi et le long du réacteur, le bilan matière autour de cet élément est :

$$\left[\begin{array}{c} \text{Taux} \\ \text{d'accumulation} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Taux d'entrée} \\ \text{par convection} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Taux de sortie} \\ \text{par convection} \end{array} \right] + [\text{Taux de génération}]$$

$$A\Delta z \frac{\partial C(z,t)}{\partial t} = FC(z,t) - FC(z + \Delta z, t) + A\Delta z KR(C(z,t), T(z,t)) \quad (2.29)$$

Avec :

- K la matrice $n \times r$ des coefficients stœchiométriques,
- $A = \frac{\pi d^2}{4}$, la section du réacteur.

En divisant par $A\Delta z$ et en prenant la limite $\Delta z \rightarrow 0$ en sachant que :

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{C(z+\Delta z, t) - C(z, t)}{\Delta z} = \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} \quad (2.30)$$

On obtient :

$$\frac{\partial C(z, t)}{\partial t} = -D \frac{\partial C(z, t)}{\partial z} + KR(C(z, t), T(z, t)) \quad (2.31)$$

On note le taux de dilution :

$$D = \frac{F}{A\Delta z} \quad (2.32)$$

En considérant la chaleur spécifique C_p constante, le bilan d'énergie sur cet élément est de la forme :

$$\left[\begin{array}{c} \text{Taux} \\ \text{d'accumulation} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Taux d'entrée} \\ \text{par convection} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Taux de sortie} \\ \text{par convection} \end{array} \right] + [\text{Taux de génération}] \\ + [\text{Taux d'échange à la paroi}]$$

$$A\Delta z\rho C_p \frac{\partial T(z,t)}{\partial t} = \rho C_p FT(z,t) - \rho C_p FT(z+\Delta z,t) + A\Delta z\Delta H^T R(C(z,t), T(z,t)) \\ + (\pi d)\Delta z Q(z,t) \quad (2.33)$$

Où ΔH , le vecteur $r \times 1$ des chaleurs de réactions. Le terme d'échange de l'énergie à la paroi selon la loi de fourrier est donné par :

$$Q(z,t) = h(T(z,t) - T_j(z,t)) \quad (2.34)$$

En divisant par $A\Delta z\rho C_p$ et par définition de la limite:

$$\frac{\partial T(z,t)}{\partial t} = -D \frac{\partial T(z,t)}{\partial z} + \frac{\Delta H^T}{\rho C_p} R(C(z,t), T(z,t)) + \frac{4h}{d\rho C_p} (T(z,t) - T_j(z,t)) \quad (2.35)$$

Avec les conditions initiales $C(z,0)$ et $T(z,0)$ connues. Les conditions à la frontière sont connues et sont de la forme :

$$\begin{cases} C(0,t) = C_{in} \\ T(0,t) = T_{in} \end{cases} \quad (2.36)$$

II.7. Simulation du réacteur CSTR en boucle ouverte :

Nous allons à présent simuler le réacteur modélisé dans la section (II.6.1). Nous allons appliquer une commande en forme d'échelon ; rappelons que la commande est le taux d'échange de chaleur apporté au réacteur, nous allons considérer les trois cas suivants :

- Refroidissement du réacteur : c'est-à-dire que la température de la chemise est inférieure à la température du réacteur, donc le transfert de chaleur est du sens réacteur-chemise.

- Chauffage du réacteur : c'est-à-dire que la température de la chemise est supérieure à la température du réacteur, donc le transfert de chaleur est du sens chemise-réacteur.

- Pas d'échange dans la paroi : c'est-à-dire que la température de la chemise suit la température du réacteur ; il n'y a donc pas de gradient de température entre chemise-réacteur.

Les valeurs numériques des paramètres de la réaction sont listées dans le tableau de l'annexe. Nous allons à chaque cas tracer les courbes de concentrations et de la température.

- Cas du refroidissement du réacteur:

$$u = T_c = 350 \text{ K}$$

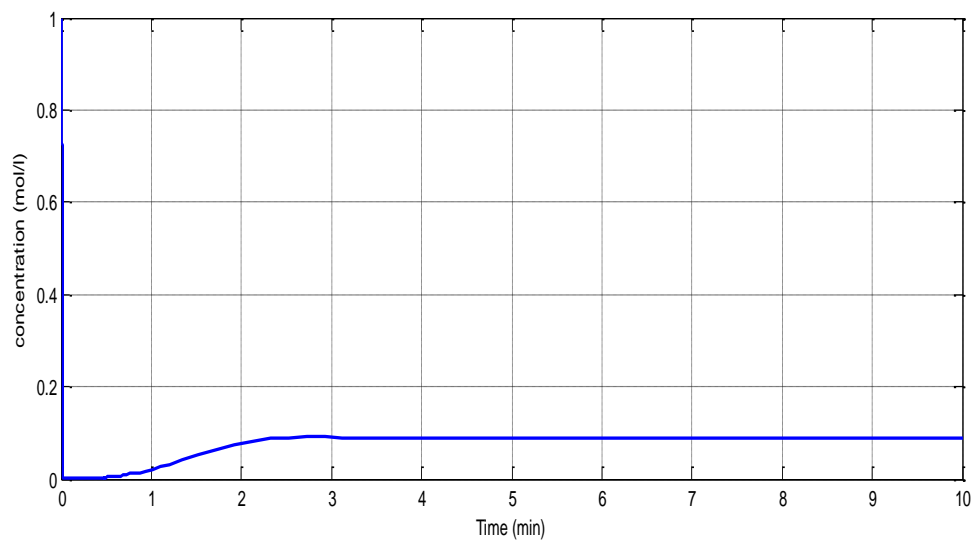
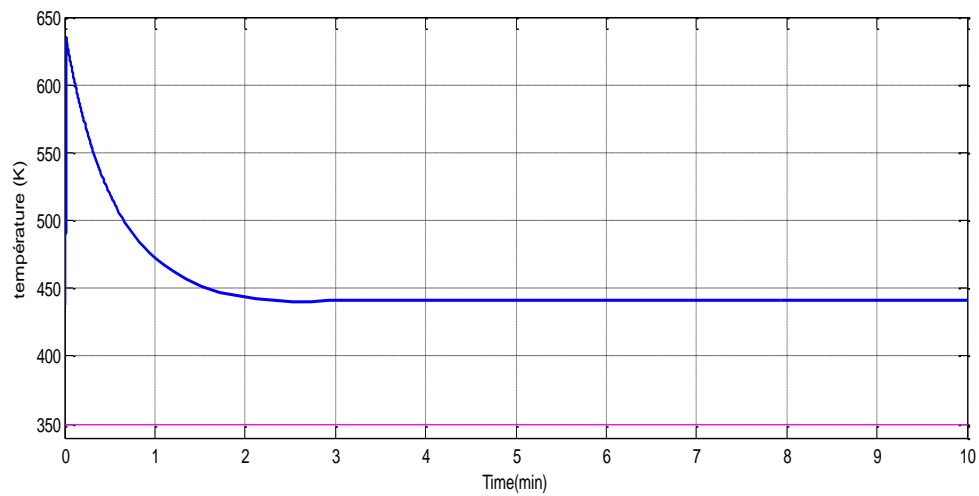


Figure (2.7) – Profils de température et concentrations, cas du refroidissement.

- Cas du chauffage du réacteur :

$$u = T_c = 550 \text{ K}$$

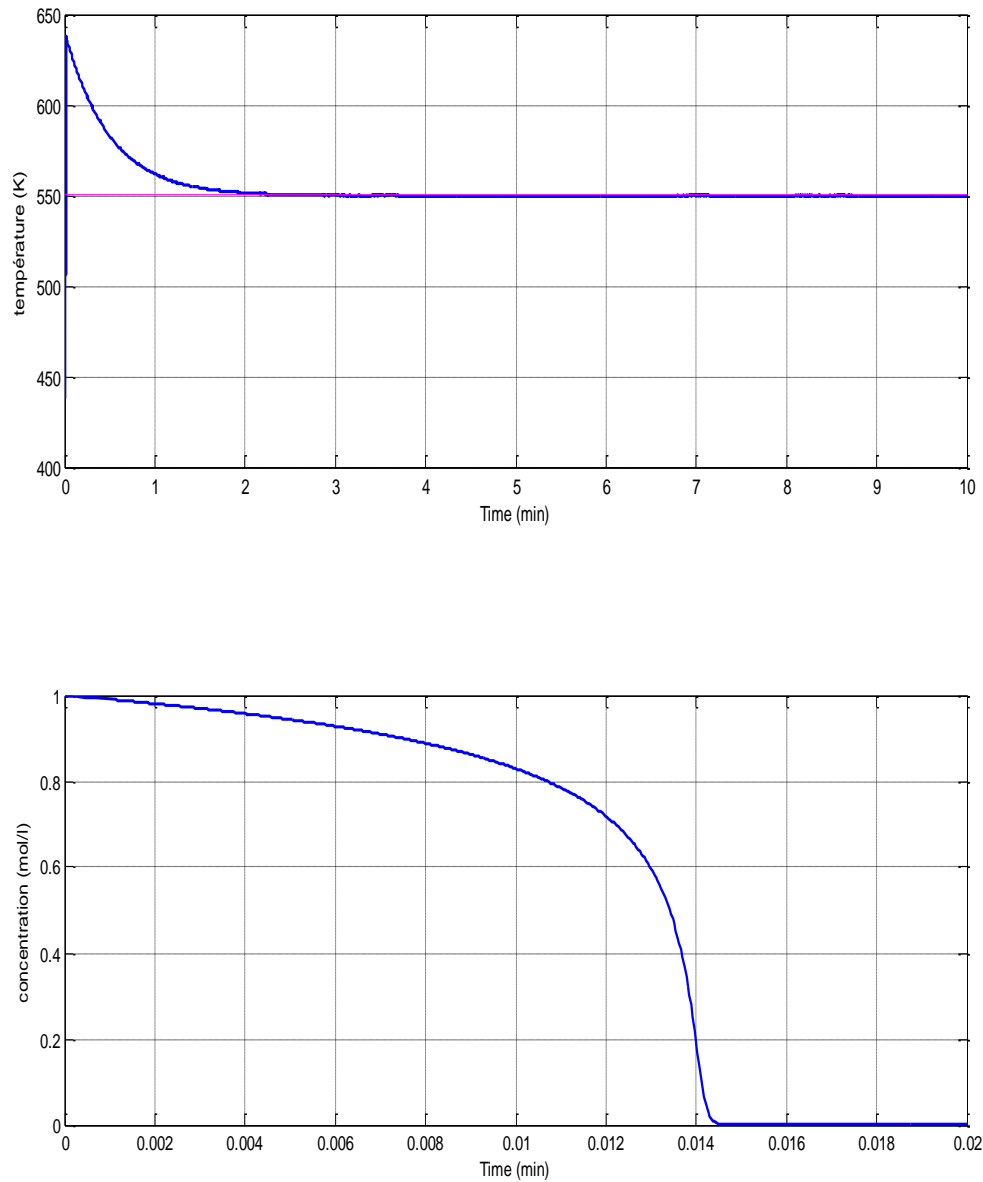


Figure (2.8) – Profils de température et concentrations, cas du chauffage.

