REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique *Ecole Nationale Polytechnique*



وزارة التعليم العال والبحث العلم والبحث المتعددة التقنيات

DEPARTEMENT D'AUTOMATIQUE

PROJET DE FIN D'ÉTUDES

En vue de l'obtention du diplôme d'Ingénieur d'Etat en Automatique

Thème :

COMMANDE NON-LINEAIRE

APPLIQUEE A UN REACTEUR CHIMIQUE CSTR

Présenté par : BOUDALI Mohamed Taha

Dirigé par : Dr R. ILLOUL

MEGUENNI Mohamed Seif El-Islam

Juin 2013

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

ملخص:

والهدف من هذا العمل هو الاستفادة من المنهجيات والأدوات للنظرية Lyapunov في تصميم قوانين مراقبة يحدها لتثبيت درجة الحرارة من فئة من المفاعلات المستمر خزان مثار CSTR مع التفاعلات الطاردة للحرارة أو ماص للحرارة. وهذه القوانين لمراقبة ردود الفعل بسيطة، أي أن قوانين مراقبة ردود الفعل تتطلب فقط القياسات المتوفرة، فقد تم تصميم وتبين أن هذه وحدات تحكم تحقق الاستقرار الشامل ومقارب لا تتطلب معرفة دقيقة معلمات النظام. وتناقش أيضا قدرات الطريقة المقترحة للتعامل مع مراقبة المدخلات القيود والشكوك نموذج. استكمال تحليل حالة دراسة:

الكلمات المفتاحية : المفاعلات الكيميائية; درجة الحرارة لتحقيق الاستقرار; إدخال قيود الانتاج; مرتبطة مراقبة التغذية المرتدة.

Résumé :

L'objectif de ce travail est d'utiliser des méthodologies et des outils de la théorie de lyapunov dans la conception des lois de commande non-linéaires bornées pour stabiliser la température d'une certaine classe de réacteurs : réacteur continu parfaitement agité CSTR, aves des réactions exothermiques ou endothermiques. L'avantage de l'application de ce type de lois de commande c'est qu'on n'utilisant que les mesures disponible, et plus précisément que les mesures de la température dans notre travail. La stabilité asymptotique globale du système est obtenue sans la nécessité de la connaissance précise des paramètres du système, et elle vérifié par le théorème de lyapunov. Les capacités de la méthode proposée pour gérer les contraintes d'entrée de commande et des incertitudes du modèle sont également discutées. Le travail est complété par l'analyse d'une étude de cas: le mécanisme de réaction van der Vusse.

Les mots clés : Réacteurs chimiques CSTR, stabilité de Lyapunov, températue de stabilisation, commande non-linéaire bornée.

Abstract

The objective of this work is to make use of methodologies and tools from Lyapunov theory in the design of bounded control laws for the temperature stabilisation of a class of continuous stirred tank reactors with exothermic or endothermic 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 asymptotic stability and do not require precise knowledge of the system parameters. The capabilities of the proposed method to handle control input constraints and model uncertainties are also discussed. The work is completed with the analysis of a case study: the van der Vusse reaction mechanism.

Keywords: Chemical reactors; Temperature stabilisation; Input constraints; Bounded output feedback control.

i

DEDICACES

Nous dédions ce modeste travail :

A nos très chers parents, qui par leur sacrifices et patience, nous ont toujours permis de persévérer

A nos très chers frères et sœurs

A tous nos amis

Taha Seíf El Islam

REMERCIEMENTS

Nous remercions avant tout **Allah**, le tout puissant, pour nous 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 notre chemin, tout au long de ce travail.

Nous tenons à remercier chaleureusement notre promoteur Monsieur **Rachid Illoul**, Docteur à l'Ecole Nationale Polytechnique d'Alger, d'avoir proposé et dirigé ce travail. Nous sommes très reconnaissants pour toute l'aide et confiance qu'il nous a toujours témoignés.

Nous remercions le président et les membres du jury d'avoir accepter d'évaluer ce travail.

Nous remercions nos enseignants de l'Ecole Nationale Polytechnique pour leurs efforts voués à nous transmettre le savoir, en particulier ceux du département d'automatique.

Nous tenons à exprimer notre très grande gratitude, et notre profonde affection à nos chers parents pour leurs encouragements, leur patience et leur grand soutien, durant toutes ces années d'études.

Nous remercions également tous nos amis et camarades, pour leurs encouragements et leur précieux soutien.

SOMMAIRE

Listes des tableaux et figures	vii
Liste des abréviations	ix

INTRODUCTION GENERALE

CHAPITRE I : Généralités sur les réacteurs chimiques

I.1	Introduction aux réacteurs chimiques	4
I.2	Critères de classification	5
I.:	2.1 La nature et le nombre de phases	5
I.:	2.2 Le mode de fonctionnement du réacteur	6
	I.2.2.a Réacteurs fermés (Batch)	6
	I.2.2.b Réacteurs semi-continus (Fed-Batch)	7
	I.2.2.c Réacteurs continus	9
I.	2.3 Le mode d'activation de la réaction	12
I.3	Classes des réacteurs chimiques	13
I.4	Comparaison des divers types de réacteurs	14
I.5	Conclusion	16

CHAPITRE II : Modélisation des réacteurs chimiques

II.1 Introduction	17
II.2 Modèles des réacteurs chimiques	17
II.2.1 Modèles empiriques	18
II.2.2 Modèles phénoménologiques	18
II.3 Notions de thermochimie	19
II.3.1 Premier principe de la thermodynamique	20
II.3.2 Aspect thermique des réactions chimiques	22
II.3.2.1 Réactions exothermiques	22
II.3.2.2 Réactions endothermiques	23
II.4 Vitesse et mécanismes des réactions	23

II.4.1 Cinétique des réactions élémentaires	
II.4.2 Influence de la température : loi d'Arrhenius	
II.5 Transfert de chaleur	27
II.5.1 Transfert par conduction	27
II.5.1.a Loi de Fourier	
II.5.2 Transfert par convection	
II.5.3 Transfert par rayonnement	
II.6 Modélisations des réacteurs chimiques continus	
II.6.1 Modélisation du réacteur parfaitement mélangé (CSTR)	
II.6.1.1 Bilan de matière	
II.6.1.2 Bilan d'énergie	
II.7 Simulation du réacteur parfaitement mélangé en boucle ouverte	
II.7.1 Commentaires	40
II.8 Profils d'équilibre	40
II.9 Conclusion	

CHAPITRE III : Commande non-linéaire borneé

III.1 Introduction	44
III.2 Position du problème	44
III.3 Hypothèses principales	46
III.4 Résultat préliminaire	49
III.5 Résultats principales	51
III.5.1 Stabilisation par la commande de la chaleur u :	50
III.5.2 Stabilisation par la commande de la chaleur u et la température d'alimentation T^{in}	
III.5.3 Stabilisation par la commande de la chaleur <i>u</i> et le taux de dilution <i>d</i> :	56
III.6 Conclusion	

CHAPITRE IV : Résultats de simulations

IV.1	Introduction	.60
IV.2	Description de la réaction	.60
IV.3	Simulations des commandes appliquées au réacteur chimique	61
IV	.3.1 commande par la chaleur <i>u</i>	.62
IV	.3.2 Commande par la chaleur <i>u</i> et la température d'alimentation <i>Tⁱⁿ</i>	.65

IV.3.3 Commande par la chaleur u et le taux de dilution d	70
IV.3.4 Analyse des résultats de simulation	74
IV.3.5 Régulation par PID	75
IV.4 Conclusion	77
CONCLUSION GENERALE	79
Annexe	80
Références bibliographiques	81

LISTE DES TABLEAUX

Tableau (1.1) - Exemple de classes de réacteurs	14
Tableau (4.1) - Paramètres de simulation – réaction Van de Vusse	61

LISTE DES FIGURES

Figure (4.1) - Profil de la température de l'enveloppe pour la 1^{ere} commande u	62
Figure (4.2) - Profil de la température du réacteur T pour la 1 ^{ère} commande u	63

Figure (4.3) - Profil de la commande θ pour la 1 ^{ère} commande u	63
Figure (4.4) - Profil de la concentration x_1 pour la 1 ^{ère} commande u	64
Figure (4.5) - Profil de la concentration x_2 pour la 1 ^{ère} commande u	64
Figure (4.6) - Profil de la température de l'enveloppe T_j pour la 2 ^{ème} commande u et T^{in}	66
Figure (4.7) - Profil de la température du réacteur T pour la 2 ^{ème} commande u et T^{in}	66
Figure (4.8) - Profil de la commande θ pour la 2 ^{ème} commande u et T^{in}	67
Figure (4.9) - Profil de la commande T^{in} pour la 2 ^{ème} commande u et T^{in}	67
Figure (4.10) - Profil de la commande γ pour la 2 ^{ème} commande u et T^{in}	68
Figure (4.11) - Profil de la concentration x_1 pour la 2 ^{ème} commande u et T^{in}	68
Figure (4.12) - Profil de la concentration x_2 pour la 2 ^{ème} commande u et T^{in}	69
Figure (4.13) - Profil de la température de l'enveloppe T_j pour la 3 ^{ème} commande u et d	70
Figure (4.14) - Profil de la température du réacteur T pour la 3 ^{ème} commande u et d	71
Figure (4.15) - Profil de la commande θ pour la 3 ^{ème} commande u et d	71
Figure (4.16) - Profil de la commande d pour la 3 ^{ème} commande u et d	72
Figure (4.17) - Profil de la concentration x_1 pour la 3 ^{ème} commande u et d	72
Figure (4.18) - Profil de la concentration x_2 pour la 3 ^{ème} commande u et d	73
Figure (4.19) - Profil de la concentration x_2 , pour les trois commandes	74
Figure (4.20) - Profil de la concentration x_2 par PID	76
Figure (4.21) - Profil de la concentration <i>u</i> par PID	76

