

QUELQUES PROPRIETES DES SYSTEMES REACTIONNELS UTILES POUR L'ESTIMATION ET LA COMMANDE DES PROCEDES

D. Dochain

*CESAME, Université Catholique de Louvain, 4-6 av. G. Lemaître, 1348 Louvain-la-Neuve, Belgium
Fax : 32-10-472180, e-mail : dochain@csam.ucl.ac.be*

Abstract

L'objectif de ce texte est de donner un aperçu de certaines propriétés structurelles des modèles dynamiques de systèmes réactionnels, en particulier (mais pas uniquement) des procédés chimiques ou biochimiques, qui peuvent s'avérer intéressantes pour l'analyse ou la synthèse d'outils d'estimation et de commande des procédés. Nous aborderons en particulier la notion d'invariants réactionnels (qui permettra en particulier de réécrire une partie de la dynamique du procédé de manière indépendante de la cinétique) et de perturbation singulière (qui permet de généraliser la notion d'états quasi-stationnaires). Nous parlerons aussi d'une transformation permettant de diagonaliser la matrice des coefficients stoechiométriques (utile dans le cas de la mise en oeuvre d'estimateurs de paramètres) et d'une condition simple basée sur le schéma réactionnel du procédé permettant de mettre en évidence la présence éventuelle de réponse inverse. Et nous ferons le lien entre la commande adaptative linéarisante et le régulateur PI.

1 INTRODUCTION

Les procédés chimiques et biochimiques constituent les éléments clés de la classe de systèmes réactionnels. Bien connaître et comprendre les propriétés de cette classe de systèmes peut s'avérer particulièrement utile lorsqu'il s'agit de comprendre leurs spécificités et de développer et mettre en oeuvre des outils de surveillance (capteurs logiciels) et de commande. L'objectif principal de ce texte sera d'illustrer ce point de vue via la mise en évidence de quelques propriétés structurelles des modèles de systèmes réactionnels et de leur lien avec la conception et la mise en oeuvre d'outils de surveillance et de commande de procédés. Dans le reste de ce texte, on se concentrera sur les milieux réactionnels homogènes. Ceci dit, diverses propriétés mises en évidence ici se retrouvent dans le cas non homogène (par exemple, réacteurs tubulaires) [5]. Nous commencerons par introduire le modèle dynamique, que nous appellerons "modèle dynamique général pour systèmes réactionnels en milieu homogène" (Section 2). La Section 3 sera consacrée à une transformation d'état qui s'avère reliée à la notion d'invariant réactionnel et utile pour la conception d'observateurs d'état indépendants de la connaissance de la cinétique. A la Section 4, nous parlerons de réduction de modèle en utilisant la notion de perturbation singulière. La Section 5 sera dédiée à l'introduction d'une transformation d'état qui permet de diagonaliser la matrice des coefficients stoechiométriques. Cette transformation s'avère utile dans différentes situations dont la calibration des paramètres de conception d'un estimateur de paramètres indépendamment de la dynamique (non linéaire) du système. Les deux dernières sections seront consacrées à la commande des procédés : à la Section 6, nous ferons le lien entre la commande linéarisante adaptative et le régulateur PI (proportionnel-intégral) qui est et reste la structure de commande de référence en automatique; et dans la Section 7, nous verrons dans quelles conditions on peut s'attendre à voir apparaître le phénomène de réponse inverse.

2 MODELE DYNAMIQUE GENERAL DE SYSTEMES REACTIONNELS EN MILIEU HOMOGENE

Considérons un système réactionnel dans lequel un certain nombre de composants interagissent au sein de m réactions. Considérons également que le milieu réactionnel est homogène (typiquement, un réacteur infiniment mélangé). Les réactions sont possiblement non isothermes. On peut alors obtenir les équations dynamiques du système en considérant des bilans de matière pour les divers composants et un bilan d'énergie thermique pour la température. Celles-ci peuvent se mettre sous la forme générique matricielle suivante [4] :

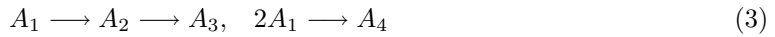
$$\frac{dx}{dt} = Kr(x) + F - Q - \frac{q}{V}x + U(T) \quad (1)$$

où x représente le vecteur des concentrations des composants (réactifs, produits, biomasse, ...) du système réactionnel et de la température du milieu réactionnel (dans le cas de systèmes non isothermes). La matrice K est la matrice des coefficients stoechiométriques (on parlera souvent plutôt de coefficients de rendement dans le cas des bioprocédés), $r(x)$ est le vecteur des vitesses de réaction, F est le vecteur des ajouts de matière, Q est le vecteur des débits gazeux sortants et $U(T)$ le terme d'échange thermique relié au système de refroidissement ou de chauffage du procédé (celui-ci dépend d'habitude de la température du milieu réactionnel). q (l/h) est le débit volumétrique d'entrée et V (l) est le volume du milieu réactionnel. Il est important de noter (ou plus prosaïquement, de rappeler) que un aspect fondamental de ce modèle est que la dynamique d'un système réactionnel est de manière générique la somme de termes de conversion (et de cinétique) $Kr(x)$ de "dynamique de transport" $F - Q - qx/V + U(T)$. Il est aussi important de constater que ce modèle est valide quelque soit le mode fonctionnement du système : batch, fed-batch ou continu [1]. La seule modification nécessaire est l'ajout de bilan pour le volume :

$$\frac{dV}{dt} = q \quad (2)$$

dans le cas du réacteur fed-batch.