- Cas du taux d'échange nul :

$$u = T_c = 440 \text{ K}$$

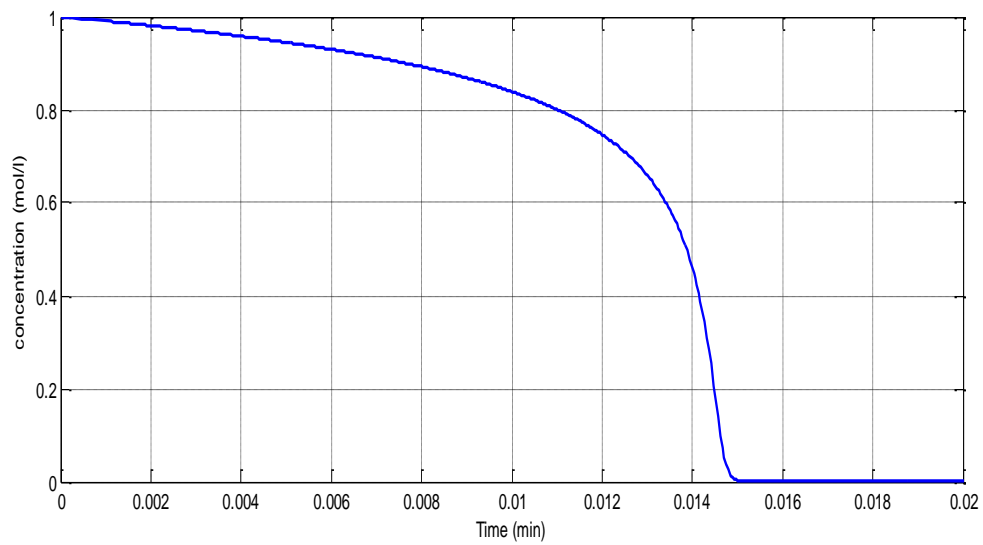
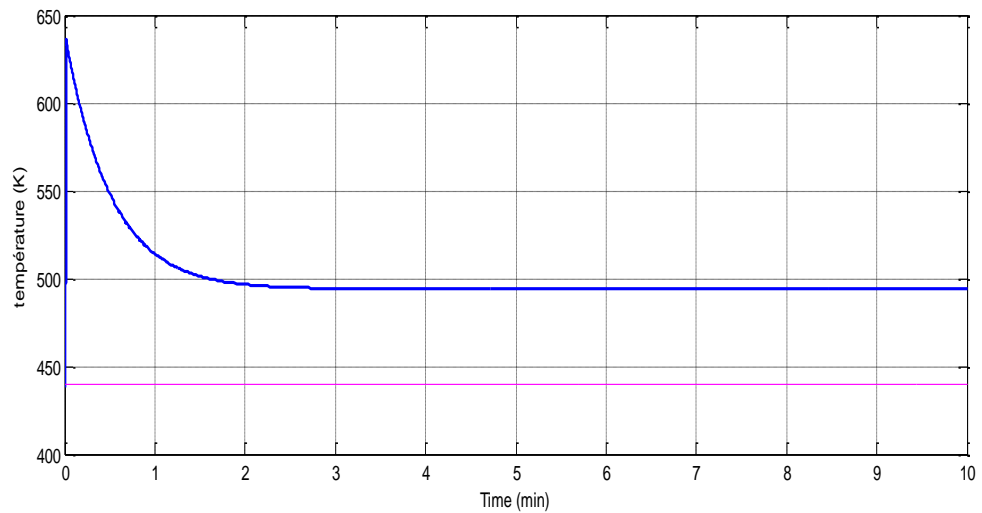


Figure (2.9) – Profils de température et concentrations, cas du taux nul.

Réponse aux perturbations :

On prend le cas chauffage :

La perturbation est un signal sinusoïdal d'amplitude 5 K et de fréquence 100 Hz sur la commande.

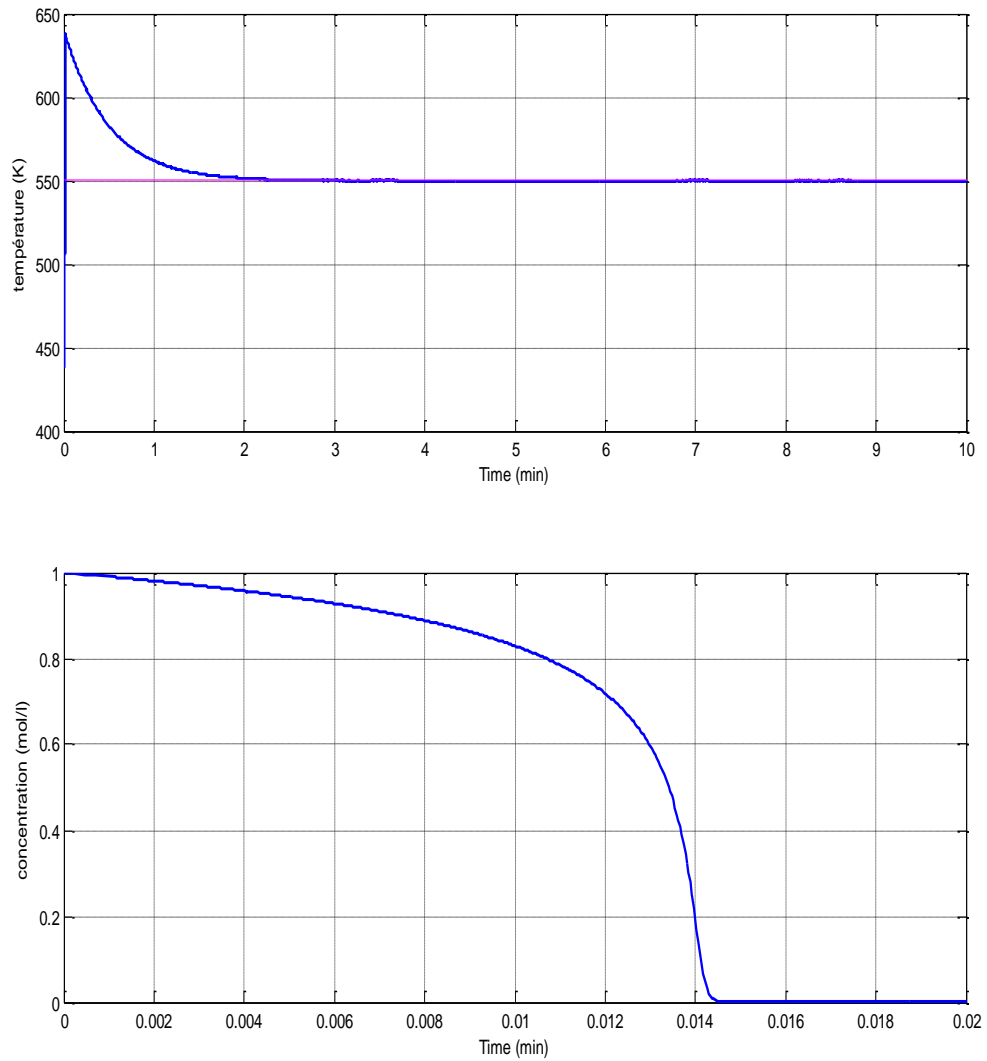


Figure (2.10) – Profils de température et concentrations, cas du chauffage avec perturbation sur la commande.

II.7.1 Commentaires :

Les résultats montrent que pour les trois différents taux d'échange, la température se stabilise, au début elle augmente d'une façon rapide jusqu'au 640 K, puis elle diminue et stagne, elle se stabilise avec une valeur beaucoup plus grande que la référence ; ce qui menace de brûler le produit d'intérêt, l'augmentation de la température au début de la réaction est due au dégagement de chaleur (réaction exothermique).

La concentration elle aussi diminue et s'annule très rapidement, c'est due aux chocs entre molécules à cause de l'augmentation instantanée de la température, c'est une réaction presque instantanée qui se déroule en quelques secondes, exothermique qui dégage de la chaleur ce qui explique l'augmentation de la température et la diminution rapide de la concentration.

Le réacteur est donc stable en boucle ouverte, c'est une propriété implicite de ce système.

Le système en boucle ouverte ne répond pas aux perturbations.

II.8. Profils d'équilibres :

$$\dot{T} = 0 \Leftrightarrow T = T_{eq} \quad (2.37)$$

Pour déterminer le profil d'équilibre on cherche le point d'équilibre du système en fonction d'une certaine température d'équilibre:

$$\dot{C}_a = 0 \quad (2.38)$$

Ce qui donne :

$$\begin{cases} 0 = \frac{F}{V} (C_{ain} - C_a) - K_0 C_a \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \\ 0 = \frac{F}{V} [T_0 - T] - \frac{K_0 C_a}{p C_p} (\Delta H) \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) + \frac{qc}{V} \left\{1 - \exp\left(\frac{-hA}{q_c p C_p}\right)\right\} (T_c - T) \end{cases}$$

(2.39)

$$\pi(T) = C_a = \frac{\frac{F}{V} C_{ain}}{\frac{F}{V} + K_0 \exp\left(\frac{-E}{RT}\right)} \quad (2.40)$$

Traçons à présent la courbe du profil d'équilibre C_a en fonction de la température, en considérant l'intervalle de température : [300 K, 500 K] :

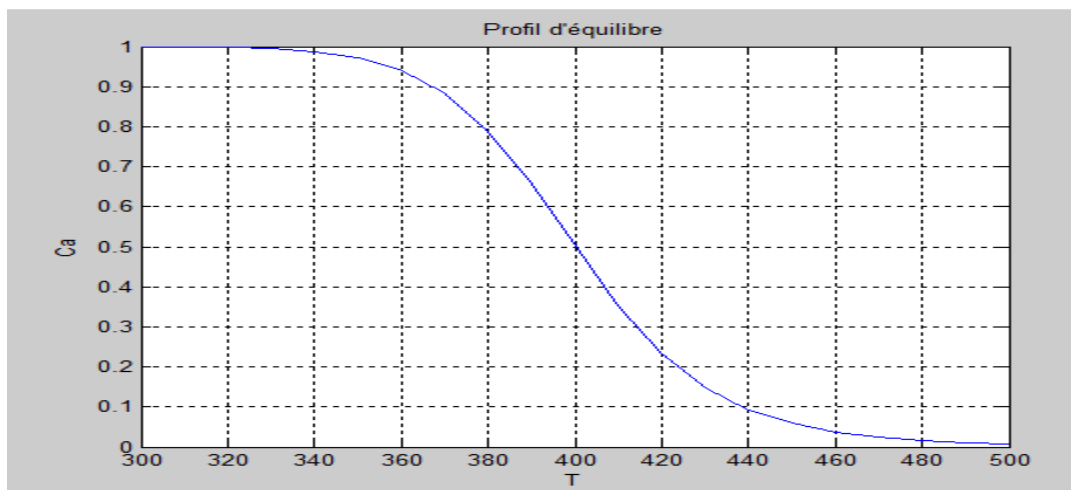


Figure (2.11) – Profil d'équilibre de la concentration du produit d'intérêt

On remarque que le profil d'équilibre du produit d'intérêt est une fonction décroissante par rapport à la température et ne présente pas un extremum d'où la nécessité de la recherche d'un point de fonctionnement : le problème de recherche de commande linéarisante se pose.