LISTE DES ABREVIATONS

Abréviation	Signification	Unité
U	Energie interne	kJ.mol ⁻¹
W	Travail	$kJ.mol^{-1}$
Q	Chaleur	$kJ.mol^{-1}$
Р	Pression	Pascal
Н	Enthalpie	$kJ.mol^{-1}$
Т	Temps	h
m	Masse	kg
C_p	Chaleur spécifique moyenne	$kJ.kg^{-1}.K^{-1}$
Т	Température	K
T _{in}	Température d'alimentation	K
T_j	Température de l'enveloppe	K
V	Volume du réacteur	1
ρ	Masse volumique	kg.l ⁻¹
v	Vitesse de réaction	mol. 1^{-1} .h ⁻¹
${\mathcal R}$	Taux de génération	mol. $l^{-1}.h^{-1}$
$\mathbf{k_0}$	Facteur pré-exponentiel	dépend de la réaction
E_0	Energie d'activation	kJ.mol ⁻¹
R	Constante des gaz parfaits	kJ.mol ⁻¹ .K ⁻¹
x_{in}	Concentration d'alimentation	mol. 1^{-1}
[A]	Concentration du produit A	mol. 1^{-1}
U_{in}	Vecteur des concentrations d'alimentation	mol. 1^{-1}
$\pi(T)$	Profil d'équilibre	mol. 1^{-1}
n	Nombre de moles	mol
A_r	Surface d'échange	m^2
$\mathbf{k}_{\mathbf{w}}$	Coefficient spécifique à la paroi	$kJ.h^{-1}.m^{-2}.K^{-1}$
F	Débit du fluide	$1.h_{.}^{-1}$
d	Taux de dilution	\mathbf{h}^{-1}
С	Matrice stœchiométrique	sans unités
$r(x^r,T)$	Matrice des cinétiques	mol. l^{-1} . h_{-1}^{-1}
H_r	Vecteur des enthalpies	$K.l.mol^{-1}$
u	Commande	kJ.min ⁻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 de stabiliser le réacteur chimique continu parfaitement agité à son point d'opération optimal par une commande non-linéaire bornée, en utilisant que les mesures disponibles. La stratégie de commande utilisée est de contrôler le système en introduisant des entrées supplémentaire pour compenser les conditions limites de l'échange thermique quand une réaction fortement exothermique aura lieu.

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 non-linéaire bornée.

Le troisième chapitre développera des commandes basées sur la théorie de Lyapunov pour concevoir des lois de commande non-linéaires bornées afin de stabiliser le réacteur continu parfaitement agité cette partie se base sur les travaux de l'équipe de recherche de R. Antonelli, A. Astolfi sur la commande des réacteurs chimiques[ANT-03].La première partie du chapitre abordera la formulation du problème; Principalement, il s'agit, à partir du modèle dynamique du réacteur continu parfaitement agité d'explorer le problème des mesures disponibles pour faire la commande.

Ensuite, le mémoire présentera le développement d'une commande basée sur le théorème de stabilité de Lyapunov.

Le quatrième chapitre sera constitué de simulations sur la réaction van der Vusse. Ces différentes simulations, nous aideront à mieux cerner les avantages de chacune des lois de commande non-linéaire bornée, du point de vue performance et productivité.
Enfin on fait une comparaison entre ces commandes et la régulation par PID.

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

I.2 Critères de classifications :

Même si ce type d'appareils apparaît comme un composant industriel complexe, on peut toutefois définir un certain nombre de critères de classification en se référant aux caractéristiques les plus apparentes à l'échelle macroscopique. En effet, ces critères de classification vont nous permettre de définir un ensemble de catégories de réacteurs et identifier ainsi un quelconque réacteur selon ces caractéristiques pour le classer sous la catégorie appropriée.

Dans ce sens, les critères de classification à l'échelle macroscopique d'un réacteur chimique sont définis comme suit: le nombre et la nature des phases en présence; le mode de fonction du réacteur; le mode d'activation et de la transformation chimique [VIL-96].

I.2.1 La nature et le nombre des phases en présence :

Ce critère concerne l'état physique du mélange réactionnel. On peut distinguer deux types de réacteurs suivant ce critère :

- a) Réacteurs monophasiques: où le mélange réactionnel (considéré homogène) est alors sous forme d'une seule phase qui peut être gazeuse ou liquide.
- b) Réacteurs polyphasiques: appelés aussi réacteurs hétérogènes, le mélange réactionnel est constitué de plusieurs phases. On distingue deux types de mélanges :
 - 1- Mélanges polyphasiques composés de trois phases : Gaz + Liquide+Solide.
 - 2- Mélanges polyphasiques composés de deux phases appelés aussi mélanges biphasiques.

où on peut rencontrer les combinaisons suivantes :

- Gaz + Liquide.
- Gaz + Solide.
- Liquide + Solide.

Cependant, dans le cas où la phase solide est présente, il faut faire la distinction entre les cas où le constituant solide impliqué dans la réaction sert de catalyseur et ne prend donc pas part à la réaction, et ceux où les constituants solides présents prennent part à la transformation et sont de ce fait des réactifs ou des produits de la réaction.

I.2.2 Le mode de fonctionnement du réacteur :

Ce critère dépend de la construction interne du réacteur et de l'écoulement du mélange réactionnel. En effet, ce sont les exigences pratiques d'exploitation de l'installation qui déterminent le choix du mode de fonctionnement pour accomplir un processus désigné. Ainsi, on a le choix entre différents modes de fonctionnement.

On se base sur un critère de classification lié au mode d'écoulement du mélange réactionnel, on distingue alors : les réacteurs fermés; les réacteurs semi continus; les réacteurs continus;....etc.

I.2.2.a Réacteurs fermés (BATCH) :

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) : Opération discontinue : différentes phases.

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.2.2.b Réacteurs semi continus : (FED BATCH)

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) : Opération semi-continue : différentes phases

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.2.2.c Réacteurs continus :

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 (1.5) : Opération continue : modèles idéaux d'écoulement d'une phase à travers un appareillage

1. 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.

2. 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.2.3 Mode d'activation de la réaction :

Ce critère de classification dépend du déroulement de la réaction. Ainsi pour stimuler la réaction et augmenter sa vitesse, deux facteurs peuvent influencer la réaction: les catalyseurs et la thermicité de la réaction.

Les catalyseurs :

Pour augmenter la vitesse d'une réaction et améliorer ainsi la productivité d'un procédé, les catalyseurs chimiques sont souvent utilisés pour interagir avec les molécules des réactifs et accélérer leur transformation afin de diminuer le temps de séjour des particules dans le réacteur. Ces catalyseurs peuvent être sous forme de : particules solides (largement utilisés en génie des procédés), liquides, ions, enzymes,etc. Par rapport à ce critère de classification on a deux types de réacteurs:

- a) Réacteurs catalytiques : dans lesquels le catalyseur est déjà présent dans le mélange réactionnel sous forme suspendue, ou fixé par un dispositif incorporé dans le réacteur appelé un lit.
- b) Réacteurs non catalytiques: tous les constituants du mélange réactionnel sont impliqués dans le processus de transformation sauf les constituants considérés comme solvant ou substances inertes.

Thermicité de la réaction :

La plupart des réactions chimiques rencontrées en pratique sont caractérisées par la consommation ou le dégagement de chaleur. Ces réactions sont désignées respectivement par "réactions endothermiques" ou "réactions exothermiques". Ce facteur lié directement à toute transformation chimique a même une influence sur la cinétique de la réaction, d'où l'intérêt d'équiper le réacteur de dispositifs d'échange thermique capables de transférer ou non la chaleur correspondante dans le sens désiré. On distingue ainsi deux cas particuliers de réacteurs selon ce critère de classification à savoir :

- a) Réacteurs adiabatiques : souvent rencontré dans l'industrie, ils constituent simplement un cas particulier du cas général correspondant à une surface d'échange nulle entre le réacteur et le milieu extérieur, autrement dit il n'y a pas d'échange de chaleur entre le réacteur et le milieu extérieur.
- b) Réacteurs isothermes : Pour ce type de réacteurs, on note que les différences d'apparence sont assez souvent à l'origine de la localisation de la surface d'échange thermique Ainsi, l'échange thermique peut être réalisé : à l'intérieur du réacteur; à travers les parois du réacteur et à l'extérieur du réacteur.

I.3 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 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		Mode d'opération				
		Continu				
		Discontinu	Tubulaire	Etagé	Parfaitement agité	
Une seule phase fluide	Gaz	(1)	(3) Vapocraquage	(1)	(1)	
	Liquide	(3) Polymérisation	(2) Production d'urée	(2) Polymérisation	(3) Estérification	
Deux phases fluides	Gaz + Liquide	(3) Fermentation	(3) Absorption de polluants	(2) Oxydations d'hydrocarbures	(3) Traitement biologique d'eaux	
	Liquide + Liquide	(2) Sulfonation D'aromatiques	(2) Hydrolyse d'esters	(2) Polymérisation en émulsion	(2) Nitration d'aromatiques	
Fluide + solide catalyseur		(3) hydrogénations	(3) Lit fixe (1) Lit mobile Reformage	(1) Lit fluide à étages	(3) Lit fluide Cracking catalytique	
Fluides + solides		(2) Régénération de catalyseurs	(2) Lit mobile Haut fourneau	(2) Lit fluide Grillage de minerais	(2) Combustion en lit fluidisée	
Fréquence (1) plus rar (2) souvent (3) réalisat	e d'utilisation : ement rencontré, rencontré ; ion préférée.					

Tableau (1.1) : Exemple de classes de réacteurs

I.4 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 (> 10 000 t/an). 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 (1.6) : Domaines d'utilisation des quatre principaux types de réacteurs

I.5 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 et de mettre en évidence l'intérêt d'application d'une commande non-linéaire bornée.

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 faisait 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 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 vue 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 continus 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.

$$U = W + Q \tag{2.1}$$

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

$$dU = \partial W + \partial Q \tag{2.2}$$

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] :

$$\partial W = -P\partial V \tag{2.3}$$

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 :

$$H = U + PV \tag{2.4}$$

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

$$dH = dU + PdV + VdP \tag{2.5}$$

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

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

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

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

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

$$\frac{dP}{dt} = 0 \tag{2.8}$$

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] :

$$H = mC_p T \tag{2.9}$$

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

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

Ce qui nous conduit à l'équation finale :

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = \dot{Q} \tag{2.11}$$

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

• Libération sous forme d'électricité ou parfois même sous forme de lumière.

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 positive ($\Delta H > 0$).

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
- Absorption sous forme d'électricité ou de lumière

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 négative (ΔH <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]:

$$v = k(T)g(C_i) \tag{2.12}$$

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 :

$$g(\mathcal{C}_i) = \prod_i \mathcal{C}_i^{n_i} \tag{2.13}$$

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

$$n = \sum n_i \tag{2.14}$$

 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].

