PolyPublie
Polytechnique Montréal

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
UNIVERSITÉ D'INGÉNIERIE

Titre: Title:	Recherche adaptative d'extremum sur des réacteurs convection-réaction
Auteur: Author:	Nicolas Hudon
Date:	2004
Type:	Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis
Référence: Citation:	Hudon, N. (2004). Recherche adaptative d'extremum sur des réacteurs convection-réaction [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. https://publications.polymtl.ca/7488/

Document en libre accès dans PolyPublie
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: PolyPublie URL:	https://publications.polymtl.ca/7488/
Directeurs de recherche: Advisors:	Michel Perrier, Martin Guay, & Denis Dochain
Programme: Program:	Non spécifié

Ce fichier a été téléchargé à partir de PolyPublie, le dépôt institutionnel de Polytechnique Montréal
This file has been downloaded from PolyPublie, the institutional repository of Polytechnique Montréal

https://publications.polymtl.ca

NOTE TO USERS

This reproduction is the best copy available.

UMI®

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

RECHERCHE ADAPTATIVE D'EXTREMUM SUR DES RÉACTEURS CONVECTION-RÉACTION

NICOLAS HUDON
DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE CHIMIQUE)
JUIN 2004

© Nicolas Hudon, 2004.

Library and Archives Canada

Published Heritage Branch

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Bibliothèque et Archives Canada

Direction du Patrimoine de l'édition

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence
ISBN: 0-612-97953-9
Our file Notre référence
ISBN: 0-612-97953-9

NOTICE:
The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

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

AVIS:
L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

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

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

RECHERCHE ADAPTATIVE D'EXTREMUM SUR DES RÉACTEURS CONVECTION-RÉACTION

présenté par : HUDON, Nicolas

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

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

M. FAVIS Basil, Ph.D., président

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

M. GUAY Martin, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

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

M. GOURDEAU Richard, Ph.D., membre

The rare scholars who are nomads by choice
are essential to the intellectual welfare
of the settled disciplines.

- Benoit Mandelbrot

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier mon directeur de recherche, le Professeur Michel Perrier, pour son soutien au cours des 4 années de notre collaboration qui a débuté avec un modeste projet estival. Je le remercie tout particulièrement pour sa confiance et les discussions sur la commande de procédés, l'histoire du contrôle, l'éducation et bien d'autres que j'aie eues avec lui. J'espère collaborer encore longtemps avec vous.

Je remercie également les Professeurs Martin Guay et Denis Dochain pour leur immense contribution à la réalisation de ce projet. Je les remercie particulièrement pour leur accueil lors de mes fréquents séjours à Kingston et lors de mon séjour à Louvain-la-Neuve.

J'aimerais aussi remercier Dr. Ilse Smets qui, lors de son court séjour à Polytechnique, a vu naître l'idée de ce projet et qui m'a aidé, particulièrement pour le chapitre 3 du présent mémoire. J'aimerais aussi remercier les étudiants de l'URCPC (actuels et anciens) de m'avoir enduré pendant toutes ses années. Je vous souhaite le plus grand succès dans vos projets et vos carrières respectives.

Finalement, je tiens à dédier ce mémoire à ma famille pour leur support au cours de toutes ces années : ma mère, mon père et mes soeurs. Sans vous, rien de ceci n'aurait de sens.

Résumé

L'objectif principal de ce projet de recherche est d'étudier la commande et l'optimisation de réacteurs pistons avec réactions multiples. Ce problème convection-réaction est modélisé par un système d'équations différentielles partielles hyperboliques (possiblement non-linéaires). De ce fait, ce problème en est de commande de systèmes à paramètres répartis. L'objectif est de maximiser en-ligne une fonction du vecteur de concentrations à la sortie du réacteur. On ajoute à la fonction objectif des contraintes de température pour éviter la formation d'un point chaud. L'idée est d'utiliser le maximum d'information sur les profils de température et de concentrations lors de la synthèse de la loi de commande.

Ce projet adresse quelques sujets qui sont revisités tout au long de ce mémoire : commande des systèmes à paramètres répartis, commande optimale des profils, commande adaptative par recherche d'extremum et simulation numérique des équations aux dérivées partielles.