Prenons comme exemple d'illustration, le schéma réactionnel de Van de Vusse [11] :



Si l'on considère que les réactions sont non isothermes, on choisira par exemple le vecteur d'état et le vecteur des vitesses de réaction suivants :

$$x = \begin{bmatrix} T \\ C_{A1} \\ C_{A2} \\ C_{A3} \\ C_{A4} \end{bmatrix}, \quad r = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{bmatrix} \quad (4)$$

où les C_{Ai} ($i = 1$ à 4) et les r_j ($j = 1, 2, 3$) représentent respectivement les concentrations des composants A_i ($i = 1$ à 4) et les vitesses des réactions 1, 2 et 3. Si aucun produit ne passe dans la phase gazeuse, la matrice K et les vecteurs F , Q et U se mettent alors sous la forme suivante :

$$K = \begin{bmatrix} -\frac{\Delta H_1}{\rho C_p} & -\frac{\Delta H_2}{\rho C_p} & -\frac{\Delta H_3}{\rho C_p} \\ -1 & 0 & -2 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \frac{q}{V} T_{in} \\ \frac{q}{V} C_{in} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad Q = 0, \quad U = \begin{bmatrix} \frac{hA}{\rho C_p V} (T_c - T) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

avec ΔH_i ($i = 1, 2, 3$) les enthalpies de chaque réaction, ρ et C_p la densité et la chaleur spécifique du fluide, T_{in} et C_{in} la température et la concentration du fluide entrant, h , A et T_c le coefficient thermique de l'échangeur de chaleur, sa surface d'échange, et la température du fluide dans l'échangeur.

3 TRANSFORMATION D'ETAT, INVARIANTS REACTIONNELS ET CONCEPTION D'OBSERVATEURS ASYMPTOTIQUES

Dans le modèle (1), définissons le rang de la matrice K par p . De manière générale, si les m réactions considérées sont indépendantes, p sera égal au nombre de réactions ($p = m$)¹. Considérons la partition d'état suivante :

$$x = \begin{bmatrix} x_a \\ x_b \end{bmatrix} \quad (6)$$

tel que la sous-matrice K_a est de plein rang ($\text{rang}(K_a) = p$). On peut réécrire le modèle sous la forme suivante :

$$\frac{dx_a}{dt} = K_a r(x) + F_a - Q_a - \frac{q}{V} x_a + U_a(T) \quad (7)$$

$$\frac{dx_b}{dt} = K_b r(x) + F_b - Q_b - \frac{q}{V} x_b + U_b(T) \quad (8)$$

On peut alors énoncer la propriété suivante : pour le modèle (1), il existe une transformation d'état

$$z = A_0 x_a + x_b \quad (9)$$

avec A_0 solution de l'équation matricielle :

$$A_0 K_a + K_b = 0 \quad (10)$$

tel que le modèle (1) peut se mettre sous la forme équivalente suivante :

$$\frac{dx_a}{dt} = K_a r(x) + F_a - Q_a - \frac{q}{V} x_a + U_a(T) \quad (11)$$

$$\frac{dz}{dt} = -\frac{q}{V} z + A_0(F_a - Q_a + U_a(T)) + F_b - Q_b + U_b(T) \quad (12)$$

L'intérêt de la propriété est qu'on obtient un modèle dont une partie de la dynamique (équation (12)) est indépendante de la cinétique $r(x)$. Cette propriété correspond à la notion d'invariant réactionnel [12] dans le cas de systèmes fermés ($F = Q = U = q = 0$). On observe alors que l'équation (12) se réduit à : $\frac{dz}{dt} = 0$, ce qui explique la notion d'*invariant réactionnel*.

Cette propriété peut s'avérer très utile pour la conception de capteurs logiciels qui permettent de reconstruire les variables non mesurées d'un procédé. Il est bien connu que si les modèles de bilan constituent la base pour modéliser la dynamique de procédés, souvent le point faible majeur est la modélisation de la cinétique (par manque de modèles appropriés et/ou de données expérimentales assez infomatives pour rendre les modèles suffisamment fiables). Il est donc important de pouvoir s'affranchir de la connaissance de la cinétique pour fournir des valeurs fiables des variables non mesurées. C'est le cas de l'observateur "asymptotique" [1], [4], [6].

Considérons que q variables (concentrations et, possiblement, température dans le cas non isotherme) sont mesurées en ligne, avec $q \geq p$. Appelons x_1 le vecteur des variables mesurées et mettons dans un vecteur x_2 les variables non mesurées :

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (13)$$

On peut réécrire z en fonction de x_1 et x_2 :

$$z = A_1 x_1 + A_2 x_2 \quad (14)$$

¹Un cas typique de réactions dépendantes est la réaction chimique à l'équilibre où l'on considère formellement deux réactions avec les mêmes coefficients stoechiométriques et des taux de réactions distincts et de signe opposé. Notons que formellement, on peut toujours considérer que l'on a qu'une seule réaction dont la vitesse de réaction est la différence des vitesses de chaque réaction et qui peut donc être soit positive soit négative.

L'observateur asymptotique calcule la valeur de x_2 sur base des équations (12) et (14) :

$$\frac{d\hat{z}}{dt} = -\frac{q}{V}\hat{z} + A_0(F_a - Q_a + U_a(T)) + F_b - Q_b + U_b(T) \quad (15)$$

$$\hat{x}_2 = A_2^+(\hat{z} - A_1x_1) \quad (16)$$

où A_2^+ est un inverse à gauche de la matrice A_2 . Dans la cas fréquent où $q=p=m$, A_2^+ est l'inverse de A_2 ($A_2^+ = A_2^{-1}$). Attirons l'attention sur le fait que la sous-matrice K_1 associée au vecteur des variables mesurées doit être de plein rang (c'est le cas si les réactions sont indépendantes et si les variables du vecteur x_1 sont indépendantes²).

La figure 1 présente des résultats de mise en oeuvre de l'observateur dans la cas d'un réacteur à lit fixe de synthèse d'éthyl tertio-butyl éther (ETBE), utilisé en particulier comme additif dans l'essence sans plomb [10] [6]. Les réactifs de la synthèse d'ETBE sont l'éthanol et l'isobutène :



et la réaction est exothermique ($\Delta H = -40$ kJ/kmole). La variable mesurée utilisée pour l'observateur asymptotique est la température; celle-ci est mesurée en quatre points du réacteur (dont l'entrée et la sortie) et dans l'échangeur de chaleur. La figure 1 illustre la reconstruction des concentrations en éthanol C_A , isobutène C_B et ETBE C_D aux deux points internes du réacteur (indices 1 et 2) et à la sortie (indice 3).