II.9. Conclusion :

Nous avons présenté dans ce chapitre, les principaux phénomènes et lois physiques et thermodynamiques régissant le fonctionnement des réacteurs chimiques. Nous avons appliqué ces lois pour modéliser deux types de réacteurs largement utilisés dans l'industrie: le réacteur parfaitement mélangé (CSTR) et le réacteur tubulaire (PFTR) ; la différence entre les deux réside dans le fait que le réacteur parfaitement mélangé (CSTR) est un système à paramètres localisés ; le mélange dans ce réacteur étant supposé homogène, les concentrations et la température à la sortie sont supposées égales à leurs valeurs en tout point du mélange.

Par contre, le réacteur tubulaire (PFTR) est un système à paramètres distribués, il est régi par des équations aux dérivées partielles. Ainsi, les concentrations et la température évoluent le long du réacteur.

Notre projet va se concentrer sur le réacteur bien mélangé (CSTR), la simulation en boucle ouverte de ce système a montré qu'il est stable par nature; la température se stabilise autour d'un point qui correspond à une certaine concentration du produit d'intérêt. Le profil d'équilibre de la concentration en fonction de la température montre qu'il n'existe pas un extremum; le problème de recherche d'un point de fonctionnement satisfaisant le cahier de charge se pose d'où l'intérêt d'application de la commande linéarisante.

Chapitre III

COMMANDE LINÉARISANTE

APPLIQUÉE AU RÉACTEUR

CHIMIQUE CONTINU

PARFAITEMENT AGITÉ

III.1-Introduction et notions de bases

La linéarisation exacte par feedback des systèmes non linéaires nécessite la vérification (au voisinage d'un point d'équilibre) la condition de commandabilité. Cette condition est rarement vérifiée par les systèmes physiques. Pour pallier à cet inconvénient, différents auteurs se sont intéressés à linéariser approximativement par feedback les systèmes non-linéaires.

Dans ce chapitre nous proposons d'étudier deux techniques de linéarisation approximative et exacte, à savoir le jacobien et la linéarisation exacte appliquées sur un modèle du réacteur chimique qui représente un système fortement non linéaire, donc il représente un bon modèle sur lequel nous pouvons tester les méthodes exactes et approximatives.

A l'aide de simulations sous MATLAB-Simulink, nous montrons que le réacteur chimique peut être linéarisé exactement. Une commande stabilisante calculée à partir de la linéarisation exacte est appliquée au modèle complet donne de très bons résultats.

III.1.1 Définitions

Soient f et g des champs de vecteurs de C^1 dans \mathbb{R}^n , le crochet de Lie résultant de f et g est un champ de vecteur donné par la relation :

$$[f, g] = \frac{\partial g}{\partial x} f - \frac{\partial f}{\partial x} g \quad (3.1)$$

Ou : $\frac{\partial f}{\partial x}$ et $\frac{\partial g}{\partial x}$ sont les matrices Jacobiennes de dimensions $(n \times n)$ de f et g respectivement.

On définit les crochets de Lie itérés, par la relation suivante :

$$ad_f^k g(x) = [f, ad_f^{k-1}g], k \in N^* \quad (3.2)$$

$$\text{Avec } ad_f^0 g(x) = g(x)$$

La dérivée de Lie d'une fonction $h(x)$ le long d'un champ de vecteur f de C_f , est donnée par l'expression suivante :

$$L_f h(x) = \langle dh, f \rangle$$

Une distribution $\Delta = \text{span}\{f_1 \dots f_r\}$ de classe C^∞

Dans IR^n est dite involutive si et seulement si :

$$\forall f_i, f_j \in \Delta, i \neq j: [f_i, f_j] \in \Delta \quad 1 \leq i, j \leq d$$

Les systèmes dynamiques non linéaires étudiés dans cet chapitre ont la forme suivante:

$$\dot{x} = f(x(t)) + \sum_{i=1}^m g_i(x(t))u_i \text{ et } y = h(x(t)) \quad (3.3)$$

$$\text{Ou: } x \in M \subset IR^n, u \in \Omega_1 \subset IR^m \text{ et } y \in \Omega_2 \subset IR^m$$

III.1.2 Degré relatif

Dans le cas des systèmes non linéaires mono variables, c'est à dire $m=1$, on dit qu'un système a un degré relatif r en x_0 , s'il vérifie les deux conditions suivantes:

$$i/L_g L_f^k h(x) = 0 \text{ pour tous } x \text{ voisin de } x_0 \text{ et } k < r - 1$$

$$ii/L_g L_f^{r-1} h(x_0) \neq 0$$

Donc le degré relatif d'une sortie est en fait l'ordre de dérivation minimale de la sortie nécessaire pour faire apparaître explicitement l'entrée.

III.2. Linéarisation Exacte Par Feedback

L'idée principale de la linéarisation exacte par feedback est de transformer les dynamiques d'un système non linéaire en dynamique linéaire à l'aide d'une commande par retour d'état et d'un changement de coordonnées sur l'état de système, de sorte que les techniques de contrôle linéaires peuvent être appliquées.

III.2.1 Linéarisation Exacte entrée sortie

Le problème de la linéarisation exacte entrée sortie est basé sur la recherche d'une transformation non linéaire qui transforme le modèle (3.1) en un modèle linéaire à l'aide d'une commande par retour état. La propriété de linéarité, dans ce cas, devrait être établie entre une nouvelle commande v et la sortie y .

Pour le cas des systèmes mono-variable, l'approche pour obtenir une relation linéaire entrée – sortie est de dériver successivement la sortie jusqu'à ce que l'entrée apparaisse, donc :

$$y = h(x);$$

$$\dot{y} = L_f h(x);$$

$$y^{(2)} = L_f^2 h(x);$$

.....

$$y^{(n)} = v; \text{ avec } v = L_f^n h(x) + L_g L_f^{n-1} h(x)u$$

Dans le cas où le système a un degré relatif $r=n$.

Si on pose $z = h(x)$ et $\dot{z}_i = z_{i+1}$ pour $i = 1, \dots, m - 1$, alors

Nous avons la forme canonique de BRUNOVSKY Suivante :

$\dot{z} = Az + bv$ ou (A, b) est sous la forme canonique de commandabilité de BRUNOVSKY.

Alors, le problème de linéarisation entrée sortie est résolu si et seulement si le système non linéaire (3.1) a un degré relatif r égal à n en x_0 .

Si on définit les distributions :

$$G_i = \text{span} \{ad_f^k g_j : 0 \leq k \leq i, 1 \leq j \leq m\} \text{ pour}$$

$0 \leq i \leq n - 1$, alors les conditions nécessaires et suffisantes pour qu'un système non linéaire soit linéarisable exactement par feedback sont données par le théorème suivant :

Théorème :

Étant donné le modèle non linéaire suivant :

$$\dot{x} = f(x) + g(x)u, \text{ ou } x \in \mathbb{R}^n, u \in \mathbb{R}^m \text{ avec le rang de } g(x) = m.$$

Le problème de linéarisation par feedback possède une solution si et seulement si :

i/ G_i a une dimension constante autour de x_0 pour chaque $0 \leq i \leq n - 1$

ii/ G_{n-1} a une dimension n

iii/ G_i est involutive pour tous $0 \leq i \leq n - 2$

III.3 Linéarisation Approximative par Feedback

Pour qu'un système physique soit linéarisable exactement par feedback, il doit vérifier la condition nécessaire et suffisante de commandabilité et, ce qui n'est pas le cas pour la plupart des systèmes non linéaires.

Pour cette raison plusieurs auteurs se sont intéressés à la linéarisation approximative par feedback, en cherchant des algorithmes où des techniques permettant de linéariser approximativement le système (3.3).

Dans ce chapitre, nous avons étudié deux méthodes de linéarisations approximatives: .La linéarisation par le jacobien, et l'algorithme de Hunt.

III.3.1 Linéarisation par le jacobien

La méthode de linéarisation formalise l'intuition qu'un système non linéaire se comporte de manière identique à son approximation linéaire autour d'un point d'équilibre. Elle constitue une justification de l'utilisation des techniques du contrôle linéaire.

Considérons un système forcé autonome tel que f est continument différentiable, alors le système dynamique peut s'écrire :

$$\dot{x} = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=0} x + \left(\frac{\partial f}{\partial u}\right)_{u=0} u + O(x, u), \text{ ou } O(x, u) \text{ contient les termes d'ordres élevés.}$$

$$A = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x=0} \text{ le jacobien de } f \text{ en } x = 0 \text{ et } B = \left(\frac{\partial f}{\partial u}\right)_{u=0}$$

Le système $\dot{x} = Ax + Bu$ est appelé linéarisation

(Ou approximation linéaire) du système non linéaire d'origine au point d'équilibre 0.

En pratique ; on néglige le plus souvent les termes d'ordre élevés.

III.3.2 Algorithme de Hunt, cas des systèmes SISO

Si le système (3.3) a un degré relatif égal à n dans le cas où la sortie est définie, ou s'il vérifie les conditions nécessaires de commandabilité et d'involutivité, alors ce système peut être transformé en un système linéaire écrit sous la forme canonique de commandabilité suivante :

$$\begin{bmatrix} \dot{z}_1 \\ \dot{z}_2 \\ \vdots \\ \dot{z}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ & & 0 & \ddots \\ & & & 0 \end{bmatrix} z + \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} v, \text{ ou } \dot{z} = Az + bv$$

Dans le cas contraire, où $r < n$, le système peut être transformé approximativement en un système linéaire donné par l'équation suivante :

$$\dot{z} = Az + Bv + O(x, u)^p \tag{3.4}$$

Où la partie linéaire est toujours écrite sous la forme canonique de commandabilité. Le système (3.4) est appelé le système linéaire d'ordre -1 d'après KRENER [1].

L'expression suivante peut être démontrée facilement

$$\langle dL_f^i z, g \rangle = O(x)^p, i = 0, \dots, n - 2 \quad (3.5)$$

$$L_f^{i-1} z_1 = z_i, 1, \dots, n - 1$$

$$v = L_f^{n-1} z_1 + L_g L_f^{n-2} z_1 u \quad (3.6)$$

Le but de cet algorithme est de déterminer la variable principale z_1 , une fois cette variable est déterminée, le reste des variables est déterminé par la dérivation successive de z_1 et la nouvelle commande est toujours donnée par la relation (3.6).