Afin d'optimiser le système en ligne, nous étendons certains résultats récents de la commande adaptative par recherche d'extremum développés pour les systèmes de dimension finie à des systèmes distribués. Un algorithme de contrôle et d'estimation qui prend en compte les contraintes sur la température est développé à l'aide d'une fonctionnelle de Lyapunov en supposant que la cinétique de réaction est inconnue. En utilisant ce critère de stabilité, il est démontré que cet algorithme de commande amène le système à un profil optimal si le système est suffisamment excité.

Deux exemples d'application sont utilisés ici, soient les réactions de Williams-Otto et de van de Vusse. Dans les deux cas, l'algorithme d'estimation-commande amène le système dans un voisinage de son optimum.

Abstract

The main objective of this research project is to study the control and the optimization of plug-flow reactors with multiple reactions. These convection-reaction systems are modeled by (possibly non-linear) hyperbolic partial differential equations. Therefore, the control problem developed here is a sub-class of distributed parameters system control theory. The objective is to maximize a given function of the concentration vector at the end of the reactor. To avoid the formation of hot spots, we add temperature constraints to the objective function. The key idea here is to use the maximum of the profile information in the controller design.

The project addressed a few subjects that are reviewed all along the thesis : distributed parameters systems control, optimal profile control, adaptive extremum seeking control systems and numerical simulation of partial differential systems.

We assume that the reaction kinetics are unknown. To optimize the system on-line, we extend recent results of adaptive extremum seeking control for lumped parameters systems to the system under consideration. An estimation and a control algorithm that take account of temperature constraints are developed based on a Lyapunov functional. Using this stability criteria, we show that the algorithm steers the system to its optimum if the persistency of excitation condition is met.

We applied the algorithm to the on-line optimization of two well-known benchmark problems in the literature : the Williams-Otto reaction and the van de Vusse reaction. In both cases, the controller/estimator scheme brings the system to a small neighbourhood of an optimum profile.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE iv

REMERCIEMENTS v

RÉSUMÉ vi

ABSTRACT viii

TABLE DES MATIÈRES ix

LISTE DES TABLEAUX xii

LISTE DES FIGURES xiii

CHAPITRE 1 INTRODUCTION 1

1.1 Problématique 1

1.2 Objectifs de la recherche 4

1.3 Organisation du mémoire 5

1.4 Principales contributions 6

CHAPITRE 2 COMMANDE DES SYSTÈMES À PARAMÈTRES RÉPARTIS 7

2.1 Commande optimale 8

2.2 Commande adaptative 10

2.3 Stabilité au sens de Lyapunov pour les systèmes à paramètres répartis 11

2.4 Application aux réacteurs tubulaires 12

CHAPITRE 3 FORMULATION DU PROBLÈME 15

3.1 Conception et optimisation de systèmes avec réactions multiples . . 16

3.2 Modélisation d'un réacteur piston idéal 21

3.3 Propriétés du modèle 23

3.3.1 Classification des EDP 24

3.3.2 Propriétés dynamiques 25

3.4 Trajectoires optimales 27

3.4.1 Principe du Maximum 27

3.4.2 Méthodes numériques de commande optimale 33

CHAPITRE 4 DÉVELOPPEMENT DE L'ALGORITHME DE COMMANDE 39

4.1 Revue de la commande par recherche d'extremum 40

4.1.1 Développements classiques 41

4.1.2 Analyse par la méthode de la moyenne 43

4.1.3 Analyse par la méthode directe de Lyapunov 44

4.2 Étapes préliminaires à l'application 46

4.2.1 Rappel du problème à l'étude 46

4.2.2 Profils à l'équilibre 48

4.2.3 Paramétrisation des profils optimaux 50

4.3 Développement de l'algorithme de commande 53

4.3.1 Reformulation du problème d'optimisation avec contraintes . 54

4.3.2 Design de l'estimateur et du contrôleur 55

4.4 Analyse de convergence et d'optimalité 59

CHAPITRE 5 APPLICATION NUMÉRIQUE 69

5.1 Simulation des EDP 70

5.1.1 Revue des méthodes 70
5.1.2 Méthode des lignes 71
5.2 Application à la réaction de van de Vusse 72
5.2.1 Description de la réaction 73
5.2.2 Conception du contrôleur 74
5.3 Application à la réaction de Williams-Otto 88
5.3.1 Description de la réaction 88
5.3.2 Conception du contrôleur 89