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 :

 $A \rightarrow C$

La loi de vitesse prendrait comme forme :

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

$$A + B \rightarrow C$$

La loi de vitesse prendrait la forme :

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

 $2A \rightarrow C$

La loi de vitesse est :

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

$$k(T) = k_0 exp\left(-\frac{E_0}{RT}\right)$$
(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_0 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 kJ.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]:

$$\frac{d\phi}{dA} = \frac{-\lambda dT}{dx} \tag{2.19}$$

Avec :

- ϕ : flux de chaleur (kJ.s⁻¹).
- *T* : température (K).
- A: surface d'échange (m²).
- *x*: coordonnée du point considéré (m).
- λ : conductivité thermique (kJ. s⁻¹.K⁻¹.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 :

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

 $e = x_1 - x_2$ 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 sécheurs à air chaud.

II.5.2. 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 l'enveloppe entourant le réacteur.
 Ces réacteurs sont les plus couramment utilisés.
- Réacteurs chauffés par un fluide circulant à l'intérieur de bobines installés à l'intérieur du réacteur.



Figure (2.4) – Schémas des réacteurs chauffés avec enveloppe 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 der Vusse :

$$\begin{array}{c} A \longrightarrow B \longrightarrow C \\ 2A \longrightarrow D \end{array}$$

Le réacteur dans ce cas là est alimenté par un seul produit : produit A. La première équation est la principale composée de deux réactions en série, et la deuxième équation est une équation parallèle. Le produit d'intérêt est le produit B : il s'agit du composant à optimiser.

II.6.1.1 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 deux quantités de matière :

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

$$n_1 = V x_1 \tag{2.21}$$

Et relatif au produit B :

$$n_2 = V x_2 \tag{2.22}$$

 x_i dénote la concentration du produit, en mol.l⁻¹, et V est le volume du réacteur en litres.

Le bilan de matière est :

$$\begin{bmatrix} Taux \\ d'accumulation \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Taux \ d'entrée \\ par \ convection \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Taux \ de \ sortie \\ par \ convection \end{bmatrix} + [Taux \ de \ génération]$$

Ce qui donne :

$$\begin{cases} \frac{d(Vx_1)}{dt} = Fx_{in} - Fx_1 - Vk_1(T)x_1 - Vk_3(T)x_1^2\\ \frac{d(Vx_2)}{dt} = 0 - Fx_2 + Vk_1(T)x_1 - Vk_2(T)x_2 \end{cases}$$
(2.23)

 x_{in} 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 :

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = \frac{F}{V}(x_{in} - x_1) - k_1(T)x_1 - k_3(T)x_1^2\\ \dot{x}_2 = -\frac{F}{V}x_2 + k_1(T)x_1 - k_2(T)x_2 \end{cases}$$
(2.24)

 $d = \frac{F}{V}$ 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):

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = \dot{Q}$$

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

$$\begin{bmatrix} Taux \\ d'accumulation \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Taux \ d'entrée \\ par \ convection \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Taux \ de \ sortie \\ par \ convection \end{bmatrix} + [Taux \ de \ génération] + \begin{bmatrix} Taux \ d'échange \ a \ la \ paroi \\ par \ conduction \end{bmatrix}$$

La température T dans le réacteur

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

- [Taux d'entrée] = $\rho C_p F T_{in}$
- $[Taux \ de \ sortie] = \rho C_p FT$
- Le taux d'échange à la paroi selon la loi de conduction est : $[Taux d'échange à la paroi] = k_w A_r (T_j - T)$ dans le cas du réacteur avec enveloppe. L'indice 'j' s'apparente à l'enveloppe (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-àdire $\Delta H_R < 0$, 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 kJ.mol⁻¹

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

$$-V\sum_{r\acute{e}actions}(\Delta H_R)_I \mathcal{R}_I \tag{2.25}$$

D'où le taux de génération dans notre cas :

 $[Taux \ de \ génération] = -k_1(T)Vx_1 \ \Delta \ H_{rAB} - k_2(T)Vx_2 \Delta H_{rBC} - k_3(T)Vx_1^2 \Delta H_{rAD}$

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

$$\frac{dT}{dt} = d(T_{in} - T) + \frac{k_w A_r}{\rho V C_p} (T_j - T) - \frac{(k_1(T)x_1 \Delta H_{rAB} + k_2(T)x_2 \Delta H_{rBC} + k_3(T)x_1^2 \Delta H_{rAD})}{\rho C_p}$$
(2.26)

La température T_j de l'enveloppe

$$\begin{bmatrix} Taux \\ d'accumulation \end{bmatrix} = m_K C_{PK} \frac{dT_j}{dt}$$

[Taux d'entrée] = U

 $[Taux d'échange à la paroi] = -k_w A_r (T_j - T)$

 $[Taux \ de \ génération] = 0$

$$\Rightarrow \frac{dT_j}{dt} = \frac{1}{m_K C_{PK}} [U - k_w A_r (T_j - T)]$$
(2.27)

On peut généraliser les équations du système sous cette forme :

$$\begin{cases} \dot{x} = d(X_{in} - x) + Cr(x^{r}, T) \\ \dot{T} = d(T_{in} - T) + H_{r}^{T}r(x^{r}, T) + q_{1}(T_{j} - T) \\ \dot{T}_{j} = -q_{2}(T_{j} - T) + u \end{cases}$$
(2.28)

Dans le cas de la réaction Van der Vusse:

- La matrice des coefficients stechiométriques : $C = \begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$

- La matrice des cinétiques chimiques :
$$r(x^r, T) = \begin{bmatrix} k_{10} exp\left(-\frac{E1}{RT}\right) x_1 \\ k_{20} exp\left(-\frac{E2}{RT}\right) x_2 \\ k_{30} exp\left(-\frac{E1}{RT}\right) x_1^2 \end{bmatrix}$$

- Le vecteur des enthalpies de réaction : $H_r^T = \begin{bmatrix} \frac{-\Delta H_{rAB}}{\rho C_p} & \frac{-\Delta H_{rBC}}{\rho C_p} & \frac{-\Delta H_{rAD}}{\rho C_p} \end{bmatrix}$
- Le vecteur des concentrations d'alimentation : $X_{in} = \begin{bmatrix} x_{in} \\ 0 \end{bmatrix}$
- Constante de transfert thermique du réacteur : $q_1 = \frac{k_w A_r}{\rho V C_p}$
- Constante de transfert thermique de l'enveloppe : $q_2 = \frac{k_w A_r}{m_K C_{PK}}$
- La commande qui est le taux de chaleur apporté à l'enveloppe $u = \frac{U}{m_K C_{PK}}$

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

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

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



> Cas du refroidissement du réacteur: u = -100 KJ/min

Figure (2.5) – Profils de température, cas du refroidissement



Figure (2.6) – Profils des concentrations, cas du refroidissement.

> Cas du chauffage du réacteur : u = +100 KJ/min



Figure (2.7) – Profils de température, cas du chauffage.



Figure (2.8) – Profils des concentrations, cas du chauffage.

Cas du taux d'échange nul : u = 0 KJ/min



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



Figure (2.10) – Profils des concentrations, cas du taux nul.

II.7.1 Commentaires :

Les résultats montrent que pour les trois différents taux d'échange, la température se stabilise ainsi que les concentrations ; le réacteur est donc stable en boucle ouverte. C'est une propriété implicite de ce système. En effet, selon le taux d'échange présent dans la paroi et la température d'entrée du composant, la température se stabilise dans le réacteur autour d'une certaine valeur, et la réaction continue à être opérationnelle à température constante. Comme la concentration initiale du composé A est constante ; le système de réaction restera toujours physiquement stable.

II.8. Profils d'équilibres :

Nous avons vu que la température tend à se stabiliser dans le réacteur continu parfaitement agité. C'est l'opération isothermique du réacteur. Elle est achevée lorsque:

$$\dot{T} = 0 \Leftrightarrow T = T_{ss}$$

$$\dot{T}_j = 0 \Leftrightarrow T_j = T_j^{ss}$$
(2.29)

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

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = 0\\ \dot{x}_2 = 0 \end{cases}$$
(2.30)

Ce qui donne :

$$\begin{cases} dx_{in} - (d + k_1(T))x_1 - k_3(T)x_1^2 = 0\\ -dx_2 + k_1(T)x_1 - k_2(T)x_2 = 0 \end{cases}$$
(2.31)

Résolution de la première équation:

$$\Delta = \left(d + k_1(T)\right)^2 + 4dx_{in}k_3(T) > 0 \tag{2.32}$$

Il existe deux solutions réelles :

$$\begin{cases} x_{11} = -\frac{\left(d + k_1(T) + \sqrt{\left(d + k_1(T)\right)^2 + 4dx_{in}k_3(T)}}{2k_3(T)}\right)}{2k_3(T)} \\ x_{12} = -\frac{\left(d + k_1(T)\right) - \sqrt{\left(d + k_1(T)\right)^2 + 4dx_{in}k_3(T)}}{2k_3(T)} \end{cases}$$
(2.33)

Il est clair que x_{11} est une quantité négative; Comme les concentrations sont des quantités physiques positives, la deuxième solution est envisagée, donc le profil d'équilibre de la concentration x_1 est $\pi_1(T) = x_{12}$.

Si on remplace x_1 par $\pi_1(T)$ dans la deuxième équation du système (2.31); on trouve finalement le profil d'équilibre des concentrations:

$$\pi(T) = \begin{cases} \frac{-(d+k_1(T)+\sqrt{(d+k_1(T))^2+4dx_{in}k_3(T)}}{2k_3(T)} \\ \frac{k_1(T)\pi_1(T)}{k_2(T)+d} \end{cases}$$
(2.34)

Traçons à présent la courbe du profil d'équilibre $\pi_2(T)$ en fonction de la température, en considérant l'intervalle de température : [298*K*, 413*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 présente un maximum d'une valeur de 1.14 mol.1⁻¹ autour de la température de 380 K. Etant donné que ce profil d'équilibre dépend des éléments de cinétiques chimiques, qui sont inconnus et difficiles à obtenir à priori : le problème de recherche adaptive d'extremum 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 un type de réacteurs largement utilisés dans l'industrie: le réacteur parfaitement agité (CSTR), ce type de réacteur 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.

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 existe bien un maximum qu'on va faire fonctionner le réacteur l'avec.

Chapitre III

Commande non-linéaire borneé

III.1. Introduction :

Ce chapitre vise à formuler et à analyser le problème de la commande d'un réacteur chimique parfaitement agité. Particulièrement, on s'intéressera à une formulation générale qui permettra de traiter les systèmes avec réactions multiples qui présentent des combinaisons de réactions en série et de réactions en parallèle; Le but étant de stabiliser le système par une commande bornée afin de maximiser la concentration d'un produit d'intérêt à la sortie du réacteur. Les cinétiques chimiques étant supposées inconnues.