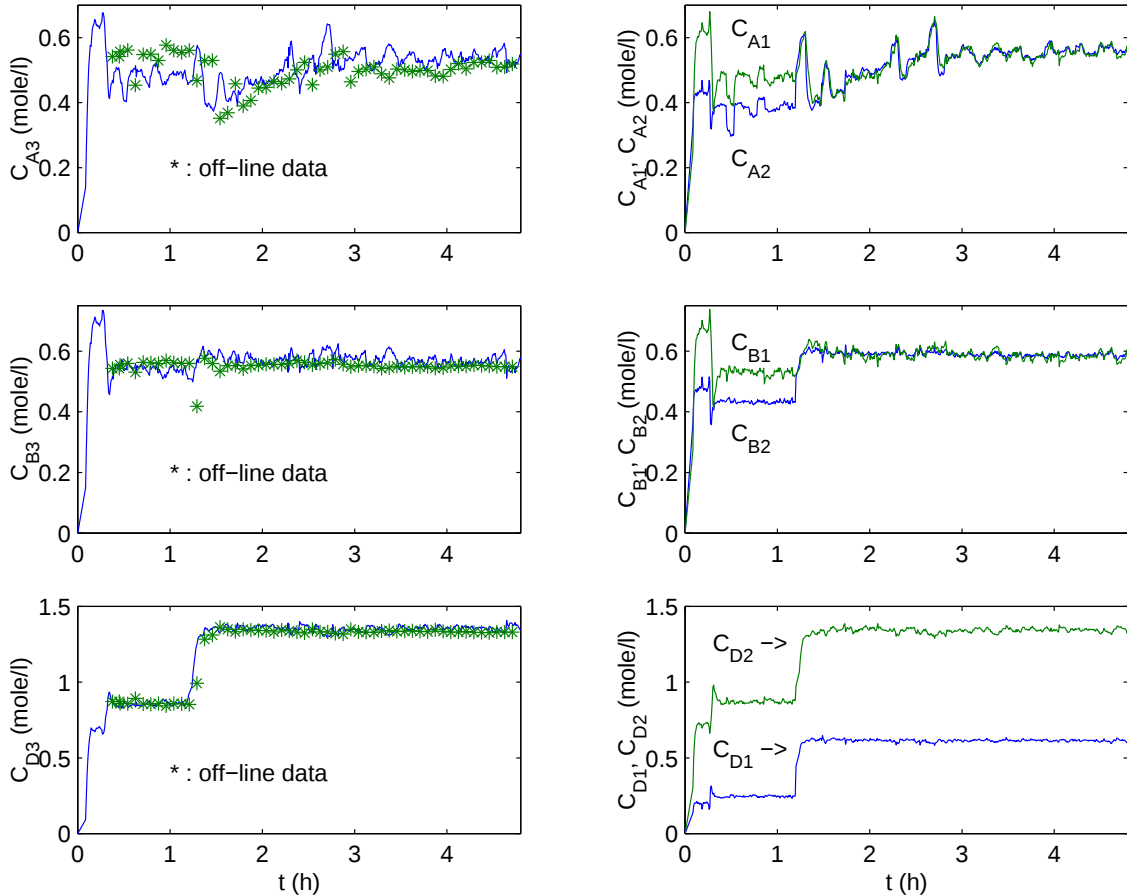


Figure 1: *Observateur asymptotique appliqué à un procédé de synthèse d'ETBE*

²Un exemple de perte d'indépendance des variables est la cas du quotient respiratoire égal à un dans un procédé aérobie [1]

Une extension intéressante des observateurs asymptotiques sont les observateurs à intervalles (e.g. [13], [17]), qui exploitent les propriétés de coopérativité du système [20].

4 DIAGONALISATION DE LA MATRICE DES COEFFICIENTS STOECHIOMETRIQUES ET CALIBRATION D'ESTIMATEURS DE PARAMETRES

Revenons au modèle dynamique général (1) pour lequel nous considérons m variables du vecteur d'état x que nous appellerons y tel que la sous-matrice des coefficients stoechiométriques K_y est de plein rang. Alors les équations dynamiques de y s'écrivent :

$$\frac{dy}{dt} = K_y r - \frac{q}{V} y + F_y - Q_y + U_y \quad (18)$$

Considérons la transformation ζ suivante :

$$\zeta = K_y^{-1} y \quad (19)$$

Les équations dynamiques de ζ s'écrivent comme suit :

$$\frac{d\zeta}{dt} = -\frac{q}{V} \zeta + r + K_y^{-1} (F_y - Q_y + U_y) \quad (20)$$

On observe que la dynamique de ζ a la propriété qu'une vitesse de réaction est associée à chaque composante de ζ ; autrement dit, pour tout $i = 1$ à m :

$$\frac{d\zeta_i}{dt} = -\frac{q}{V} \zeta_i + r_i + f_i \quad (21)$$

où f_i est la i^{ieme} ligne du vecteur $K_y^{-1} (F_y - Q_y + U_y)$.