Pour déterminer la variable principale z_1 , nous avons appliqué un algorithme très simple à implémenter développé par HUNT et TURI donné comme suit :

Dans la première étape on écrit la variable principale sous la forme d'un polynôme homogène de degré 1, $\dot{x} = f(x) + g(x)u$

On suppose alors que le système est linéarisable au premier ordre, donc :

$$z_1 = \sum_{p=1}^n c_p x_p$$

Les constantes $c_p, p = 1, \dots, n$, sont déterminés à partir de l'équation

$$\langle dL_f^i z, g \rangle = O(x)^p, i = 0, \dots, n - 2 \quad (3.7)$$

Avec $p = 1$

En remplaçant z_1 par son expression, le système (3.7) devient

$$\langle dL_f^i z_1, g \rangle = O(x), i = 0, \dots, n - 2$$

L'étape suivante consiste à linéariser le système non linéaire initial à l'ordre 2, dans ce cas, la variable principale est décrite sous la forme suivante :

$$z_1 = \sum_{p=1}^n c_p x_p + \sum_{p,q=1}^n c_{pq} x_p x_q \quad (3.8)$$

Les constantes $c_p, p=1, \dots, n$ sont déterminées dans l'étape précédente, et les autres constantes c_{pq} sont choisies de telle manière que le système d'équations

$\langle dL_f^i z, g \rangle = O(x)^p, i = 0, \dots, n-2$ soit vérifié en remplaçant z_1 par son expression () avec $p=2$ à $d \langle dL_f^i z_1, g \rangle = O(x)^2, i = 0, \dots, n-2$

En répétant la même procédure jusqu'à l'étape dans cette étape, z_l est décrit par :

$$z_l = \sum_{p=1}^n c_p x_p + \sum_{p,q=1}^n c_{pq} x_p x_q + \dots + \sum_{|l|=1}^n c_{l_1 \dots l_n} x_l$$

Où $l = (l_1, \dots, l_n)$ désigne les multi-indices d'ordre

$$|l| = \sum_{i=1}^n l_i \text{ et } x_l = x_{l_1} x_{l_2} \dots x_{l_n}$$

Une fois la variable principale z_l est déterminée alors nous avons un système linéaire décrit sous la forme canonique de commandabilité.

III.4 : Application de la linéarisation par feedback sur le modèle CSTR :

Le modèle non linéaire du CSTR est le suivant :

$$\begin{aligned} \frac{dc_a}{dt} &= \frac{F}{V} (C_{ain} - C_a) - K_0 C_a \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \\ \frac{dT}{dt} &= \frac{F}{V} [T_0 - T] - \frac{K_0 C_a}{\rho C_p} (\Delta H) \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) + \frac{qc}{V} \left\{1 - \exp\left(\frac{-hA}{q_c \rho C_p}\right)\right\} (T_c - T) \end{aligned} \quad (3.9)$$

$Y=T$.

La commande est T_c : température de la chemise.

Le système a un degré relatif = $1 < n=2$, en plus il est singulier : donc la commande linéarisante par changement de base ne peut pas être appliquée, par contre on observe que lorsqu'on stabilise la température la concentration elle aussi se stabilise (suit le profil d'équilibre).

On a la 2^{ème} équation est sous la forme :

$$\dot{x} = f(x) + g(x)u$$

Pour avoir $\dot{x} = -k(x-r)$

Il suffit de poser $u = -\frac{f(x)+k(x-r)}{g(x)}$

$$f(x) = \frac{F}{V} [T_0 - T] - \frac{K_0 C_a}{p C_p} (\Delta H) \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) - \frac{q_c}{V} \left\{1 - \exp\left(\frac{-hA}{q_c p C_p}\right)\right\} T$$

$$g(x) = \frac{q_c}{V} \left\{1 - \exp\left(\frac{-hA}{q_c p C_p}\right)\right\}$$

$$\text{Donc } u = -\frac{\frac{F}{V} [T_0 - T] - \frac{K_0 C_a}{p C_p} (\Delta H) \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) - \frac{q_c}{V} \left\{1 - \exp\left(\frac{-hA}{q_c p C_p}\right)\right\} T + K(T-r)}{\frac{q_c}{V} \left\{1 - \exp\left(\frac{-hA}{q_c p C_p}\right)\right\}} \quad (3.10)$$

III.5 : Application de la linéarisation approximative sur le modèle CSTR :

On a la modèle CSTR suivant :

$$\frac{dc_a}{dt} = \frac{F}{V} (C_{ain} - C_a) - K_0 C_a \exp\left(\frac{-E}{RT}\right)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V} [T_0 - T] - \frac{K_0 C_a}{p C_p} (\Delta H) \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) + \frac{q_c}{V} \left\{1 - \exp\left(\frac{-hA}{q_c p C_p}\right)\right\} (T_{co} - T)$$

Le modèle linéaire du système CSTR près d'un point de fonctionnement :

$$(C_a = \bar{C}_a, T = \bar{T}, T_c = \bar{T}_c)$$

$$\left[\frac{d\Delta c_a}{dt}; \frac{d\Delta T}{dt} \right] = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta C_a \\ \Delta T \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1.0288483478 \end{bmatrix} \Delta T_{co}$$

$$A_{11} = - \left[\frac{F}{V} + K_0 \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \right]_{ss}$$

$$A_{12} = - \left[\frac{K_0 E}{RT^2} \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) C_a \right]_{ss}$$

$$A_{21} = - \left[\frac{(\Delta H) K_0}{p C_p} \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \right]_{ss}$$

$$A_{22} = - \left[\frac{F}{V} + \frac{(\Delta H) K_0 C_a}{p C_p} \frac{E}{RT^2} \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) + \frac{q_c}{V} \left\{1 - \exp\left(\frac{-hA}{q_c p C_p}\right)\right\} \right]_{ss}$$

Pour le point opérationnel P_1 :

$$(C_a = \bar{C}_a = 0.07155, T = \bar{T} = 436.3091, T_c = \bar{T}_c = 347.3867)$$

On aura :

$$\begin{aligned} \left[\frac{d\Delta C_a}{dt}; \frac{d\Delta T}{dt} \right] &= \begin{bmatrix} -13.700066593501262 & 0.002245831096906 \\ 2540.013520929934 & -1.242806775451 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta C_a \\ \Delta T \end{bmatrix} + \\ &\begin{bmatrix} 0 \\ 1.0288483478 \end{bmatrix} \Delta T_{c0} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Pour le point opérationnel P_2 :

$$(C_a = \bar{C}_a = 0.07194, T = \bar{T} = 438.7763, T_c = \bar{T}_c = 349.9006)$$

On aura :

$$\begin{aligned} \left[\frac{d\Delta C_a}{dt}; \frac{d\Delta T}{dt} \right] &= \begin{bmatrix} -12.586147110212197 & 0.002255010524830 \\ 2317.229644387537 & -1.239593836169 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta C_a \\ \Delta T \end{bmatrix} + \\ &\begin{bmatrix} 0 \\ 1.0288483478 \end{bmatrix} \Delta T_{c0} \end{aligned} \quad (3.12)$$

III.6 Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons deux commandes linéaires approximatives et exactes, notre objectif est de stabiliser un système fortement non linéaire en un point de fonctionnement qui satisfait le cahier de charge, en particulier, le problème de la commande de la température pour une classe générale des réacteurs chimiques a été adressé et résolu en utilisant la technique de la commande linéarisante. Un modèle non linéaire de réacteur a été employé pour synthétiser une loi de commande linéaire qui produit un signal de commande sur la base des mesures disponibles de la température et de la concentration seulement.

Chapitre IV

RÉSULTATS DE SIMULATION

IV.1 introduction :

Nous avons vu dans le chapitre précédent, l'aspect théorique de la commande linéarisante appliquée à un réacteur continue parfaitement agité(CSTR).en utilisant seulement les mesures disponibles, une commande a été extraite telle que la concentration et la température du produit d'intérêt, à la sortie du réacteur, sont stabilisés a un point de fonctionnement choisi. Dans le présent chapitre nous allons procéder à des simulations numériques, afin de valider cette loi de commande, son efficacité et ces performances.

IV.2 Résultats de simulation pour la linéarisation par feedback:

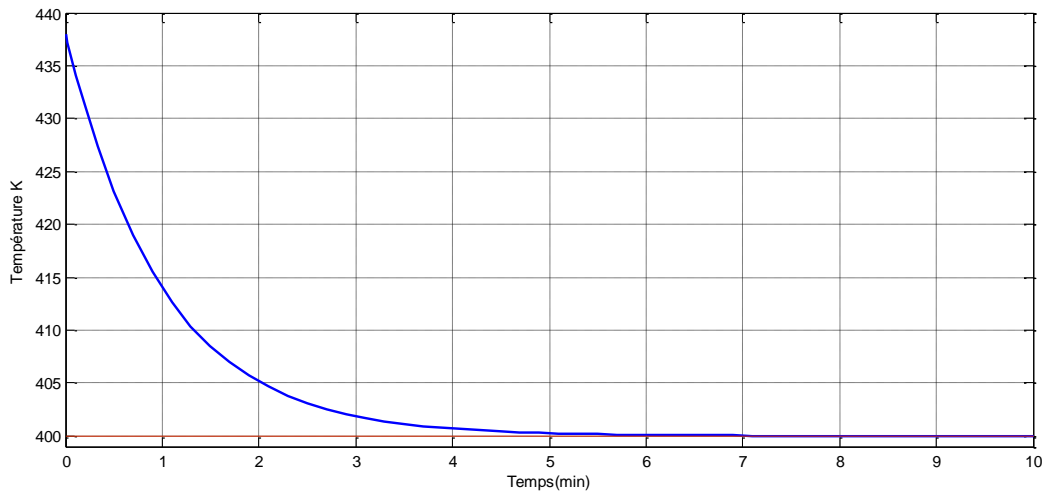


Figure (4.1) – Profil de température, cas $r=400$ K.

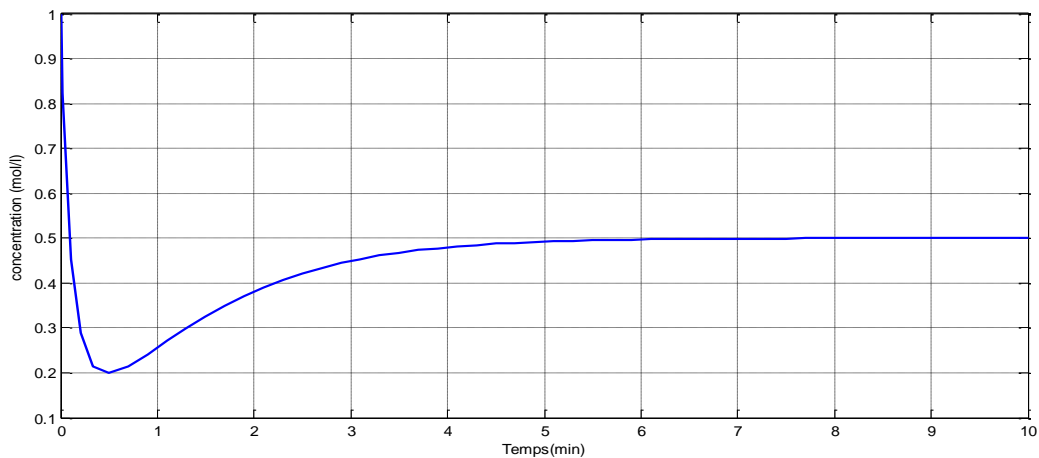


Figure (4.2) – Profil de concentration, cas $r=400$ K.