III.2. Position du problème :

Notre problème se concentre sur la classe des réacteurs continus parfaitement agités suivante :

$$\begin{cases} \dot{x} = Cr(x^{r}, T) + d(x_{in} - x) \\ \dot{T} = B(x^{r}, T) + q_{1}(T_{j} - T) + d(T_{in} - T) \\ \dot{T}_{j} = -q_{2}(T_{j} - T) + u \end{cases}$$
(3.1)

Rappelons que :

- $x \in S_x \subset \mathbb{R}^n_+$ est le vecteur de concentrations des composants chimiques dans le réacteur dont les valeurs appartiennent au sous-ensemble S_x de \mathbb{R}^{+n} .
- $T \in \mathbb{R}_+$ est la température qui est supposée homogène dans le réacteur.
- $T_i \in \mathbb{R}^+$ est la température de la jacket.
- C ∈ ℝ^{n×m} est la matrice caractéristique des coefficients stœchiométriques de chacun n composants des m réactions.
- $r(x^r, T) \in \mathbb{R}^m$ est la matrice des cinétiques des réactions.
- *d* est le taux de dilution du réacteur.
- $x_{in} \in \mathbb{R}^n$ est la concentration d'alimentation de chacun des *n* composants.
- $B(x^r, T) = H_r^T r(x^r, T)$ avec $H_r \in \mathbb{R}^r$ est le vecteur des chaleurs de réaction.
- *u* est le taux de chaleur apporté au réacteur qui est la commande.
- $q_1 \in \mathbb{R}^+$ est la constante de transfert thermique du réacteur.
- $q_2 \in \mathbb{R}^+$ est la constante de transfert thermique de la chemise.
- $T_{in} \in \mathbb{R}^+$ est la température d'alimentation du réacteur.

- $x^r \in \mathbb{R}^r$ est le vecteur de concentrations des *r* réactifs.

La matrice caractéristique C et le vecteur des enthalpies de réaction λ sont supposés connus. Par contre la matrice des cinétiques de réactions $r(x^r, T)$ est inconnue.

L'objectif du contrôle est de concevoir une commande dynamique bornée u pour stabiliser le système au point d'équilibre.

Seule la mesure de température est disponible. Malgré que certaines méthodes avancées aient été développées pour les mesures de concentrations dans les réacteurs, cela reste une solution chère, et rarement utilisée dans les installations industrielles [ANT-03]. Le problème devrait être ainsi résolu en utilisant que les mesures de température.

Soient $x_{ss} \in \mathbb{R}^n$, $T_{ss} \in \mathbb{R}$, $T_j^{ss} \in \mathbb{R}$, $u_{ss} \in \mathbb{R}$ sont les valeurs de points d'équilibre de vecteur d'état et la commande respectivement.

On définit les variations de variables :

$$\begin{aligned}
\psi &= x - x_{ss} \\
\xi &= T - T_{ss} \\
\eta &= T_j - T_j^{ss} \\
\delta u &= u - u_{ss}
\end{aligned}$$
(3.2)

Le système (3.1) devient :

$$\begin{cases} \dot{\psi} = C\tilde{r}(\psi^{r},\xi) + d(\psi_{in} - \psi) \\ \dot{\xi} = -(q_{1} + d)\xi + q_{1}\eta + \beta(T_{ss},T_{j}^{ss}) + \tilde{B}(\psi^{r},\xi) \\ \dot{\eta} = q_{2}\xi - q_{2}\eta - q_{2}(T_{j}^{ss} - T_{ss}) + u_{ss} + \delta u \end{cases}$$
(3.3)

Où :

$$\beta(T_{ss}, T_j^{ss}) = q_1(T_j^{ss} - T_{ss}) + d(T^{in} - T_{ss}),$$

$$\tilde{r}(\psi^r, \xi) = r(\psi^r + x_{ss}^r, \xi + T_{ss}),$$

$$\psi_{in} = x_{in} - x_{ss},$$

$$\tilde{B}(\psi^r, \xi) = B(\psi^r + x_{ss}^r, \xi + T_{ss}) = B_0 + B_1\psi^r + B_2\xi,$$
(3.4)

En particulier, si les cinétiques suivent la loi d'Arrhenius, on a :

$$B_{0} = B_{0}(x_{ss}^{r}, T_{ss}) = H_{r}^{T} \begin{bmatrix} \varphi_{1}(x_{1ss}^{r})k_{\theta 1}e^{-E_{1}/RT_{ss}} \\ \vdots \\ \varphi_{m}(x_{mss}^{r})k_{\theta m}e^{-E_{m}/RT_{ss}} \end{bmatrix},$$
(3.5)

$$B_{1} = B_{1}(x^{r}, T) = H_{r}^{T} \begin{bmatrix} B_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & B_{12} & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & B_{1m} \end{bmatrix}$$
(3.6)

Avec: $B_{1i} = B_{1i}(x_i^r, T) = (\frac{\varphi_i(x_i^r) - \varphi_i(x_{iss}^r)}{x_i^r - x_{iss}^r})k_{\theta i}e^{-E_i/RT}$,

$$B_{2} = B_{2}(x_{ss}^{r}, T) = H_{r}^{T} \begin{bmatrix} \varphi_{1}(x_{1ss}^{r})k_{\theta 1} \left[\frac{e^{-E_{1}/RT} - e^{-E_{1}/RT}ss}{T - T_{ss}} \right] \\ \vdots \\ \varphi_{m}(x_{mss}^{r})k_{\theta m} \left[\frac{e^{-E_{m}/RT} - e^{-E_{m}/RT}ss}{T - T_{ss}} \right] \end{bmatrix}$$
(3.7)

Alors le système (3.3), par une translation de coordonnée, peut être écrit comme suit :

$$\begin{cases} \dot{\psi} = C\tilde{r}(\psi^{r},\xi) + d(\psi_{in} - \psi) \\ \dot{\xi} = -(q_{1} + d)\xi + q_{1}\eta + B_{1}\psi^{r} + B_{2}\xi \\ \dot{\eta} = q_{2}\xi - q_{2}\eta + \delta u \end{cases}$$
(3.8)

III.3. Hypothèses principales :

On pose maintenant quatre hypothèses fondamentales pour la suite de notre étude [GUA-04]:

Hypothèse 1 :

 $\forall x(0) \in \mathbb{R}^{+n}$ alors $x(t) \in \mathbb{R}^{+n}$ pour tout $t \ge 0$, c'est une propriété de la non-négativité des concentrations.

Hypothèse 2 :

Pour les conditions isothermes, $T = T_{ss}$, le système $\dot{x} = Cr(x^r, T_{ss}) + d(x_{in} - x)$, possède un seule point d'équilibre $x = x_{ss}$, lequel est globalement exponentiel stable.

En utilisant le théorème de Lyapunov, l'hypothèse peut être reformulée comme suit :

Il existe une fonction définie positive radialement non-bornée $W(\psi)$ et des constantes

positives $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2$ et α_3 tels que :

$$\alpha_0 \|\psi\|^2 \le W(\psi) \le \alpha_1 \|\psi\|^2$$

$$\dot{W} \le -\alpha_2 \|\psi\|^2 \le 0 \tag{3.9}$$

$$\left\|\frac{\partial W}{\partial x}\right\| \le \alpha_3 \|\psi\| \tag{3.10}$$

Hypothèse 3 :

Les fonctions $k_i \in \mathbb{R}^m$ satisfont la condition de Lipschitz à $T = T_{ss}$, c'est à dire $\exists M \in \mathbb{R}^+$ tel que : $\forall T \ge 0$,

$$\|Cr(x^{r},T) - Cr(x^{r},T_{ss})\| \le M|T - T_{ss}|$$
(3.11)

Hypothèse 4 :

Les variables disponibles utilisées pour le contrôle sont d, T, T_i et T^{in} .

Dans ce qui suit, le système (3.1) et les hypothèses 1-4 sont prises en considération. Notre objectif consiste, si possible, à trouver une loi de commande statique, de la forme :

$$w = w(y) \tag{3.12}$$

Où : $w^T = [u, d, T^{in}]$ et $y^T = [T, T_i, T^{in}, d]$,

ou une loi de commande dynamique, de la forme :

$$\begin{cases} \dot{\theta} = \Theta(\theta, y) \\ w = w(\theta, y) \end{cases}$$
(3.13)

De telle sorte que le système en boucle fermé (3.1)-(3.12) ou (3.1)-(3.12), est globalement asymptotiquement stable ou localement asymptotiquement stable avec une borne calculable dans la région d'attraction. En outre, les variables à commander $w^T = [u, d, T^{in}]$ prennent des valeurs dans l'ensemble compact $\wp \subset \mathbb{R}^3$, lequel dépend de l'application spécifique.

III.4. Résultat préliminaire :

Cette section fournit un résultat simple, qui sera utile en prouvant les résultats principaux de ce travail.

Lemme1:

On considère le système suivant :

$$\dot{z} = f(z) + g(z)u \tag{3.14}$$

Avec : l'état $z \in \mathbb{R}^n$ et la commande $u \in \mathbb{R}$.

On suppose qu'il existe une commande constante inconnue $u = u_{ss}$ et une fonction définie positive radialement non-bornée V(z) tel que :

$$\dot{V}(z) = \frac{\partial V}{\partial z} f(z) + \frac{\partial V}{\partial z} g(z) u_{ss} \le 0$$
(3.15)

Pour tout *z* non-nul.

Alors :

Pour n'importe quelles \bar{u} et \underline{u} telles que $\underline{u} < u_{ss} < \bar{u}$, il existe une loi de commande dynamique, qui n'exige pas la connaissance de u_{ss} , à savoir :

$$\begin{cases} \dot{\theta} = \Theta(\theta, y) \\ u = \theta \end{cases}$$
(3.16)

avec $\theta(0) \in (\underline{u}, \overline{u})$, tel que le système en boucle fermée (3.14)-(3.16) est stable au sens de Lyapunov, la variable z converge vers zéro et le long des trajectoires du système en boucle fermée, la commande $\theta(t) = u(t) \in (\underline{u}, \overline{u})$.

Preuve :

On considère la fonction suivante :

$$V(z) + \omega(\theta) \tag{3.17}$$

$$Ou: \ \omega(\theta) = \ln\left((\bar{u} - \theta)^{\tau/k}\right) - \ln\left((\theta - \underline{u})^{(\tau+1)/k}\right) \tag{3.18}$$

Avec : k > 0, $\tau = (u_{ss} - \bar{u}) / (\bar{u} - \underline{u}) < 0$ et $\tau + 1 > 0$.