Cette propriété est utile par exemple pour la calibration d'estimateurs de paramètres, en particulier dans le cas de l'estimation en ligne de vitesses de réaction [16]. Souvent dans ce cas, on s'intéresse à l'estimation non pas du taux de réaction au complet mais plutôt à un paramètre de l'expression cinétique. Par exemple, on voudra estimer le taux spécifique de croissance μ d'une réaction de croissance ($r = \mu X$), où X est la concentration en biomasse; ou la constante cinétique k_0 dans une réaction d'ordre α ($r = k_0 C^\alpha$). On peut alors réécrire le vecteur des vitesses de réaction r comme le produit d'une matrice diagonale $G(x)$ (fonction, de manière générale, des variables du système) et d'un vecteur de paramètres à estimer en ligne θ : $r = G(x)\theta$. L'équation (18) devient :

$$\frac{dy}{dt} = K_y G(x) \theta - \frac{q}{V} y + F_y - Q_y + U_y \quad (22)$$

On peut alors utiliser le capteur logiciel suivant [1] [16] pour estimer θ sur base des mesures de y :

$$\frac{d\hat{y}}{dt} = K_y G(x) \hat{\theta} - \frac{q}{V} y + F_y - Q_y + U_y - \Omega(y - \hat{y}) \quad (23)$$

$$\frac{d\hat{\theta}}{dt} = [K_y G(x)]^T \Gamma (y - \hat{y}) \quad (24)$$

Les matrices Ω et Γ sont les gains de l'estimateur. La calibration de l'estimateur se fait via le choix de valeurs appropriées des éléments de Ω et Γ . La règle de base est que la matrice $\Omega^T \Gamma + \Gamma \Omega$ soit définie négative. Ceci dit, il est important de savoir que la vitesse de convergence de l'estimateur dépend de la valeur des variables x via $G(x)$. En effet, la matrice d'état du système d'erreur d'estimation :

$$e = \begin{bmatrix} y - \hat{y} \\ \theta - \hat{\theta} \end{bmatrix} \quad (25)$$

est égale à :

$$A = \begin{bmatrix} \Omega & K_y G(x) \\ (K_y G(x))^T \Gamma & 0 \end{bmatrix} \quad (26)$$

On peut résoudre cette difficulté en utilisant la transformation ci-dessus. En effet, dans ce cas, l'estimateur de paramètres se met sous la forme suivante :

$$\frac{d\hat{\zeta}}{dt} = G(x)\hat{\theta} - \frac{q}{V}\zeta + K_y^{-1}(F_y - Q_y + U_y) - \Omega(\zeta - \hat{\zeta}) \quad (27)$$

$$\frac{d\hat{\theta}}{dt} = \Gamma(\zeta - \hat{\zeta}) \quad (28)$$

Puisque $G(x)$ est diagonale et en choisissant des matrices diagonales pour Ω and Γ :

$$\Omega = \text{diag}\{-\omega_i\}, \Gamma = \text{diag}\{\gamma_i\}, \omega_i > 0, \gamma_i > 0, i = 1 \text{ à } p \quad (29)$$

on voit qu'on obtient un système d'équations différentielles du deuxième ordre qui permet d'estimer chaque paramètre inconnu indépendamment des autres paramètres. Voyons maintenant comment rendre la dynamique de l'estimateur indépendante des conditions opératoires du procédé. Pour cela, redéfinissons l'erreur d'estimation :

$$e = \begin{bmatrix} \zeta - \hat{\zeta} \\ \theta - \hat{\theta} \end{bmatrix} \quad (30)$$

dont la dynamique peut être déduite des équations (20) (27) (28):

$$\frac{de}{dt} = Ae + b \quad (31)$$

où A est une matrice bloc-diagonale avec des blocs de dimension 2 :

$$A = \text{diag}\{A_i\}, A_i = \begin{bmatrix} -\omega_i & g_i(x) \\ -\gamma_i & 0 \end{bmatrix}, i = 1 \text{ à } p \quad (32)$$

et b est égal à :

$$b = \begin{bmatrix} 0 & \frac{d\theta_1}{dt} & 0 & \frac{d\theta_2}{dt} & \dots & 0 & \frac{d\theta_p}{dt} \end{bmatrix}^T \quad (33)$$

L'équation caractéristique associée à la matrice A , $\det(\lambda I - A) = 0$, s'écrit comme suit ici :

$$\det(\lambda I - A) = \prod_{i=1}^p (\lambda^2 + \omega_i \lambda + \gamma_i g_i(x)) \quad (34)$$

L'idée centrale du choix des paramètres de calibration consiste à choisir chaque γ_i inversement proportionnel au terme correspondant $g_i(x)$:

$$\gamma_i = \frac{\bar{\gamma}_i}{g_i(x)}, \bar{\gamma}_i > 0, i = 1 \text{ à } p \quad (35)$$

On peut alors réécrire l'équation caractéristique (34) comme suit :

$$\det(\lambda I - A) = \prod_{i=1}^p (\lambda^2 + \omega_i \lambda + \bar{\gamma}_i) \quad (36)$$

autrement dit, la dynamique de l'estimateur est maintenant indépendante des conditions opératoires. Un tel choix de paramètres de calibration correspond à une transformation de Lyapunov [15]. Un choix intéressant est de considérer des pôles doubles, autrement dit:

$$\bar{\gamma}_i = \frac{\omega_i^2}{4} \quad (37)$$

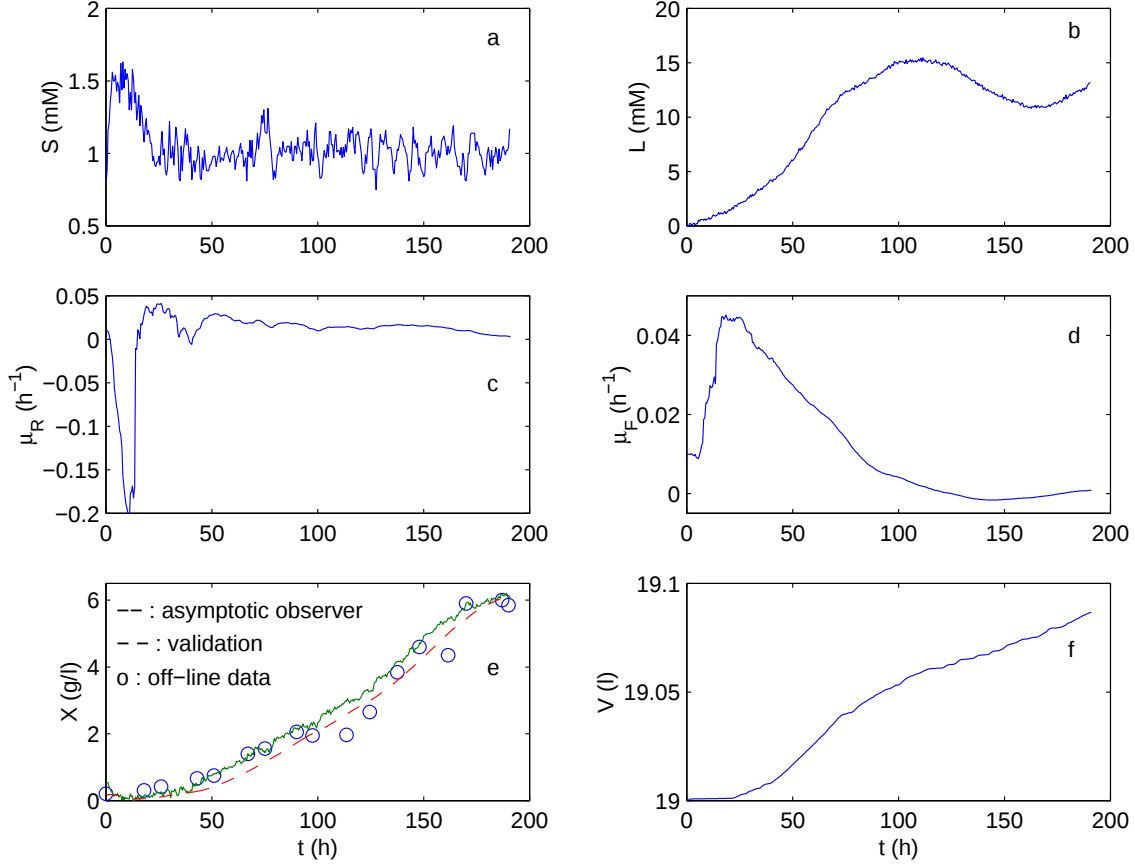
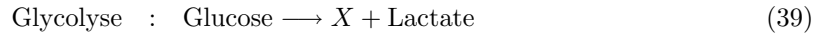
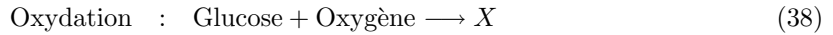


Figure 2: *Estimation de taux spécifiques de croissance pour une culture de cellules animales*

Dans ce cas, la calibration de chaque estimateur se réduit au choix d'un seul paramètre ω_i . Cela permet d'avoir une procédure de calibration qui a le double avantage d'être simple (un seul paramètre de calibration par paramètre inconnu) et flexible (chaque paramètre de calibration peut avoir une valeur distincte dépendamment de la vitesse de variation de chaque paramètre inconnu).

La figure 2 illustre l'application de ce résultat à l'estimation de 2 taux spécifiques de croissance μ_R (réaction d'oxydation) and μ_F (réaction de glycolyse) d'un procédé fed-batch de production de cellules animales dans un réacteur pilote de 22 litres [19]. Le schéma réactionnel associé peut se mettre sous la forme suivante :



Le glucose (Fig.2a) et le lactate (Fig.2b) sont mesurés via un biosenseur de type FIA (Flow Injection Analysis). En l'absence de modèles fiables pour les taux spécifiques de croissance, la validation de l'estimation s'est faite sur base de données de concentration en biomasse : la figure 2e compare les données hors ligne de biomasse (o) avec l'estimation X_v (trait discontinu) de la biomasse calculée à partir de l'équation de bilan et des valeurs estimées des taux spécifiques de croissance $\hat{\mu}_R$ et $\hat{\mu}_F$:

$$\frac{dX_v}{dt} = \hat{\mu}_R X_v + \hat{\mu}_F X_v - \frac{q}{V} X_v \quad (40)$$

Cette transformation de diagonalisation s'avère intéressante également dans d'autres cas de figure, par exemple dans la conception d'observateurs où on connaît la structure du modèle cinétique mais pas (ou mal) les paramètres du modèle cinétique (e.g. [7] [8]).

5 PERTURBATIONS SINGULIERES ET REDUCTION DE MODELE

Les modèles de systèmes réactionnels peuvent devenir rapidement d'ordre élevé dès que le nombre de composants et de réactions dont on tient compte augmente. Dans la pratique, il peut s'avérer intéressant d'utiliser des modèles de complexité réduite, éventuellement plus fiable que ce soit sur le plan de l'identification, de la surveillance ou de la synthèse de lois de commande.

Les techniques de "perturbations singulières" sont des outils qui permettent la réduction d'ordre de modèles dynamiques [14], et en particulier de modèles de systèmes réactionnels [9]. En termes très simples, l'idée centrale est de séparer la dynamique du modèle en dynamique rapide et en dynamique lente, et de ne garder que la dynamique lente tout en réduisant les équations différentielles de la dynamique rapide sous forme d'équations algébriques. Les perturbations singulières s'appliquent bien au cas de réactions lentes et de réactions rapides, et au cas de produits gazeux peu solubles. Concentrons-nous ici sur un exemple type de réactions lentes et rapides. Soit le schéma de réactions séquentielles suivant :



où la première réaction est lente et la deuxième est rapide. Le bilan dynamique des composants donne les équations suivantes :

$$\frac{dC_{A1}}{dt} = \frac{q}{V} C_{in} - \frac{q}{V} C_{A1} - r_1 \quad (42)$$

$$\frac{dC_{A2}}{dt} = -\frac{q}{V} C_{A2} + a_2 r_1 - r_2 \quad (43)$$

$$\frac{dC_{A3}}{dt} = -\frac{q}{V} C_{A3} + a_3 r_2 \quad (44)$$

où les vitesses de réaction r_1 et r_2 peuvent, en accord avec les lois de la cinétique chimique, se mettre sous la forme suivante :

$$r_1 = k_{01} C_{A1} \phi_1(C_{A1}, C_{A2}), \quad r_2 = k_{02} C_{A2} \phi_2(C_{A2}, C_{A3}) \quad (45)$$

avec ϕ_1 et ϕ_2 des fonctions positives ($\phi_1 > 0$, $\phi_2 > 0$) (et possiblement non linéaires) des composants intervenant dans la réaction (par exemple, dans le cas de réactions du premier ordre, $\phi_1 = 1$ et $\phi_2 = 1$). Le fait que la réaction est lente et la deuxième rapide peut se formaliser via les constantes cinétiques comme suit : $k_{01} \ll k_{02}$. A la limite, k_{02} est très grand, ou autrement dit, son inverse $\epsilon = \frac{1}{k_{02}}$ tend vers zéro.