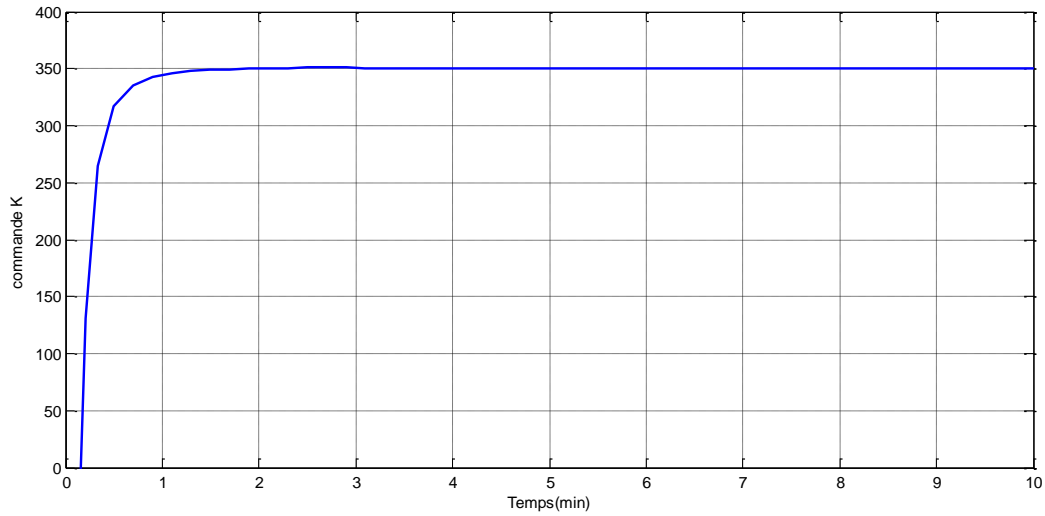


Figure (4.3) – Profil de la commande, cas $r=400$ K.

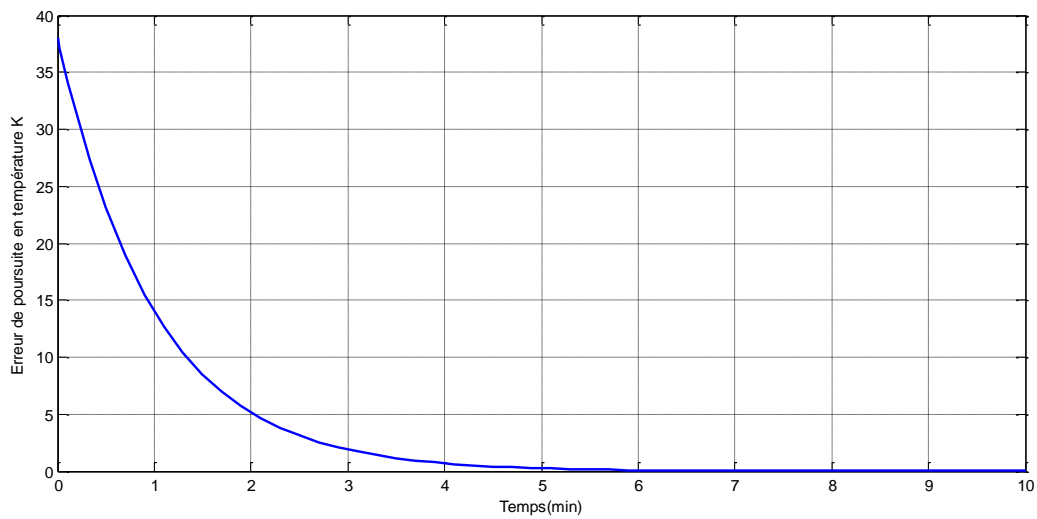


Figure (4.4) – Profil de l'erreur de poursuite en Température, cas $r=400$ K.

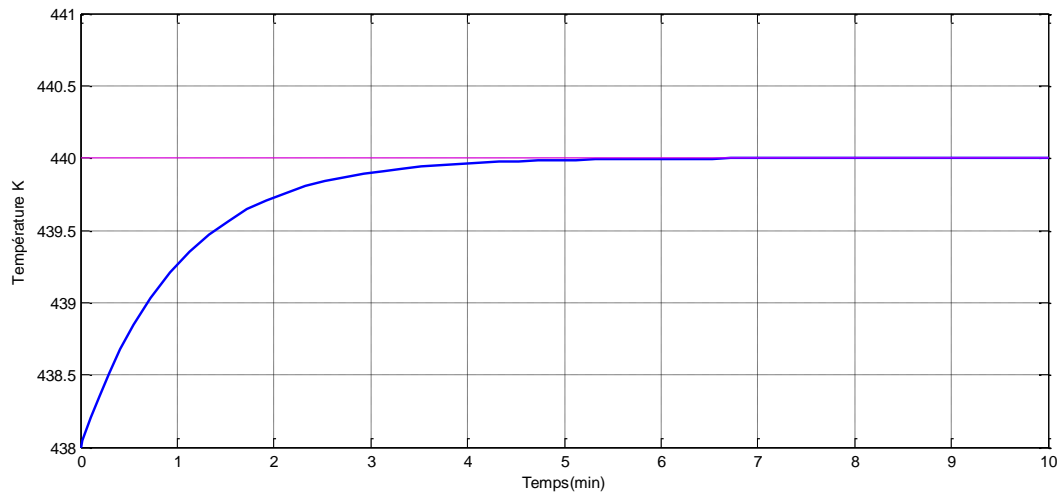


Figure (4.5) – Profil de température, cas $r=440$ K.

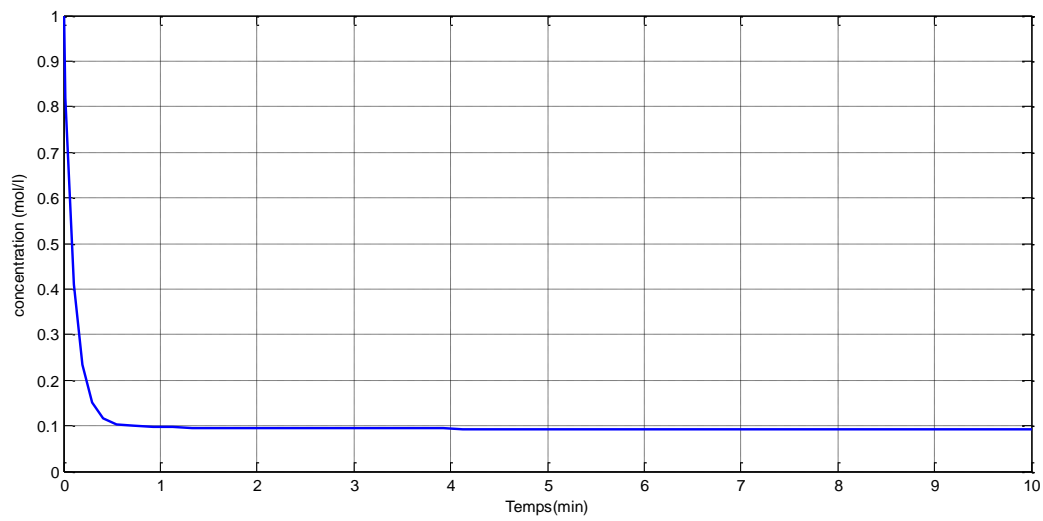


Figure (4.6) – Profil de concentration, cas $r=440$ K.

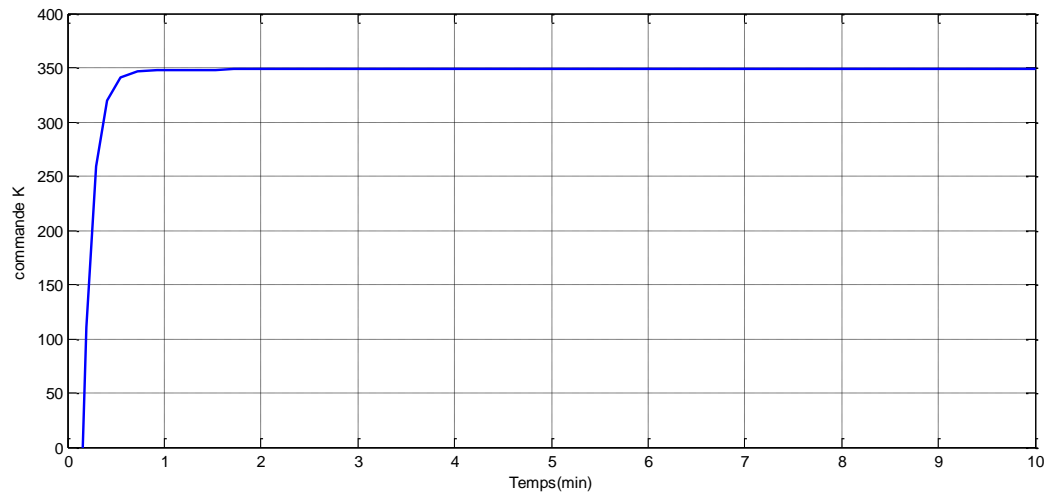


Figure (4.7) – Profil de la commande, cas $r=440$ K.

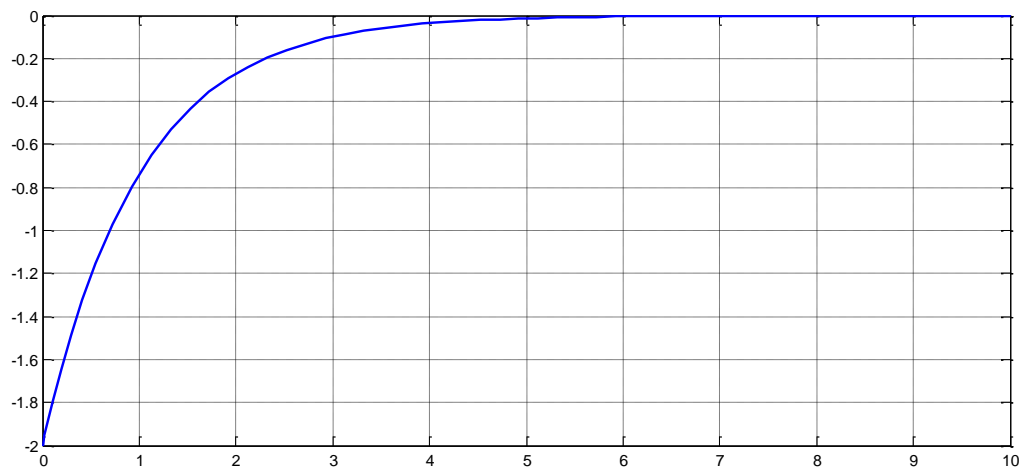
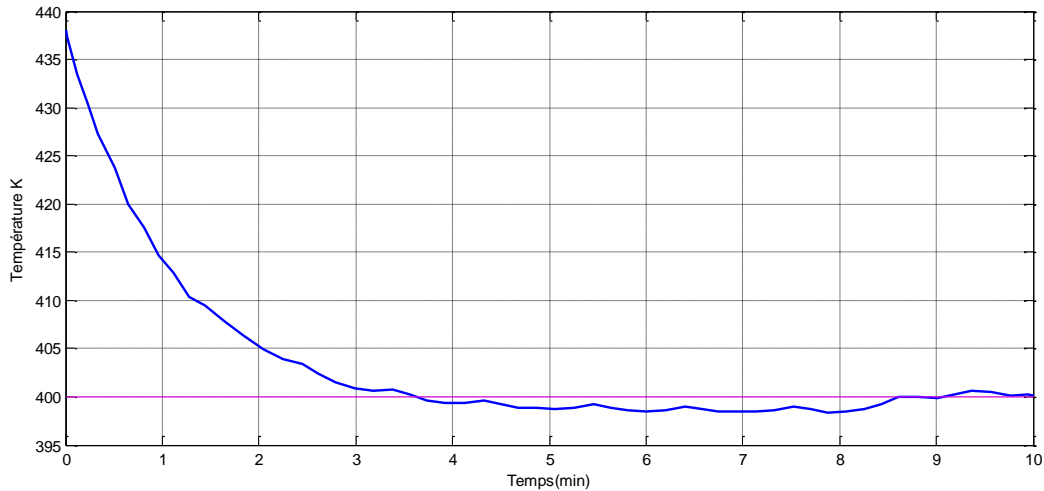