Noter que $V(z) + \omega(\theta)$ est définie positive radialement non-bornée dans $\Omega_{z\theta}$, $\Omega_{z\theta} = \{(z, \theta) \in \mathbb{R}^{n+1} | \underline{u} < \theta < \overline{u}\}, c-à-d. \lim_{(z,\theta) \to \partial \Omega_{z\theta}} V(z) + \omega(\theta) = +\infty$

Et posons :

$$\dot{\theta} = \frac{\partial V}{\partial z} g(z) \sigma(\theta)$$

Avec :

$$\sigma(\theta) = k(\theta - \bar{u})(\theta - \underline{u}) \tag{3.19}$$

Et notons que : $\theta - u_{ss} + (\partial \omega / \partial \theta) \sigma(\theta) = 0$

On obtient :

$$\dot{V}(z) + \dot{\omega}(\theta) = \frac{\partial V}{\partial z} [f(z) + g(z)u_{ss}] \le 0$$
(3.20)

Pour tout z non-nul.

En conséquence le système en boucle fermée :

$$\begin{cases} \dot{z} = f(z) + g(z)\theta\\ \dot{\theta} = \frac{\partial V}{\partial z}g(z)\sigma(\theta) \end{cases}$$
(3.21)

est localement stable, et n'importe quelle trajectoire commençant dans l'ensemble $\Omega_{z\theta}$ restera dans ce dernier pour tout $t \ge 0$, et elle est telle que z converge vers zéro et $\theta(t) \in (\underline{u}, \overline{u}) \quad \forall t \ge 0$

Remarque 1 :

L'hypothèse que le système en boucle fermée (3.14), avec la commande constante $u = u_{ss}$, soit globalement asymptotiquement stable peut être expérimentalement vérifié, et ce genre d'information est en général disponible dans des vraies applications, bien que la valeur précise de la constante stabilisante u_{ss} ne soit pas connue ou pourrait dépendre des conditions de fonctionnement [ANT-03].

III.5. Résultats Principales :

Dans cette section on montre comment le problème de la stabilisation asymptotique pour le système (3.3), sous les hypothèses indiquées, peut être résolu en utilisant des lois de commande dynamiques lesquelles exigent seulement une partie du vecteur d'état et assurent une action bornée. Le résultat établi dans le lemme 1 sera utile pour déduire les lois de commande. Cependant, comme déjà discuté, l'application du lemme 1 exige la propriété que le système peut être stabilisé avec une action de commande constante. Cette propriété dépend presque que de la caractéristique de la température du système et, en particulier, du degré

d'exothermicité de la réaction ayant lieu dans le réacteur. Ceux-ci sont à leur tour liés aux propriétés des fonctions B1 et B2 donnés dans les équations. (3.6) et (3.7).

Il faut noter que le CSTR peut être commandé en utilisant différentes variables. Pour commencer, la chaleur enlevée de l'enveloppe u, est considérée comme la variable d'entrée et la température de l'enveloppe T_j est supposée être la variable mesurée. Ensuite, avec une extension multivariable, dans laquelle les variables d'entrées sont les paires (u, T^{in}) ou (u, d) et les variables mesurées sont (T, T_j, d) . Dans tous les cas, la loi de commande doit être bornée, les contraintes de positivité liées à certaines variables, par exemple le taux de dilution d, doivent être satisfaites.

III.5.1. Stabilisation par la commande de la chaleur *u* :

Proposition 1 : On considère le CSTR décrit par les équations (3.3) et on suppose que les hypothèses 1-4 sont prises en compte. En Considérant la chaleur de réaction $\tilde{B}(\psi^r, \xi)$ exprimée par l'équation (3.4) et supposant que les fonctions B_1 et B_2 définies dans les équations (3.6) et (3.7), sont telles que :

$$\bar{B}_2 + \frac{\alpha_3 M}{\alpha_2} \bar{\Omega} < d , \qquad (3.22)$$

Où $\overline{B}_2 = \max_{\forall T \in \mathbb{R}_+} B_2$, *M* est comme dans l'équation (3.11), *d* est le taux de dilution, α_2 et α_3 sont comme dans les équations (3.9) et (3.10), respectivement, et le $\overline{\Omega} = \max_{\forall x^r, T} ||(P^r)^T B_1^T||$ avec P^r est l'opérateur de projection.

Alors il existe :

- une loi de commande constante :

$$u = u_{sst} \tag{3.23}$$

- deux fonctions à valeurs réelles, $w(\psi)$ et $V(\xi, \eta)$, qui sont propres et définies positives,
- une constante réelle positive λ^* telle que $\dot{W} + \lambda^* \dot{V} < 0$, pour tout $(\psi, \xi, \eta) \neq (0,0,0)$.

En conséquence, la commande constante (3.23) stabilise globalement asymptotiquement le système (3.3) vers le point d'équilibre (0,0,0).

Remarque 2 : Avant de présenter la preuve de la proposition 1, en utilisant les propriétés de projection, la condition (3.22) peut être simplifiée comme $max_{\forall x^{r},T} ||B_{1}^{T}|| < (\alpha_{2}/(\alpha_{3} M))(d - \overline{B}_{2})$. D'ailleurs, $||B_{1}^{T}||$ et B_{2} sont des fonctions bornées en module et cette supposition peut être satisfaite si le taux de dilution d est suffisamment grand. C'est également intéressant de noter que les fonctions B_{1} et B_{2} et les variables M, α_{2} et α_{3} peuvent être, dans la pratique, expérimentalement estimées.

Preuve de la proposition 1 :

Soit $W(\psi)$ comme dans l'hypothèse 2 et $V(\xi, \eta)$ est défini comme :

$$V(\xi,\eta) = \frac{q_2}{2}\xi^2 + \frac{q_1}{2}\eta^2.$$
(3.24)

Alors : $\dot{W} \leq -\alpha_2 \|\psi\|^2 + \alpha_3 \|\psi\|M|\xi|$, et pour $u = u_{ss}$, $\dot{V} = -q_2(q_1 + d - B_2)\xi^2 - q_1q_2\eta^2 + 2q_1q_2\xi\eta + q_2 B_1\psi^r\xi$. (3.25) Supposer maintenant que la condition (3.22) est satisfaite. Alors pour tout $\lambda > 0$, et après des

Supposer maintenant que la condition (3.22) est satisfaite. Alors pour tout $\lambda > 0$, et après des simples manipulations, on a:

$$\begin{split} \dot{W} + \lambda \dot{V} &\leq -\left[\sqrt{\frac{\alpha_2}{2}} \|\psi\| - \frac{\alpha_3 M}{2\sqrt{\frac{\alpha_2}{2}}} |\xi|\right]^2 \\ & - \left\|\sqrt{\frac{\alpha_2}{2}} \psi - \frac{\lambda q_2 (B_1 P^r)^T}{2\sqrt{\frac{\alpha_2}{2}}} \xi\right\|^2 - \left[\sqrt{\lambda q_1 q_2} \eta - \sqrt{\lambda q_1 q_2} \xi\right]^2 \\ & - \left[\lambda q_2 (d - B_2) - \frac{\alpha_3^2 M^2}{2\alpha_2} - \frac{\lambda^2 q_2^2 \|(P^r)^T B_1^T\|^2}{2\alpha_2}\right] \xi^2. \end{split}$$

Les trois premiers termes de la dernière équation sont non positifs pour n'importe quelle valeur différente de zéro des variables ψ , ξ et η , alors que le signe du quatrième terme est inconnu et dépend du choix de λ . Cependant, ce dernier terme peut être rendu négatif s'il existe $\lambda > 0$ tel que :

$$q_2^2 \| (P^r)^T B_1^T \| \lambda^2 - 2q_2 \alpha_2 (d - B_2) \lambda + \alpha_3^2 M^2 < 0$$
(3.26)

Sachant que λ existe effectivement et il donné par :

$$\lambda^* = \frac{\alpha_2 (d - \bar{B}_2)}{q_2 (max_{\forall x^r, T} \| (P^r)^T B_1^T \|)^2}$$
(3.27)

Il est simple de conclure que la fonction $W(\psi) + \lambda^* V(\xi, \eta)$ est une fonction de Lyapunov pour le système (3.3) avec $u = u_{ss}$; par conséquent le point d'équilibre (0.0.0) du système de boucle fermé (3.3)-(3.23) est globalement asymptotiquement stable.

La proposition 1 peut être combinée avec le résultat établi dans le lemme 1 comme exprimé en corollaire suivant, dans lequel, au lieu de la commande constante $u = u_{ss}$, une loi de commande dynamique, qui exige seulement la connaissance de la température de l'enveloppe et de sa valeur de consigne, est appliquée.

Corollaire 1 : On considère le CSTR décrit par l'équations (3.3), et on suppose que les hypothèses 1-4 sont prises en considération, et que la condition (3.22) est vérifiée. En supposant de plus que u est la seule variable d'entrée tel que : $u \in (\underline{u}, \overline{u})$ et $u_{ss} \in (\underline{u}, \overline{u})$.

Alors, la dynamique initiale de la loi de commande est :

$$\begin{cases} u = \theta \\ \dot{\theta} = k_{\theta}(\theta - \overline{u})(\theta - \underline{u})\eta \end{cases}$$
(3.28)

Avec $k_{\theta} > 0$, tel que le point d'équilibre $(0,0,0,u_{ss})$ du système en boucle fermé (3.3)-(3.28)est localement stable, et pour n'importes quelles conditions initiales $(\psi(0),\xi(0),\eta(0),\theta(0))$ avec $\theta(0) \in (\underline{u},\overline{u})$, $(\psi(t),\xi(t),\eta(t))$ converge asymptotiquement vers (0,0,0) et la commandes dynamiques $\theta(t) \in (\underline{u},\overline{u})$.

III.5.2. Stabilisation par la commande de la chaleur u et la température d'alimentation T^{in}

La commande stabilisante (3.28) a une structure très simple, toutefois elle exige que la condition (3.22), concernant l'exothermicité du réseau de réaction, est satisfaite. Cette condition, qui pourrait être trop restrictive, peut être détendue en augmentant la complexité de

la structure de la commande, c.-à-d. introduire des variables d'entrée supplémentaires pour compenser les limitations physique de l'échange thermique quand une réaction fortement exothermique aura lieu.

Pour cela, considérons le système (3.1) et, en plus des variations de variables (3.2), en introduisant une nouvelle variation de variable $\delta T^{in} = T^{in} - T^{in}_{ss}$, et on considère T^{in} comme une nouvelle variable d'entrée.