Considérons la variable auxiliaire suivante : $\tilde{C} = a_3 A_2 + A_3$. Sa dynamique s'obtient directement des équations (43)(44) :

$$\frac{d\tilde{C}}{dt} = -\frac{q}{V} \tilde{C} + a_2 a_3 r_1 \quad (46)$$

De plus, en introduisant les expressions cinétiques et en divisant par k_{02} , on peut réécrire le bilan dynamique de A_2 (43) comme suit :

$$\epsilon \frac{dC_{A2}}{dt} = -\epsilon \frac{q}{V} C_{A2} + \epsilon a_2 k_{01} C_{A1} \phi_1(C_{A1} - C_{A2} \phi_2(C_{A2}, C_{A3})) \quad (47)$$

Si k_{02} est très grand, ϵ tend vers zéro, et l'équation ci-dessus devient :

$$0 = -C_{A2} \phi_2(C_{A2}, C_{A3}) \quad (48)$$

Puisque $\phi_2 > 0$, cela implique que $C_{A2} = 0$. En reprenant l'équation (46), on obtient :

$$\frac{dC_{A3}}{dt} = -\frac{q}{V} C_{A3} + a_2 a_3 r_1 \quad (49)$$

Autrement dit, comme le produit intermédiaire C_{A2} ne s'accumule pas, cela revient à considérer une seule réaction :



Ce résultat est similaire à celui qui serait obtenu en considérant l'hypothèse d'états d'équilibres quasi-stationnaires (QSS) bien connue en génie chimique. Les techniques de perturbations singulières permettent dès lors de donner un cadre formel mathématique pour ce type de méthode de réduction d'ordre de modèle [9].

Un autre cas d'application typique des techniques de perturbations singulières est le cas de produits gazeux P peu solubles, dont l'équation de bilan peut s'écrire comme suit:

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{q}{V}P - Q + r \quad (51)$$

On peut montrer (e.g. [1]) que dans ce cas, on peut réécrire l'équation de bilan sous la forme algébrique suivante :

$$Q = r \quad (52)$$

Un cas typique est la production de CH_4 dans les procédés de digestion anaérobie.

De manière générique, on constate donc les techniques de perturbations permettent de réduire à des équations algébriques les équations différentielles de produits gazeux peu solubles et de composants intervenant comme réactifs (uniquement) dans des réactions rapides. En notant x_i la concentration de chacun de ceux-ci, cela revient à mettre le terme de dérivée et le terme de dilution à zéro : $\frac{dx_i}{dt} = 0$, $\frac{q}{V}x_i = 0$.

6 CONCEPTION DE LOIS DE COMMANDE LINEARISANTE ET REGULATEUR PI

En commande des (bio)procédés, on considère souvent le débit d'entrée q comme une variable de commande potentielle. De nombreux autres cas de figures sont possibles mais nous nous concentrerons sur cette option dans un but essentiellement de simplicité de l'exposé. Considérons également qu'au moins une partie des apports de matière se trouvent en phase liquide et peuvent donc s'écrire : $F_i = qx_{i,in}/V$ où $x_{i,in}$ est la concentration en réactif x_i dans l'alimentation. Dans ce cas d'un problème de commande monovariable (une entrée de commande, une variable à commander), après avoir si nécessaire procédé à une réduction d'ordre du modèle dynamique du procédé, on peut écrire l'équation dynamique de la variable de sortie [1] comme suit :

$$\frac{dy}{dt} = \frac{q}{V}(\alpha x_{in} - y) - \beta Q + \gamma r \quad (53)$$

où x_{in} est le vecteur des concentrations de réactifs dans l'alimentation, α , β et γ sont des vecteurs provenant de la réduction d'ordre et qui sont, de manière générale, des fonctions non linéaires des coefficients stoechiométriques de la matrice K . Une manière assez naturelle de concevoir une loi de commande pour ce type de modèle est de faire de la commande adaptative linéarisante qui consiste simplement à "inverser" l'équation dynamique de sortie (53) en lui imposant une dynamique stable du type :

$$\frac{dy}{dt} = \lambda(y^* - y), \quad \lambda > 0 \quad (54)$$

pour une valeur de consigne y^* donnée, tout en intégrant une loi d'adaptation paramétrique pour estimer en temps réel les paramètres mal connus du modèle. Autrement dit, en combinant les équations (53) (54) et si on considère que l'incertitude paramétrique dans les coefficients de rendement et la cinétique, on obtient la loi de commande suivante :

$$q = \frac{V}{\hat{\alpha}x_{in} - y}(\lambda(y^* - y) + \hat{\beta}Q - \hat{\gamma}r) \quad (55)$$

où $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$ et $\hat{\gamma}r$ sont des estimations des "paramètres" α , β et γr . Les estimateurs de paramètres seront par exemple ceux vus ci-dessus (Section 4). On verra aussi (exemple ci-dessous) une approche de synthèse basée sur la stabilité "à la Lyapunov". Nous verrons aussi plus loin que ceux-ci jouent le rôle d'action intégrale dans la boucle de commande. Comme un exemple vaut mieux que de longs discours, considérons le cas de la commande de la concentration en DCO (demande chimique en oxygène) dans un procédé de digestion anaérobie. Celle-ci peut être caractérisée par le schéma réactionnel suivant :