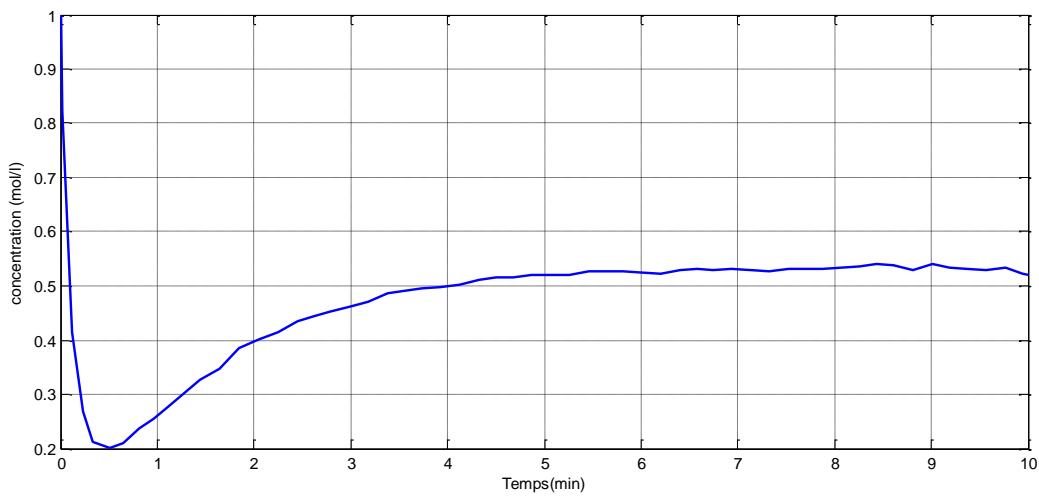
Figure (4.8) – Profil de l'erreur de poursuite en Température, cas $r=440$ K.

IV.2.2 Réponse aux perturbations :

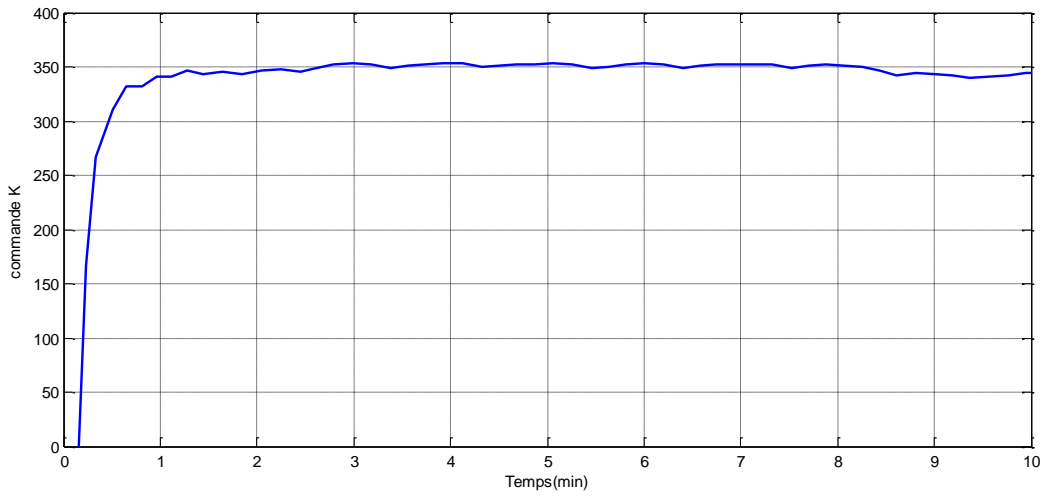
On fait une perturbation sur la commande u : un signal sinusoïdal d'amplitude 5 K et de fréquence 100 Hz.



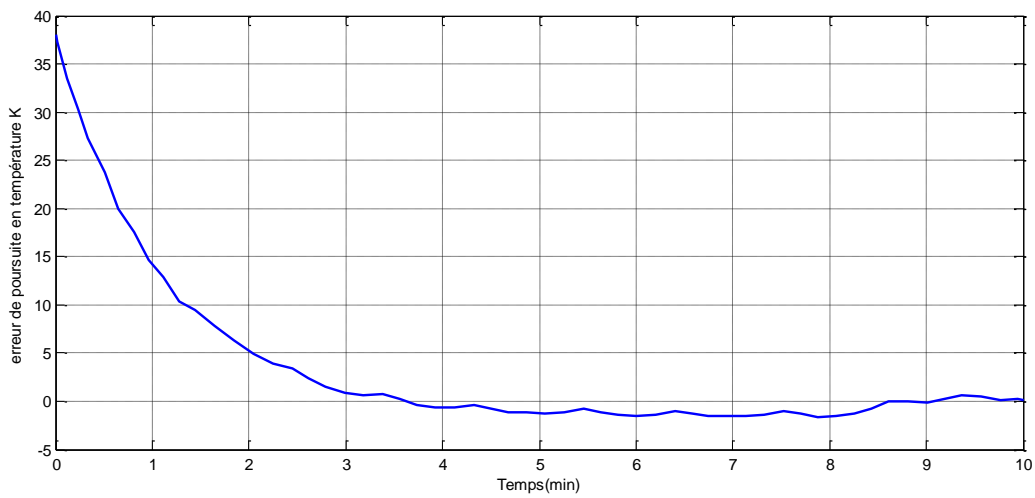
**Figure (4.9) – Profil de température, cas $r=400$ K.
Avec perturbation sur la commande.**



**Figure (4.10) – Profil de concentration, cas $r=400$ K.
Avec perturbation sur la commande.**



**Figure (4.11) – Profil de commande, cas $r=400$ K.
Avec perturbation sur la commande.**



**Figure (4.12) – Profil de poursuite en Température, cas $r=400$ K.
Avec perturbation sur la commande.**

IV.3 Résultats de simulation pour la linéarisation approximative :

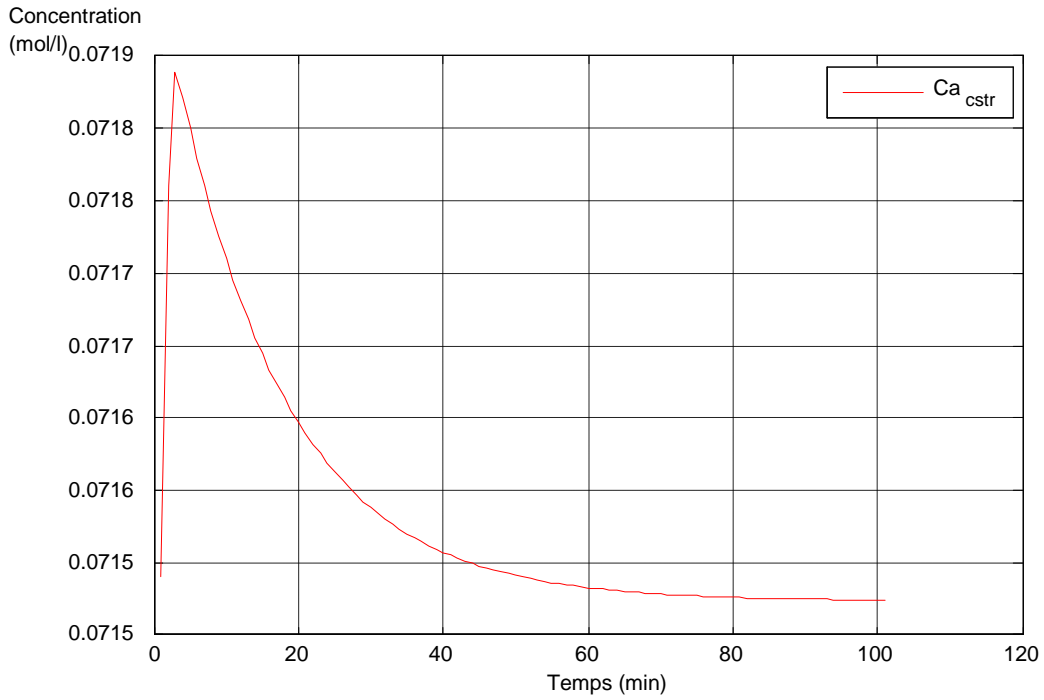


Figure (4.13) – Profil de concentration, le point de fonctionnement P_1 .

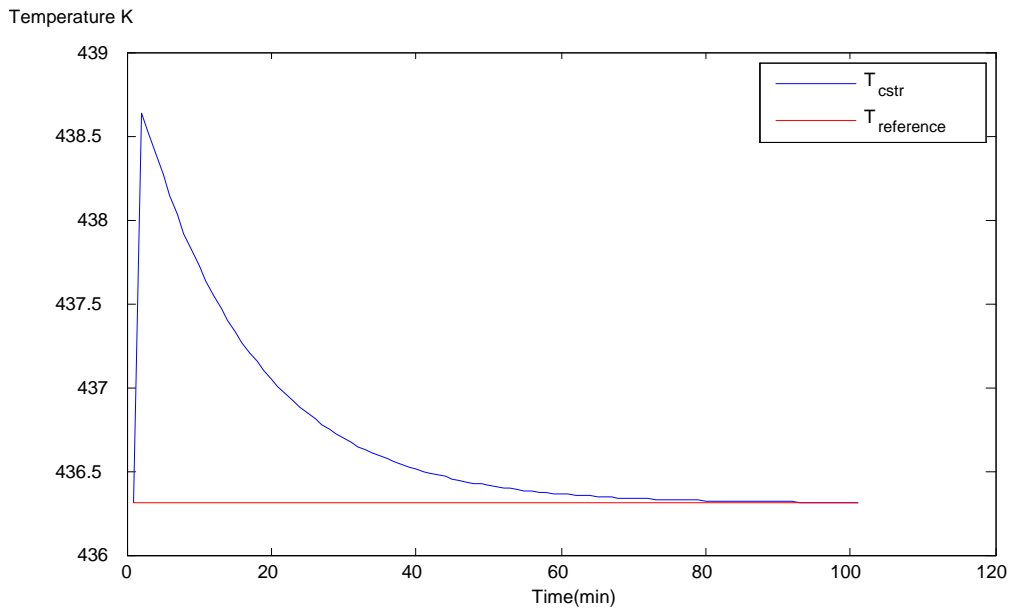


Figure (4.14) – Profil de température, le point de fonctionnement P_1 .