En conséquence, le système (3.1) peut être réécrit comme suit :

$$\begin{cases} \dot{\psi} = C\tilde{r}(\psi^{r},\xi) + d(\psi_{in} - \psi) \\ \dot{\xi} = -(q_{1} + d)\xi + q_{1}\eta + d\delta T^{in} + B_{1}\psi^{r} + B_{2}\xi \\ \dot{\eta} = q_{2}\xi - q_{2}\eta + \delta u \end{cases}$$
(3.29)

Ce qui est le point de départ pour déduire la version multivariable de la proposition 1.

Proposition 2: On considère le CSTR décrit par les équations (3.29) et supposons que les hypothèses 1-4 sont prises en considération, et $\tilde{B}(\psi^r, \xi)$ est comme dans l'équation (3.4), et supposer pour $k_{in} \ge 0$,

$$\bar{B}_2 + \frac{\alpha_3 M}{\alpha_2} \bar{\Omega} < d + k_{in} d \tag{3.30}$$

Où :

 B_2 est définie dans (3.7), $\overline{B}_2 = \max_{\forall T \in \mathbb{R}^+} B_2$, M est définie dans (3.11), d est le taux de dilution α_2 et α_3 sont définies dans (3.9) et (3.10), respectivement, $\overline{\Omega} = \max_{\forall T \in \mathbb{R}^+} ||(P^r)^T B_1^T||$,

Alors, il existe deux constantes positives u_{ss} et T_{ss}^{in} tel que le point d'équilibre (0,0,0) du système (3.29) en boucle fermée avec la loi de commande :

est globalement asymptotiquement stable.

De plus, si :

$$0 \le k_{in} \le \frac{T_{ss}^{in}}{\bar{\psi}} \frac{\alpha_3}{\alpha_2} M \sqrt{\frac{q_2}{q_1 + q_2}}$$
(3.32)

Avec : $\bar{\psi} = \max \|\psi\|$,

Alors toutes les trajectoires du système en boucle fermée (3.29)-(3.31), avec T(0) et $T_j(0)$ sont dans l'ensemble

$$\mathcal{H} = \left\{ (T, T_j) \mid (T - T_{ss})^2 + \frac{q_1}{q_2} (T_j - T_j^{ss})^2 \le \left(\frac{T_{ss}^{in}}{k_{in}}\right) \right\}$$

resteront à l'intérieur de cet ensemble, et sont tel que $T^{in} = T^{in}_{ss} - k_{in}(T - T_{ss})$ est nonnégatif pour $t \ge 0$.

Preuve de la proposition 2 :

On répartit la preuve en deux étapes,

Étape 1 : Globale stabilité asymptotique

On considère la fonction définie positive radialement non bornée $W(\psi) + \lambda V(\xi, \eta)$ Où $W(\psi)$ et $V(\xi, \eta)$ sont comme dans la preuve de la proposition 1 et λ est une constante positive à déterminer. Alors le long des trajectoires du système en boucle fermée (3.29)-(3.31), et après un simple calcul, on a :

$$\begin{split} \dot{W} + \lambda \dot{V} &\leq -\left[\sqrt{\frac{\alpha_2}{2}} \|\psi\| - \frac{\alpha_3 M}{2\sqrt{\frac{\alpha_2}{2}}} |\xi|\right]^2 \\ & -\left\|\sqrt{\frac{\alpha_2}{2}}\psi - \frac{\lambda q_2 (B_1 P^r)^T}{2\sqrt{\frac{\alpha_2}{2}}} \xi\right\|^2 - \left[\sqrt{\lambda q_1 q_2}\eta - \sqrt{\lambda q_1 q_2} \xi\right]^2 \\ & -\left[\lambda q_2 (d + k_{in} d - B_2) - \frac{\alpha_3^2 M^2}{2\alpha_2} - \frac{\lambda^2 q_2^2 \|(P^r)^T B_1^T\|^2}{2\alpha_2}\right] \xi^2 \end{split}$$

Par le même raisonnement , c'est facile de conclure qu'il existe une constante positive λ^* tel que $\dot{W} + \lambda^* \dot{V} < 0$, pour tout $(\psi, \xi, \eta) \neq (0,0,0)$,

Étape 2 : invariance du domaine \mathcal{H} .

Noter que la commande T^{in} définie dans l'équation (3.31) est non-négative pour tout $T \leq T_{ss} + T_{ss}^{in}/k_{in}$.

D'où, par un simple calcul on peut montrer que T^{in} est non-négative dans le domaine \mathcal{H} .

Monter l'invariance du domaine \mathcal{H} , revient à montrer que ce dernier est positivement invariant.

A cet effet, on considère la fonction V de l'étape 1, et noter que

$$\dot{V} \leq -q_1 q_2 \left[(T - T_{ss}) - (T_j - T_j^{ss}) \right]^2 - q_2 (d + k_{in} d - \bar{B}_2) (T - T_{ss})^2 + q_2 (T - T_{ss}) \frac{\alpha_2}{\alpha_3 M} (d + k_{in} d - \bar{B}_2) \bar{\psi}.$$
(3.33)

Si k_{in} satisfait la condition (3.32) alors la fonction \dot{V} est semi-définie positive dans un ensemble compact contenu dans le domaine \mathcal{H} , et négative ailleurs. Ce qu'il fallait démontrer.

La loi de commande (3.31) ne peut pas être implémentée parce qu'elle exige la connaissance des valeurs u_{ss} et T_{ss}^{in} . Cependant, comme déjà discuté, ce problème peut être facilement surmonté, comme indiqué dans le corollaire suivant.

Corollaire 2 : On considère le CSTR décrit dans l'équation (3.29) et supposer que les hypothèses 1-4 sont prises en considération et que la condition (3.30) est satisfaite. Supposer que les commandes u et T^{in} sont tel que $u \in (\underline{u}, \overline{u})$ et $T^{in} \in (\underline{T}^{in}, \overline{T}^{in}), u_{ss} \in (\underline{u}, \overline{u})$ et $T_{ss}^{in} \in (\underline{T}^{in}, \overline{T}^{in})$.

Alors la dynamique initiale de la loi de commande est:

$$\begin{pmatrix}
 u = \theta \\
 \dot{\theta} = k_{\theta} (\theta - \underline{u}) (\theta - \overline{u}) \eta \\
 T^{in} = \gamma - k_{in} (T - T_{ss}) \\
 \dot{\gamma} = k_{\gamma} (\gamma - \underline{T}^{in}) (\gamma - \overline{T}^{in}) \xi
\end{cases}$$
(3.34)

Avec $k_{\theta} > 0$, $k_{in} \ge 0$ et $k_{\gamma} > 0$, est tel que le point d'équilibre $(0,0,0, u_{ss}, T_{ss}^{in})$ du système en boucle fermée (3.29)-(3.34) est localement stable et, pour n'importe quelle condition initiale $(\psi(0), \xi(0), \eta(0), \theta(0), \gamma(0))$ avec $\theta(0) \in (\underline{u}, \overline{u})$ et $\gamma(0) \in (\underline{T}^{in}, \overline{T}^{in})$, $(\psi(t),\xi(t),\eta(t))$ converge asymptotiquement à (0,0,0) et les commandes sont tel que $\theta(t) \in (\underline{u},\overline{u})$ et $\gamma(t) \in (\underline{T}^{in},\overline{T}^{in}).$

De plus, si la condition (3.32) est prise en compte, alors pour n'importe quelle trajectoire du système en boucle fermée, commençant dans le domaine \mathcal{H} , restera dans \mathcal{H} , et $T^{in} \ge 0$ pour tout $t \ge 0$.

III.5.3. Stabilisation par la commande de la chaleur *u* et le taux de dilution *d*:

Considérant maintenant le système de réacteur décrit par l'équation (3.1), on prend le taux de dilution, d, comme une nouvelle entrée de commande, qui agit ainsi que la chaleur transférée d'entrée u, et présente une nouvelle variation de variable $\delta d = d - d_{ss}$.

En conséquence, le système (3.1) devient:

$$\begin{cases} \dot{\psi} = C\tilde{r}(\psi^{r},\xi) + d(\psi^{in} - \psi) \\ \dot{\xi} = -(q_{1} + d_{ss} + \delta d - B_{2}) + q_{1}\eta + \delta d(T^{in} - T_{ss}) + B_{1}P^{r}\psi \\ \dot{\eta} = -q_{2}\eta + q_{2}\xi + \delta u \end{cases}$$
(3.35)

Dans la proposition suivante, on montre comment ce système peut être stabilisé et comment la condition (3.22) est modifiée par l'introduction encore d'une autre entrée de commande, à savoir le taux de dilution d.

Proposition 3: Considérer le CSTR décrit dans l'équation (3.35) et supposer que les hypothèses 1-4 sont prises en considération. la chaleur de réaction $\tilde{B}(\psi^r, \xi)$ comme dans l'équation (3.4) et supposant que :

$$B_2(T^{in}) + \frac{\alpha_3 M}{\alpha_2} \overline{\Omega}^{in} \le d_{ss}, \tag{3.36}$$

Où $B_2(T^{in})$ est comme dans l'équation (3.7) avec $T = T^{in}$, d est le taux de dilution, α_2 et α_3 sont comme dans les équations (3.9) et (3.10), respectivement, M est comme dans l'équation (3.11), $\overline{\Omega}^{in} = max_{\forall x^r} ||(P^r)^T B_1^T(T^{in})||$ et $B_1^T(T^{in})$ est comme dans l'équation (3.6) avec $T = T^{in}$,

alors il existe :

une loi de commande:

$$\begin{cases} u = u_{ss} \\ d = d_{ss} + k_d [sat(T - T_{ss})sat(T - T^{in})] \end{cases}$$
(3.37)

Avec $k_d = min(d_{ss} - \underline{d}, \overline{d} - d_{ss})$ et sat est la fonction de saturation,

deux fonctions à valeurs réelles, $\psi(t)$ et $V(\xi, \eta)$, propres et définies positive, et une constante réelle λ^* sachant que $\dot{W} + \lambda^* \dot{V} < 0$, pour tous (ψ, ξ, η) \neq (0,0,0).

En conséquence la loi de commande (3.37) stabilise globalement asymptotiquement le système (3.35).

Remarque 3 : La condition (3.36) diffère de la condition (3.22), car elle impose une contrainte à l'exothermicité de la réaction seulement pour $T = T^{in}$ et pas pour toutes les températures T.