où S_1 , S_2 , X_1 , X_2 , P_1 , P_2 représentent respectivement la matière organique, les acides gras volatils, les bactéries acidogènes et méthanigènes, le CO_2 et le CH_4 . En considérant que la variable à commander est la somme des concentrations en substrat $S = S_1 + S_2$, que la deuxième réaction est rapide et que le méthane est peu soluble, on peut réécrire l'équation de bilan pour S sous la forme suivante :

$$\frac{dS}{dt} = \frac{q}{V}(S_{in} - S) - \beta Q \quad (58)$$

où S_{in} est la concentration en DCO dans l'alimentation et Q le débit de méthane à la sortie du réacteur. Comme le schéma est déjà une simplification de la réalité et qu'en plus nous avons procédé avec la réduction d'ordre à une nouvelle simplification du modèle, il est raisonnable de penser que le paramètre β est susceptible d'être mal connu et de subir éventuellement des variations au cours du temps. La loi de commande (55) prendra alors la forme suivante :

$$q = \frac{V}{S_{in} - S}(\lambda(S^* - S) + \hat{\beta}Q) \quad (59)$$

avec S^* le point de consigne pour la DCO. Une manière de calculer en ligne la valeur de $\hat{\beta}$ est de passer par une conception de la loi de commande en imposant des critères de stabilité "à la Lyapunov" [1], ce qui revient, dans notre exemple, à inclure la loi d'adaptation paramétrique suivante :

$$\frac{d\hat{\beta}}{dt} = \delta(S^* - S), \quad \delta > 0 \quad (60)$$

Si on intègre cette équation en supposant pour simplifier la rédaction que la valeur initiale de $\hat{\beta}$ est nulle et que le débit de CH_4 est, grosso modo, constant, on peut réécrire la loi de commande adaptative comme suit :

$$q = \frac{V}{S_{in} - S} \left[\lambda(S^* - S) + \delta Q \int_0^t (S^* - S(\tau)) d\tau \right] \quad (61)$$

On constate donc que notre loi de commande a la forme de base d'un régulateur PI [15] avec une action proportionnelle $\lambda(S^* - S)$ et une action intégrale $\delta Q \int_0^t (S^* - S(\tau)) d\tau$ (via l'adaptation paramétrique) pondérées par le terme $\frac{V}{S_{in} - S}$ qui n'est rien d'autre qu'une action anticipatrice, puisqu'elle permet via S_{in} d'anticiper l'effet de ce qui est bien dans notre cas une perturbation (S_{in} n'est rien d'autre que la charge polluante qu'il s'agit de ramener en dessous d'un seuil acceptable). Le comportement d'un tel régulateur est illustré à la figure 3 dans le cas d'un réacteur pilote de 60 litres [18].

7 REPONSE INVERSE ET COMMANDE LINEARISANTE

Dans la section précédente, il a été mentionné que la loi de commande linérisante consistait à "inverser" le modèle dynamique du procédé. En jargon d'automaticien, cela revient, dans le cas linéaire, à faire des zéros du système des pôles du régulateur. Autrement dit, si le procédé est à réponse inverse (zéros "instables"), la loi de commande est alors instable, ce qui déstabilise la

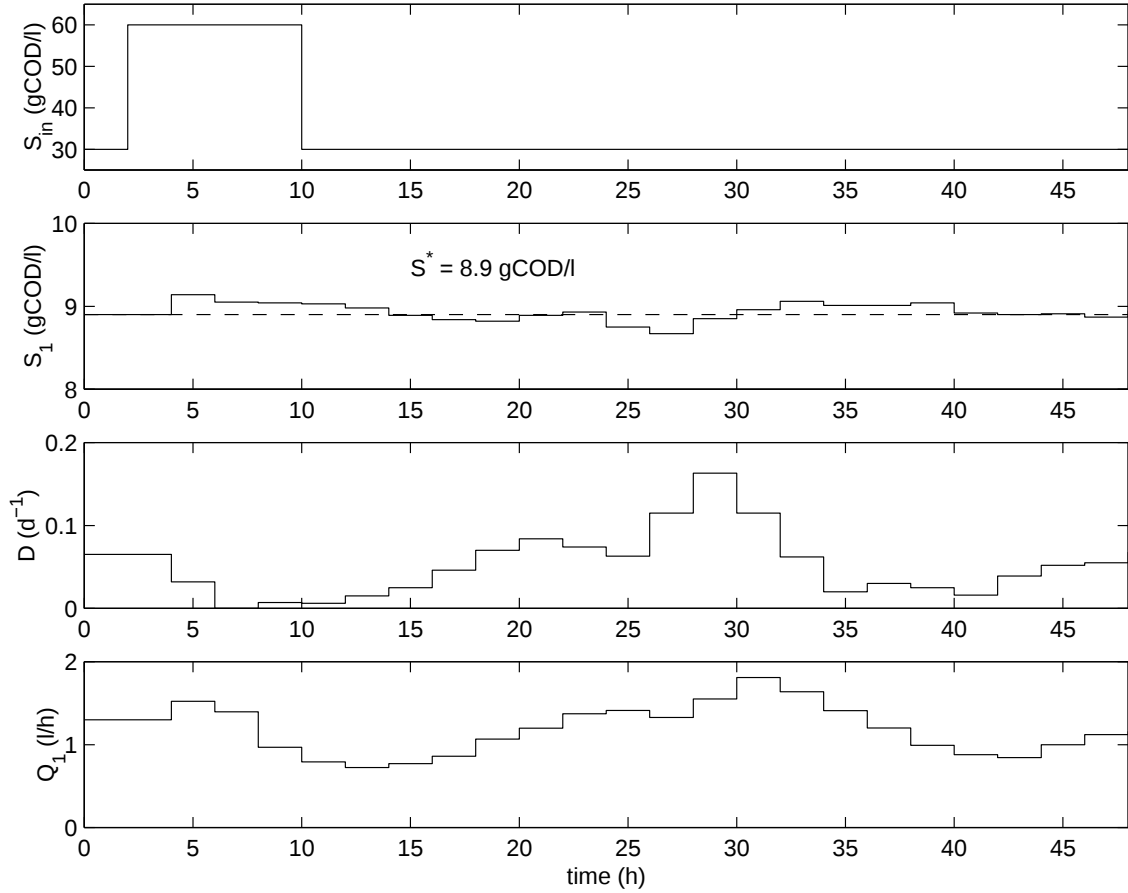


Figure 3: *Commande de la DCO dans un procédé pilote de digestion anaérobie*

boucle de régulation. On se rend compte qu'il est important de ne pas prendre de modèle à réponse inverse pour faire la synthèse d'une loi de commande linéarisante.