la commande K

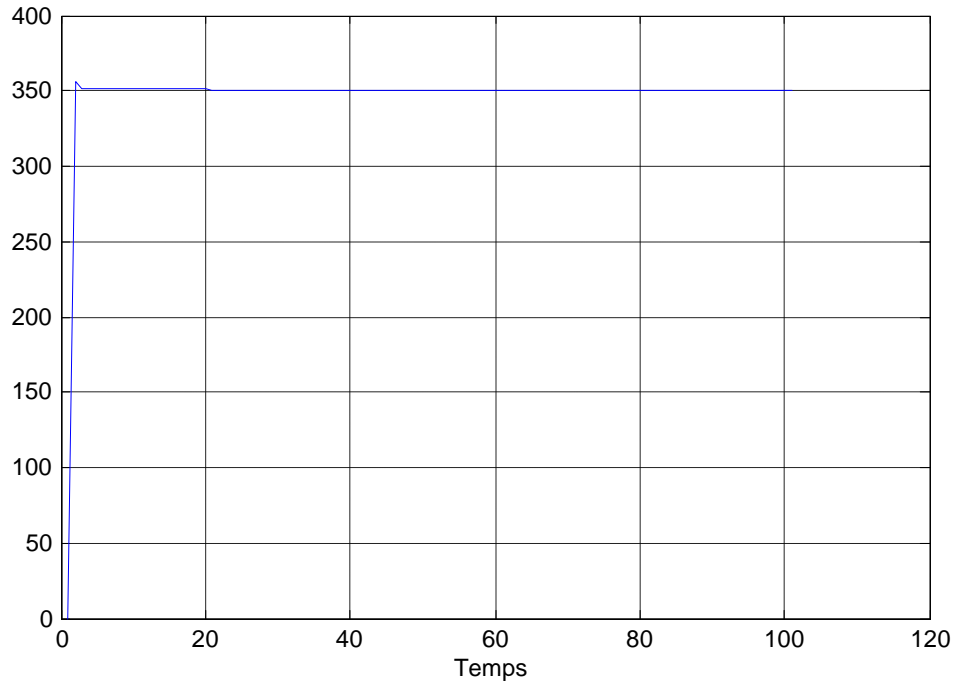


Figure (4.15) – Profil de la commande, le point de fonctionnement P_1 .

Erreur de poursuite en Température K

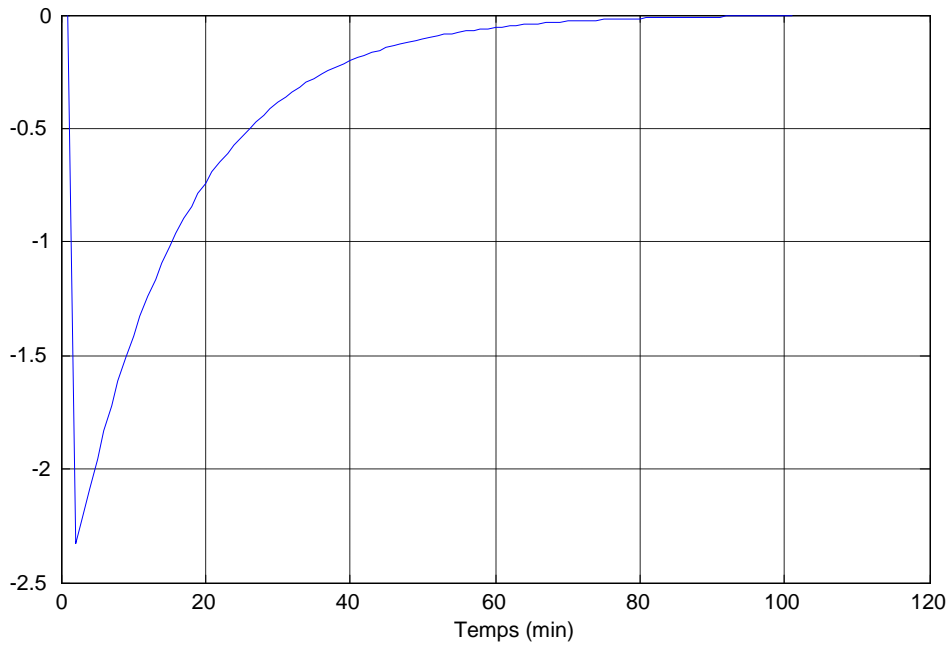


Figure (4.16) – Profil de l'erreur de poursuite en température, le point de fonctionnement P_1 .

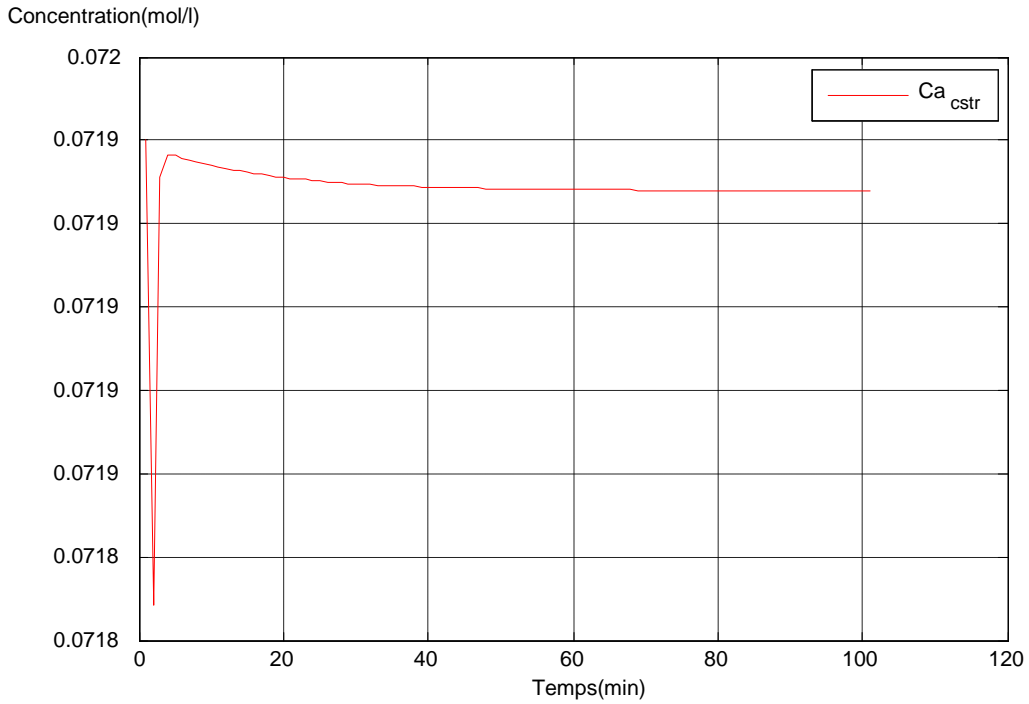


Figure (4.17) – Profil de concentration, le point de fonctionnement P_2 .

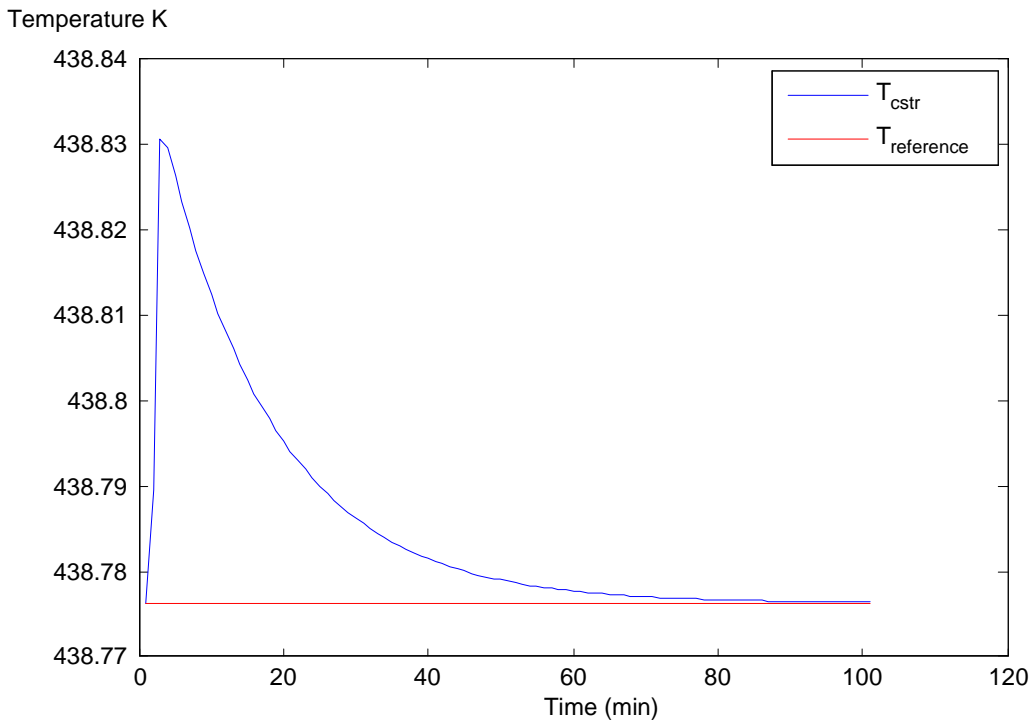


Figure (4.18) – Profil de Température, le point de fonctionnement P_2 .

la commande K

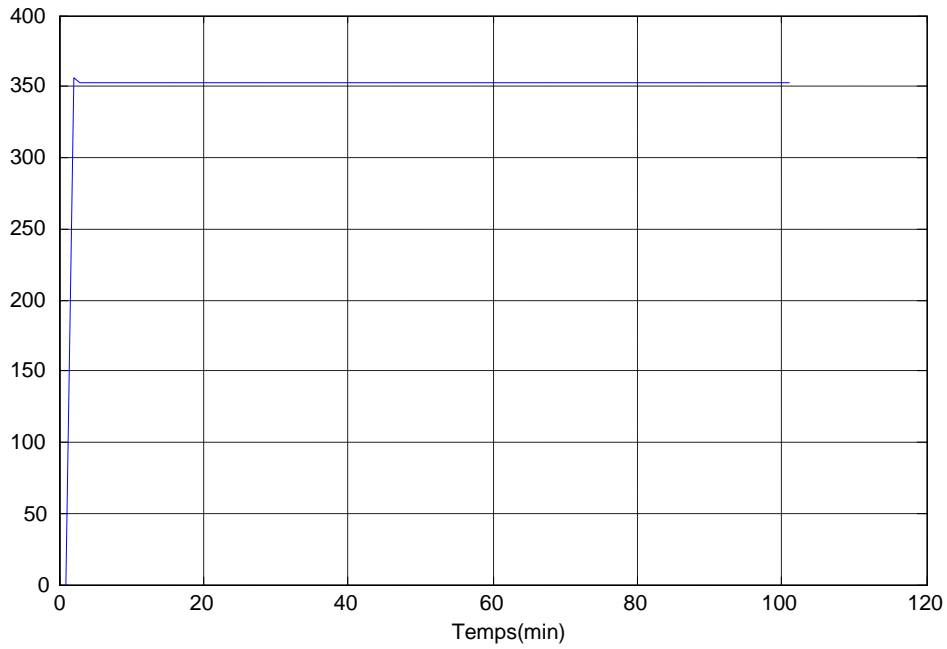


Figure (4.19) – Profil de commande, le point de fonctionnement P_2 .