Preuve de la proposition 3 :

La preuve est semblable à celle de la proposition 1.

Évidemment, même dans ce cas, la loi de contrôle (3.37) peut être modifiée pour éviter l'utilisation de u_{ss} et d_{ss} .

Corollaire 3 : Considérant le CSTR décrit par les équations (3.29), et supposant que les hypothèses 1-4 sont prises en considération, et que la condition (3.36) est vérifiée. Supposons de plus que u et d sont les variables d'entrée, que $u \in (\underline{u}, \overline{u})$, que $d \in (\underline{d}, \overline{d})$, que $u_{ss} \in (\underline{u}, \overline{u})$ et que $d_{ss} \in (\underline{d}, \overline{d})$.

Alors, la dynamique initiale de la loi de commande est :

$$\begin{cases} u = \theta \\ \dot{\theta} = k_{\theta}(\theta - \overline{u})(\theta - \underline{u})\eta \\ d = v + k_{d}[sat(T - T_{ss})sat(T - T^{in})] \\ \dot{v} = k_{v}(T^{in} - T_{ss})(v - \underline{d})(v - \overline{d})\xi \end{cases}$$
(3.38)

Avec $k_{\theta} > 0$, $k_d > 0$ et $k_v > 0$, est tel que le point d'équilibre (0,0,0, u_{ss} , d_{ss}) du système en boucle fermé (42)-(45) est localement stable, et pour n'importes quelles conditions initiales

 $(\psi(0), \xi(0), \eta(0), \theta(0), v(0))$ avec $\theta(0) \in (\underline{u}, \overline{u})$ et $v(0) \in (\underline{d}, \overline{d})$, $(\psi(t), \xi(t), \eta(t))$ converge asymptotiquement vers (0,0,0) et les commandes dynamiques sont telles que : $\theta(t) \in (\underline{u}, \overline{u})$ et $v(t) \in (\underline{d}, \overline{d})$.

III.6 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons appliqué trois lois de commande non-linéaire bornée différentes, notre but était de stabiliser le système à son point d'opération optimal; En particulier, le problème de la commande de la température pour une classe générale des réacteurs chimiques a été adressé et résolu en utilisant des techniques de Lyapunov. Un modèle non-linéaire de réacteur a été employé pour synthétiser des lois de commande non-linéaire bornées qui produisent des signaux de commande sur la base des mesures disponibles seulement, et en utilisant des simples hypothèses.

Chapitre IV

Résultats de simulations
IV.1 Introduction :

Nous avons vu dans le chapitre précédent, l'aspect théorique de la commande bornée appliquée à un réacteur continu parfaitement agité (CSTR). Ainsi, en utilisant seulement les mesures disponibles, une commande a été extraite telle que la concentration du produit d'intérêt, à la sortie du réacteur, est stabilisée à sa valeur optimale [GUA-04]. 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 Description de la réaction :

Les paramètres de simulation présentés au tableau (4.1). Dans ce cas, le cyclopentenol (B) est produit à partir du cyclopentadiéne (A). Le produit consécutif, C, est le cyclopentanédiol et le produit secondaire, D, est le dicyclopentadiéne.

$$\begin{array}{c} A \longrightarrow B \longrightarrow C \\ 2A \longrightarrow D \end{array}$$

Le vecteur de concentration que l'on utilise ici, correspondant aux concentrations des produits (A) et (B) est :

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

L'objectif ici est de maximiser la concentration du produit intermédiaire B à la sortie du réacteur par une commande bornée.

La commande réelle permet de réguler la température de l'enveloppe de façon à ce que le sens de conduction soit orienté du réacteur vers l'enveloppe, en effet, la température de l'enveloppe est inférieure à la température du réacteur; cela s'explique par les réactions exothermiques présentes dans le système de réaction Van der Vusse.

1.		1 0 0 7 1 0 12	. 1
κ_{10}	=	1.287 1012	h-1
k_{20}	=	$1.287 \ 10^{12}$	h^{-1}
k_{30}	=	9.034 10 ⁹	$1.mol^{-1}.h^{-1}$
E_1	=	9758.3	Κ
E_2	=	9758.3	Κ
E_3	=	8560.0	Κ
$\Delta H_{ m AB}$	=	4.20	kJ.mol ⁻¹
$\Delta H_{ m BC}$	=	-11.00	kJ.mol ⁻¹
$\Delta H_{ m AD}$	=	41.85	kJ.mol ⁻¹
ρ	=	0.9342	kg.l ⁻¹
$C_{ m p}$	=	3.01	kJ.kg ⁻¹ .K ⁻¹
d	=	14.19	h^{-1}
$T_{\rm in}$	=	403	Κ
$T\left(0 ight)$	=	298	Κ
x_{in}	=	5.1	$mol.l^{-1}$
A_r	=	0.215	m^2
k_w	=	4032	kJ.h ⁻¹ .m ⁻² .K ⁻¹
V	=	10	L
$x_1(0)$	=	1	$mol.l^{-1}$
$x_2(0)$	=	0	$mol.l^{-1}$

Tableau (4.1) – Paramètres de simulation – réaction Van de Vusse

IV.3 Simulations des commandes appliquées au réacteur chimique :

L'entrée de commande u est la transmission de chaleur, tandis que les entrées additionnelles de commande sont la température d'alimentation de réacteur T^{in} et le taux de dilution $d = \dot{V}/V_R$ exprimé comme le débit normalisé par le volume de réacteur. Ces entrées de commande sont soumises à des contraintes telles que :

$$-150kJ/min \le u \le 0kJ/min$$
, 368 $K \le T^{in} \le 405 K$ et $0.05min^{-1} \le d \le 0.53min^{-1}$.

Les taux de réaction k_i sont des fonctions de la température de réacteur T, et suivent la loi d'Arrhenius, et quelle que soit les conditions initiales du système, les trajectoires des concentrations obtenues en état isotherme, c.-à-d. $T = T_{ss}$, pour le système :

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = \frac{F}{V}(x_A^{in} - x_1) - k_1(T)x_1 - k_3(T)x_1^2 \\ \dot{x}_2 = -\frac{F}{V}x_2 + k_1(T)x_1 - k_2(T)x_2 \end{cases}$$
(4.1)

convergent tous vers le même point d'équilibre $x_{ss} = (x_{ss}^A, x_{ss}^B)$.

Par conséquent, les propriétés de stabilité de ce système peuvent être étudiées en appliquant la commande proposée dans la section III.5 du chapitre III.

IV.3.1 commande par la chaleur *u*:

En commandant le réacteur par une loi de commande dynamique monovariable de la forme :

$$\begin{cases} u = \theta, \\ \dot{\theta} = k_{\theta} (\theta - \overline{u}) (\theta - \underline{u}) \eta. \end{cases}$$
(4.2)

En utilisant la mesure de l'erreur sur la température de l'enveloppe $\eta = T_j - T_j^{ss}$, afin de stabiliser le réacteur sous la contrainte : $-150kJ/min \le u \le 0kJ/min$

Les résultats de la simulation de cette loi de commande sont représentés ci-dessous.



Figure (4.1) – Profil de la température de l'enveloppe pour la 1^{ere} commande u



Figure (4.2) - Profil de la température du réacteur T pour la 1^{ère} commande u



Figure (4.3) - Profil de la commande θ pour la 1^{ère} commande u



Figure (4.4) - Profil de la concentration x_1 pour la 1^{ère} commande u



Figure (4.5) - Profil de la concentration x_2 pour la 1^{ère} commande u

D'après le graphe de la concentration x_B représenté ci-dessus, on peut remarquer que la concentration s'accroit avec un temps de montée de 10 *min* après elle oscille un peu avant de se stabiliser sur sa valeur finale de régime permanent, avec un dépassement de 9%, et un pic à 13 *min*. On peut considérer que la concentration s'est stabilisée et a atteint son régime permane au bout de 25 *min*.

Les graphes de la température du réacteur et de l'enveloppe ont presque la même forme sauf que la température du réacteur se stabilise à une valeur plus élevée que celle de l'enveloppe.

Et on remarque aussi que la commande est presque nulle au début et elle commence à agir à partir de 13 *min* jusqu'à ce qu'elle devienne constante et le système soit stable.

IV.3.2 Commande par la chaleur u et la température d'alimentation T^{in} :

La deuxième loi de commande dynamique multivariables contient deux variables d'entrée u et T^{in} , et les variables mesurées sont les erreurs sur la température de l'enveloppe T_i et la température du réacteur T. Elle est de la forme :

$$\begin{cases} u = \theta, \\ \dot{\theta} = k_{\theta} \left(\theta - \underline{u} \right) \left(\theta - \overline{u} \right) \eta, \\ T^{in} = \gamma - k_{in} \left(T - T_{ss} \right), \\ \dot{\gamma} = k_{\gamma} \left(\gamma - \underline{T}^{in} \right) \left(\gamma - \overline{T}^{in} \right) \xi \end{cases}$$

$$(4.3)$$

Et elle soumise aux contraintes suivantes :

$$\begin{cases} -150kJ/min \leq u \leq 0kJ/min, \\ 368 K \leq T^{in} \leq 405 K. \end{cases}$$

Les résultats de la simulation de cette loi de commande sont représentés ci-dessous.



Figure (4.6) - Profil de la température de l'enveloppe T_j pour la 2^{ème} commande u et T^{in}



Figure (4.7) - Profil de la température du réacteur T pour la 2^{ème} commande u et T^{in}



Figure (4.8) - Profil de la commande θ pour la 2^{ème} commande u et T^{in}



Figure (4.9) - Profil de la commande T^{in} pour la 2^{ème} commande u et T^{in}



Figure (4.10) - Profil de la commande γ pour la 2^{ème} commande u et T^{in}



Figure (4.11) - Profil de la concentration x_1 pour la 2^{ème} commande u et T^{in}



Figure (4.12) - Profil de la concentration x_2 pour la 2^{ème} commande u et T^{in}

On remarque dans cette partie que les courbes de T_j et T ont presque la même forme, elles commencent à s'accroître de leurs points de départ, et elles atteignent leurs valeurs d'équilibre et se stabilise après 8 *min* pour T_j et 11 *min* pour T.

La concentration x_B s'accroît jusqu'à ce qu'elle atteigne sa valeur d'équilibre après 11*min*, puis elle fait un dépassement de 7,53% ; enfin, elle se stabilise après 14 *min*. Et pour x_A , elle augmente de 0 à 3,75*mol/l* dans les 5 premières minutes, puis elle diminue jusqu'à t = 12min où elle devient presque constante et égale à 2,3*mol/l*.