Les questions que l'on peut alors se poser est de savoir si le phénomène de réponse inverse est susceptible dans un système réactionnel et, si oui, dans quelles conditions il peut se manifester. La réponse tient en quelques mots : le phénomène de réponse inverse peut se présenter dès qu'il y a deux réactions séquentielles dans le cas de la relation dynamique entre le débit d'entrée q et la concentration du produit de la première réaction (qui est aussi réactif de la seconde) [3]. Reprenons le cas simple de la réaction séquentielle vue plus haut (41) dans le cas de cinétiques du premier ordre : $r_1 = k_{01}C_{A1}$, $r_2 = k_{02}C_{A2}$. La fonction de transfert entre C_{A2} et q autour de l'état d'équilibre (noté par une barre au-dessus de la valeur de la variable) est égale à :

$$H(s) = \frac{-ak_{01}\bar{C}_{in}}{V(\frac{\bar{q}}{V} + k_{01})(\frac{\bar{q}}{V} + k_{02})} \frac{s + ((\frac{\bar{q}}{V})^2 - k_{01}k_{02})}{(s + \frac{\bar{q}}{V} + k_{01})(s + \frac{\bar{q}}{V} + k_{02})} \quad (62)$$

on constate dès lors que le procédé est à réponse inverse pour toute condition opératoire telle que le carré du rapport du débit d'entre $\bar{q}$ correspondant sur le volume du réacteur V est inférieur au produit des constantes cinétiques $k_{01}k_{02}$.

Plusieurs solutions pour contourner la difficulté dans le cadre de la comande linéarisante sont suggérées dans [3], dont la réduction d'ordre telle que vue précédemment ou une version dynamique de la loi de commande.

References

- [1] Bastin G. and D. Dochain (1990). On-line Estimation and Adaptive Control of Bioreactors. *Elsevier, Amsterdam*.
- [2] Bernard O., M.Z. Hadj-Sadok and D. Dochain (1999). Dynamical modelling and state estimation of anaerobic wastewater treatment plants. *Proc. EEC'99*, CD-rom, paper F1028-1, 5p.
- [3] Dochain D. (1992). Adaptive control algorithms for non minimum phase nonlinear bioreactors. *Comp. Chem. Eng.*, 6, 449-462.
- [4] Dochain D., M. Perrier and B.E. Ydstie (1992). Asymptotic observers for stirred tank reactors. *Chem. Eng. Sci.*, 47, 4167-4178.
- [5] Dochain D. (1994). Contribution to the Analysis and Control of Distributed Parameter Systems with Application to (Bio)chemical Systems and Robotics. *Thèse d'Agrégation de l'Enseignement Supérieur, Université Catholique de Louvain, Belgique*.
- [6] Dochain D. (2000). State observers for tubular reactors with unknown kinetics, *J. Proc. Control*, 10 (2-3), 259-268.
- [7] Dochain D. and M. Pengov (2000). State observers for processes with uncertain kinetics. *Proc. ADCHEM2000*, 171-176.
- [8] Dochain D. and M. Perrier (2002). A state observer for processes with uncertain kinetics. *Proc. ACC*, 4, 2873-2878.
- [9] Duchêne P. and P. Rouchon (1996). Kinetic scheme reduction via geometric singular perturbation techniques. *Chem. Eng. Sci.*, 51 (20), 4661-4672.
- [10] Francoise O. (1993). Modélisation et Commande Adaptative de Réacteurs Tubulaires. Application a la Synthèse de l'Ethyl Tertio-butyl Ether. *Thèse de doctorat, Université Catholique de Louvain, Belgique*.
- [11] Froment G.F. and K.B. Bischoff (1990). Chemical Reactor Analysis and Design. *John Wiley, New York*.
- [12] Gavalas G.R. (1968). Nonlinear Differential Equations of Chemically Reacting Systems. *Springer Verlag, Berlin*.
- [13] Gouzé J.L., A. Rapaport and M.Z. Hadj-Sadok (1999). Interval observers for uncertain biological systems. *J. Ecological Modelling*.
- [14] Kokotovic P., H.K. Khalil and J. O'Reilly (1986). Singular Perturbation Methods in Control : Analysis and Design. *Academic Press, London*.
- [15] Perrier M. and D. Dochain (1993). Evaluation of control strategies for anaerobic digestion processes. *Int. J. Adaptive Cont. Signal Processing*, 7 (4), 309-321.
- [16] Perrier M., S. Feye de Azevedo, E.C. Ferreira and D. Dochain (2000). Tuning of observer-based estimators : theory and application to the on-line estimation of kinetic parameters. *Control Eng. Practice*, 8 (4), 377-388.
- [17] Rapaport A. and D. Dochain (2003). Interval observers for uncertain processes. *submitted for publication*.
- [18] Renard P., D. Dochain, G. Bastin, H. Naveau and E.J. Nyns (1988). Adaptive control of anaerobic digestion processes: a pilot-scale application. *Biotech. and Bioeng.*, 31, 287-294.
- [19] Siegwart P., K. Male, J. Côté, J.H.T. Luong, M. Perrier and A. Kamen (1999). Adaptive control at low-level glucose concentration to study HEK-293 cell metabolism in serum pure cultures. *Biotechnol. Progress*, 15, 608-616.
- [20] Smith H.L. (1995). Monotone Dynamical Systems : an Introduction to the Theory of Competitive and Cooperative Systems. *American Math. Society, Providence, Rhode Island*.