Erreur de poursuite en Temperature K

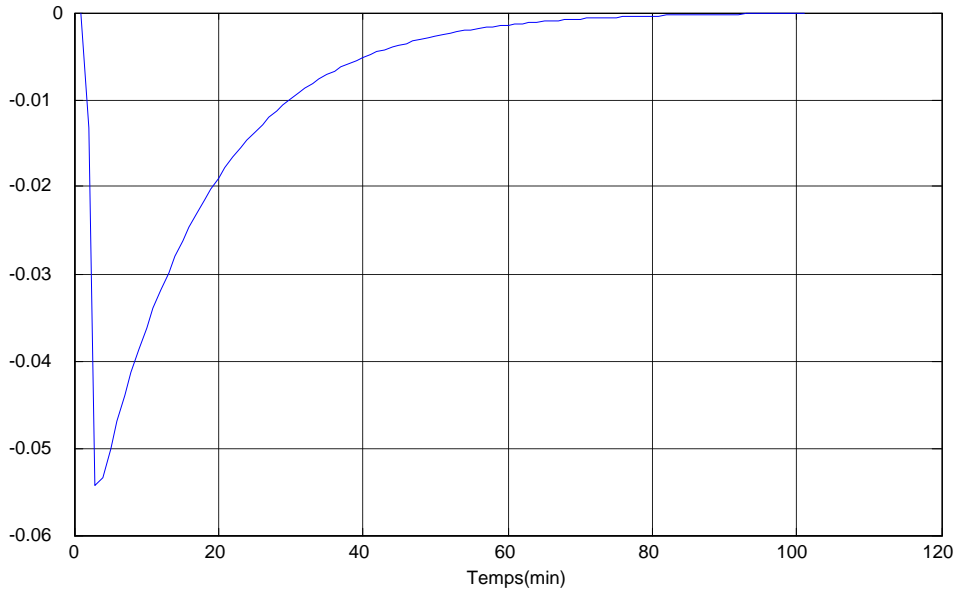


Figure (4.20) – Profil de l'erreur de poursuite en Température, le point de fonctionnement P_2 .

Commentaires :

La concentration restante du produit A dans le réacteur en régime permanent suit le profil d'équilibre.

La dynamique de la concentration dépend de la température, cette dynamique devient beaucoup plus rapide pour une petite augmentation de la température, on remarque qu'il y a un petit dépassement pour les dynamiques les plus lentes ($T \leq 430$ K), c'est dû à la différence entre la référence et la condition initiale et due essentiellement au facteur K qui influe sur la rapidité de convergence de la température et assure sa stabilité.

La température et la concentration sont influencées par une perturbation autour du point de fonctionnement, donc la commande linéarisante par retour d'état n'est pas robuste.

La réponse de température pour la linéarisation approximative est linéaire, elle augmente au début puis tend linéairement vers le point de fonctionnement, cette augmentation est due au retard de commande pour atteindre sa valeur désirée. Et le système reste toujours stable autour du point opérationnel choisit.

IV.4 Conclusion :

Nous avons vu d'après les différentes simulations effectuées dans ce chapitre, l'intérêt principal de l'application de la commande linéarisante qui est de stabiliser le réacteur chimique continu parfaitement agité (CSTR) à un point de fonctionnement choisit. Ces résultats montrent aussi que la commande linéarisante n'est pas une commande robuste par rapport aux perturbations.

Avec un simple feedback linéarisant on a pu stabiliser la température et évité que cette dernière augmente brusquement au début de la réaction, même si elle est exothermique, donc on a éliminé le danger de l'inflammation du milieu réactionnel.

Cette loi de commande est très efficace mais elle exige la très bonne connaissance précise des paramètres du système ainsi l'absence totale des bruits.

CONCLUSION

GENERALE

CONCLUSION GENERALE

L'objectif de ce mémoire était l'application d'une commande linéarisante sur un procédé chimique. L'idée maîtresse était de rechercher un point de fonctionnement de la concentration d'un certain produit d'intérêt à la sortie du réacteur.

La grande diversité des réacteurs chimiques nous a permis de mettre en évidence l'importance des modèles mathématiques phénoménologiques des différents types de processus chimiques. Cette modélisation nécessite une bonne compréhension des phénomènes thermodynamiques, de transfert de chaleur, et les mécanismes des réactions.

Notre projet s'est concentré autour du réacteur chimique continu parfaitement agité qui est un système à paramètres localisés et fortement non-linéaire. Dans le cadre de cette étude, l'expression des cinétiques de réaction était supposée inconnue et de ce fait, la conception d'une commande linéarisante a été réalisée.

La stabilité du système en boucle fermée a été démontrée en utilisant la théorie de stabilité de Lyapunov.

La technique de commande linéarisante a été testée et validée par des simulations numériques sur un exemple. Il a été montré que le choix du gain K était important pour la stabilité de la température ainsi que la rapidité de convergence de la concentration.

Annexe

CSTR :

Débit d'entrée $F = 100 \text{ L/Min}$; Concentration d'entrée $C_{ain} = 1 \text{ Mol/L}$;

Température d'entrée $T_0 = 350 \text{ K}$; Température de la chemise $T_{c0} = 350 \text{ K}$;

Volume du réacteur $V = 100 \text{ L}$; Terme de transfert de chaleur $h_a = 7 \times 10^5 \text{ Cal/}$
(min K) ;

Constante de réaction $k_0 = 7.2 \times 10^{10} \text{ Min}^{-1}$; activation $E/R = 10^4 \text{ K}$;

Taux de génération $\Delta H = -2 \times 10^5 \text{ Cal/Mol}$; Masse volumique $\rho = 10^3 \text{ g/L}$;

Capacité calorifique $C_p = 1 \text{ Cal/ (g K)}$; Débit dans la chemise $q_c = 100 \text{ L/Min}$;

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [ANT-03] Antonelli, R., Astolfi, A., 2003. Continuous stirred tank reactors: easy to stabilise ? *Automatica* 39 (10), 1817-1827.
- [ARI-03] ARIYUR, K. B., KRSTIC, M., 2003, Real-Time Optimization by Extremum-Seeking Control, John Wiley and Sons.
- [AST-89] Astrom K.J., Wittenmark, B., 1995. Adaptive control. Second edition. Addison-Wesley.
- [BEL-04] Belhout., A., , 2004. Commande extrémale adaptative appliqué au bioréacteur. Projet de Fin d'Etudes, Ecole Nationale Polytechnique d'Alger.
- [BOU-13] Boudali M,T & Meguenni M,S,I 2013 Thèse « commande non linéaire appliquée au réacteur chimique CSTR » Ecole Nationale Polytechnique d'Alger.
- [BOU-11] Boussahel M,W & Bouitaoune M 2011 Thèse « commande extrémale adaptative appliqué au réacteur chimique » Ecole Nationale Polytechnique d'Alger.
- [GUA-02] Guay, M. and T. Zhang, 2002. Adaptive extremum seeking control of nonlinear systems with parametric uncertainties. *Proc. IFAC World Congress, Barcelona* pp. 475–481.
- [GUA-04] Guay, M., Dochain, D. and Perrier, M., 2004, Adaptive Extremum Seeking Control of Nonisothermal Continuous Stirred Tank Reactors. *Chemical Engineering Science* 60, 3671-3681.
- [HUD-04] Hudon, N., Perrier, M., Guay, M., Dochain, D., 2004. “Adaptive Extremum Seeking of Nonisothermal Tubular Reactor,” in *Proceedings of the 43rd IEEE Conference of Decision and Control*, Paradise Island, Bahamas.

BIBLIOGRAPHIE

- [KHA-07] Khaled, A., R., 2007. Contribution de l'outil bond graph pour la modélisation des réacteurs chimiques en vue de leur supervision. Thèse de Doctorat, Université de Lille 1.
- [KRS-95] Krstic, M., Kanellakopoulos, I., Kokotovic, P., 1995. Nonlinear and Adaptive Control Design, John Wiley and Sons.
- [LAD-95] Ladaci, S., 1995. Commande extrémale d'un moteur à allumage commande d'automobile. Projet de fin d'Etudes, Ecole Nationale Polytechnique d'Alger.
- [LAT-02] M.latfaoui & B.cherki linéarisation approximative par feedback pour un modèle de pendule inversé, Laboratoire d'automatique de tlemcen, Faculté des sciences de l'ingénieur- Université abou bakr belkaid -Tlemcen
- [LEL-00] Leleu, R., 2000. Transferts de chaleur, document techniques de l'ingénieur.
- [LUY-07] Luyben, W., L., Chemical Reactor Design and Control, 2007, John Wiley and Sons.
- [LUY-99] Luyben, W., L., 1999. Process modelling, simulation and control for chemical engineers, Second edition, McGrawHill.
- [MAR-87] Maret L., 1987. Régulation automatique, Ed Presses polytechnique Romandes.
- [NAU-08] Nauman, E., B., 2008. Chemical Reactor Design, Optimization, and Scaleup , 2nd edition, John Wiley and Sons.
- [OUA-03] Ouahes., R., Devallez., B., édition 2003. Chimie générale. Office des Publication Universitaires.
- [PET-95] Petros, A., 1995. Robust adaptive control, Edition Prentice Hall.
- [SPO-02] Spooner, J., T., Maggiore, M., Ordonez, R., Passino, K., M., 2002. Stable adaptive control and estimation for nonlinear systems: neural and fuzzy approximator techniques, John Wiley and Sons.
- [TAD-11] Tadjine, M.,2011. Cours d'Automatique Avancée, cours cinquième année, Ecole Nationale Polytechnique d'Alger.

BIBLIOGRAPHIE

- [TIT-03] M. Titica, D. Dochain, and M. Guay, 2003. Adaptive extremum-seeking control of fed-batch bioreactors. *European Journal of control*, 9614-627.
- [TRA-96] Trambouze, P., 1996. *Technologie des réacteurs chimiques, document techniques de l'ingénieur.*
- [VIV-14] Viverk A, Manish G, Umesh G, Rahul S , A model predictive controller using multiple linear models for continuous stirred tank reactor (CSTR) and its implementation issue, dep of electrical and electronic engineering, Hindson college of science & technology, Mathura, up,India
- [VIL-96] Villermaux, J., 1996. *Les réacteurs chimiques, document techniques de l'ingénieur.*
- [WEL-00] Wellstead, E., P., 2000. *Introduction to physical system modeling*, Academic Press Ltd.
- [ZHA-03] Zhang, T., Guay, M., Dochain, D., 2003, Adaptive Extremum Seeking Control of Continuous Stirred-Tank Bioreactors, *AIChE Journal* 49(1), 113-123.