En ce qui concerne la commande, on remarque que la première variable d'entrée u ne sort pas du domaine de sa contrainte, elle reste presque nulle pendant les 11 premières minutes, et après elle commence à varier entre -150 et 0 kJ/min afin de se stabiliser dans la 20iéme minute à la valeur107kJ/mol . Pour la 2éme variable d'entrée, elle augmente très rapidement dans les 3 premières minutes, après elle diminue un peu pendant 7 minutes afin de se stabiliser à la valeur 403K.

IV.3.3 Commande par la chaleur *u* et le taux de dilution *d*:

En commandant le CSTR par une loi de commande dynamique multivariables qui contient deux variables d'entrée u et d, en utilisant toujours les mesures des erreurs de la température de l'enveloppe T_i et la température du réacteur T. Elle est de la forme :

$$\begin{pmatrix}
 u = \theta, \\
 \dot{\theta} = k_{\theta} \left(\theta - \underline{u} \right) \left(\theta - \overline{u} \right) \eta, \\
 d = v + k_{d} \left[sat(T - T_{ss}) sat(T - T^{in}) \right], \\
 \dot{v} = k_{v} \left(T^{in} - T_{ss} \right) \left(v - \underline{d} \right) \left(v - \overline{d} \right) \xi.
\end{cases}$$
(4.4)

Et elle soumise aux contraintes suivantes :

$$\begin{cases} -150kJ/min \le u \le 0kJ/min, \\ 0.05min^{-1} \le d \le 0.53min^{-1}. \end{cases}$$

Les résultats de la simulation de cette loi de commande sont représentés ci-dessous



Figure (4.13) - Profil de la température de l'enveloppe T_j pour la 3^{ème} commande u et d



Figure (4.14) - Profil de la température du réacteur T pour la 3^{ime} commande u et d



Figure (4.15) - Profil de la commande θ pour la 3^{ème} commande u et d



Figure (4.16) - Profil de la commande d pour la 3^{ime} commande u et d



Figure (4.17) - Profil de la concentration x_1 pour la 3^{ime} commande u et d



Figure (4.18) - Profil de la concentration x_2 pour la 3^{ème} commande u et d

D'après le graphe de la concentration x_B représenté ci-dessus, on peut remarquer que la concentration s'accroit avec un temps de montée de 7 *min* après elle oscille avant de se stabiliser sur sa valeur finale de régime permanent, avec un dépassement de 20%, et un pic à t = 12 min. On peut considérer que la concentration s'est stabilisée et a atteint son régime permanent au bout de 15 *min*.

Les graphes de la température du réacteur et de l'enveloppe ont presque la même forme, sauf que la température du réacteur se stabilise à une valeur plus élevée que celle de l'enveloppe.

La commande θ est presque nulle au début et elle commence à agir à partir de la sixième minutes jusqu'à ce qu'elle devienne constante et le système soit stable. Ses valeurs ne sort pas de l'intervalle [-150,0]Kj/min.

La commande *d* est presque constante au début et elle commence à agir à partir de t = 10 min jusqu'à ce qu'elle devienne constante et le système soit stable. Ses valeurs ne sort pas de l'intervalle $[0.05, 0.53] \text{min}^{-1}$.

IV.3.4 Analyse des résultats de simulation :

La figure (4.18) ci-dessous représente les résultats de l'application des trois lois de commande dynamiques afin de comparer les profils de la concentration x_B pour ces différentes commandes.



Figure (4.19) - Profil de la concentration x_2 , pour les trois commandes

En comparant ces trois graphes, on peut conclure que la concentration du produit B se stabilise rapidement pour les deux dernières commandes, et que la troisième commande possède un dépassement considérable et un temps de montée inférieur à ceux des deux premières commandes, par contre la deuxième commande possède un dépassement inférieur à 5% et un temps de monté plus élevé que celui de la troisième commande, la première commande est monovariable et avec un petit dépassement mais lente par rapport aux autres commandes.

Ces résultats de simulation démontrent clairement l'amélioration qui peut être obtenue en employant des variables d'entrée supplémentaire.

Remarque : les résultats de comparaison des profils de x_B sont les mêmes que ceux des profils de *T* et T_i .

IV.3.5 Régulation par PID :

Les régulateurs PID ont été traditionnellement appliqués dans l'industrie. Ils sont habituellement robustes pour les modèles incertains puisque leur conception est partiellement indépendante du modèle du système, mais dépend du réglage.

On choisit l'entrée du régulateur PID l'erreur sur la température de l'enveloppe T_i :

$$e = T_j - T_j^{ss}$$

Le choix des paramètres de régulateur PID se fait à l'aide de PID Tuner.

Présentation du PID Tuner :

PID Tuner fournit une méthode de réglage PID à simple boucle rapide et largement applicable pour les blocs de régulation PID Simulink. Avec cette méthode, On peut régler les paramètres PID pour parvenir à une conception robuste avec le temps de réponse souhaité.

Le PID Tuner:

- Calcule automatiquement un modèle linéaire à partir du modèle de système. Le PID Tuner considère le système comme la combinaison de tous les blocs entre la sortie du régulateur PID et son entrée. Ainsi, le système comprend tous les blocs dans la boucle de commande, à part le régulateur lui-même.
- Calcule automatiquement une conception initiale du PID avec un équilibre entre la performance et la robustesse. sa conception initiale se base sur la réponse fréquentielle du modèle linéaire du système en boucle ouverte.
- Fournit une interface graphique pour aider à affiner de manière interactive les performances du régulateur PID pour répondre aux exigences de conception.







Figure (4.21) – Profil de la commande *u* par PID

D'après le graphe de la concentration x_B représenté ci-dessus, on peut remarquer que la concentration s'accroit avec un temps de montée de 6 *min* après elle oscille avant de se stabiliser sur sa valeur finale de régime permanent, avec un dépassement de 6%, et un pic à 8 *min*. On peut considérer que la concentration s'est stabilisée et a atteint son régime permane au bout de 20 *min*.

La commande u s'accroît pendant 2 *min* jusqu'à ce qu'elle atteigne une valeur maximale de 408 *Kj/min*, puis elle décroît dans un intervalle de 13 *min* après elle devient constante.

L'avantage de régulation par le PID est que sa régulation est partiellement indépendante du modèle du système, mais elle n'a pas répondu à l'exigence posée par la contrainte $u \in [-150,0]Kj/min$, donc physiquement n'est pas réalisable.

IV.4 Conclusion :

Nous avons vu d'après les différentes simulations effectuées dans ce chapitre, l'intérêt principal de l'application de la commande non-linéaire bornée qui est de stabiliser le CSTR à son point d'opération optimal sous les contraintes du système, en revanche la régulation par PID donne une entrée qui dépasse les limites posées par les contraintes. Les résultats de simulation nous ont montré clairement l'amélioration qui peut être obtenue en employant des variables d'entrée supplémentaire, c'est-à-dire une loi de commande multivariable. Les difficultés rencontrées dans les réacteurs chimiques, sont ceux des mesures disponibles, ainsi, on ne disposait que des mesures de température.

CONCLUSION GENERALE

CONCLUSION GENERALE

L'objectif de ce mémoire était l'application d'une commande non linéaire bornée sur un procédé chimique. L'idée maîtresse était de maximiser la concentration d'un certain produit d'intérêt à la sortie du réacteur en disposant que des mesures de la température.

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, et le problème essentiel qui se posait était le manque de mesures disponibles, ainsi, on ne disposait que des mesures de la température. En particulier, le problème de la commande de température pour cette classe des réacteurs chimiques a été adressé et résolu en utilisant des techniques de Lyapunov.

Sous des simples hypothèses, la commande de température a été réalisée en présence d'une commande non-linéaire bornée; et la stabilité du système en boucle fermée a été démontrée en utilisant la théorie de stabilité de Lyapunov.

L'approche proposée offre quelques avantages importants comprenant la contrainte manipulant des possibilités et la simplicité informatique: les seules conditions à accomplir sont des conditions simples et faisables, à savoir que les signaux de commande d'état d'équilibre sont admissibles.

L'un des avantages de cette méthode c'est qu'elle respecte les contraintes sur les variables d'entrées du système, ce qui n'est pas le cas dans la régulation PID.

Le résultat de ce travail est de donner une solution pour surmonter le problème de l'estimation des variables d'état par une commande qui exige qu'une partie des variables d'état soit mesurable. Enfin quelques simulations numériques, illustrant les résultats théoriques, sont présentées.



Annexe

Théorème de stabilité de Lyapunov

Dans cette méthode, on va chercher une fonction scalaire appelée fonction de Lyapunov, notée V(x) et montrer que cette fonction décroît en fonction du temps. La norme du vecteur d'état décroît et tend vers un point d'équilibre.

Théorème 1 :

Soit v(x) fonction à valeur réelle dont l'argument est le vecteur $x \in R^n$

Alors elle est dite définie positive sur un espace $\Gamma(0) \subset \mathbb{R}^n$ si seulement si :

$$V(\mathbf{x}) > 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma(0) \tag{A.1}$$
$$V(\mathbf{x}) = 0 \implies \mathbf{x} = 0$$

Théorème 2 :

Soit v(x) fonction à valeur réelle dont l'argument est le vecteur $x \in \mathbb{R}^n$

Alors elle est dite définie négative sur un espace $\Gamma(0) \subset \mathbb{R}^n$ si seulement si :

$$V(\mathbf{x}) < 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma(0) \tag{A.2}$$
$$V(\mathbf{x}) = 0 \implies \mathbf{x} = 0$$

Théorème 3 :

Un point d'équilibre x=0 est asymptotiquement stable s'il existe une fonction scalaire V(x)dont la dérivée est continue telle que :

$$V(\mathbf{x}) > 0 \quad \forall x \neq 0 \tag{A.3}$$
$$\dot{V}(x) < 0 \forall x \neq 0$$

Soit le système non linéaire $\dot{x} = f(x) + g(x) \cdot u$ avec $x \in \mathbb{R}^n$, $u \in \mathbb{R}^n$

On cherche une loi de commande $u = \phi(x)$, afin que le système en boucle fermée possède un point d'équilibre asymptotiquement stable. Pour cela, on utilise la fonction de Lyapunov définie positive, et on cherche à déterminer u tel que :

$$\dot{V}(x) = \frac{\partial V}{\partial x} [f(x) + g(x).\phi(x)] < 0$$
(A.4)



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.
- [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.
- [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.
- [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.
- [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.
- [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.