CHAPITRE 6 CONCLUSIONS ET RECOMMANDATIONS . . 101
6.1 Conclusions générales 101
6.2 Recommandations et travaux futurs 102

RÉFÉRENCES 104

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 5.1 Paramètres de simulation - réaction de van de Vusse 75
Tableau 5.2 Synthèse de l'algorithme de contrôle 76
Tableau 5.3 Temps de simulation en fonction des pas de discrétisation . 80
Tableau 5.4 Paramètres de contrôle - réaction de van de Vusse 85
Tableau 5.5 Paramètres de simulation - réaction de Williams-Otto . . . 90
Tableau 5.6 Paramètres de contrôle - réaction de Williams-Otto 97

LISTE DES FIGURES

Figure 3.1 Réacteur tubulaire 21
Figure 3.2 Tranche infinitésimale d'un réacteur tubulaire 21
Figure 3.3 Commande optimale par paramétrisation du contrôle 37

Figure 4.1 Schéma commande par recherche d'extremum 40
Figure 4.2 Schéma de commande par recherche d'extremum - Krstić et. al. 44
Figure 4.3 Schéma de commande par recherche d'extremum - Guay et.al. 45
Figure 4.4 Description physique du réacteur considéré 46
Figure 4.5 Fonctions barrières logarithmique 55

Figure 5.1 Méthodes des lignes 72
Figure 5.2 Profils de $C_B(z,t)$ pour différents nombres de points de discrétisation - van de Vusse. 79
Figure 5.3 Profils de $T_J(z,t)$ pour différents nombres de points de discrétisation - van de Vusse. 80
Figure 5.4 Profils de $T(z,t)$ pour différents nombres de points de discrétisation - van de Vusse. 81
Figure 5.5 Influence du gain K_z sur la fonction objectif - van de Vusse . 82
Figure 5.6 Influence du gain K_d sur la fonction objectif - van de Vusse . 82
Figure 5.7 Influence du gain γ sur la fonction objectif - van de Vusse . . 83
Figure 5.8 Influence du nombre de bases la fonction objectif - van de Vusse 84

Figure 5.9 Influence du nombre de bases la fonction objectif - van de Vusse 84
Figure 5.10 Profil du produit désiré - van de Vusse 86
Figure 5.11 Évolution du produit désiré à la sortie du réacteur - van de Vusse 86
Figure 5.12 Profil de température - van de Vusse 87
Figure 5.13 Profil de température dans la chemise - van de Vusse 87
Figure 5.14 Profils de $X_P(z,t)$ pour différents nombres de points de discrétisation - Williams-Otto. 91
Figure 5.15 Profils de $T_J(z,t)$ pour différents nombres de points de discrétisation - Williams-Otto. 92
Figure 5.16 Profils de $T(z,t)$ pour différents nombres de points de discrétisation - Williams-Otto. 93
Figure 5.17 Influence du gain K_z sur la fonction objectif - Williams-Otto 94
Figure 5.18 Influence du gain K_d sur la fonction objectif - Williams-Otto 95
Figure 5.19 Influence du gain γ sur la fonction objectif - Williams-Otto . 95
Figure 5.20 Influence du nombre de bases sur la fonction objectif - Williams-Otto 96
Figure 5.21 Influence de σ sur la fonction objectif - Williams-Otto 97
Figure 5.22 Profil du produit désiré - Williams-Otto 98
Figure 5.23 Évolution du produit désiré à la sortie du réacteur - Williams-Otto 98
Figure 5.24 Profil de température - Williams-Otto 99
Figure 5.25 Profil de température dans la chemise - Williams-Otto . . . 99

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

1.1 Problématique

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, l'incertitude sur les paramètres de ces modèles force souvent l'application d'une commande sous-optimale. Dans plusieurs applications, 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 et les coefficients d'échange thermiques sont des exemples typiques de paramètres difficiles à obtenir *a priori* et qui peuvent varier dans le temps.

D'autre part, il est clair que la commande des réacteurs constitue la composante centrale de la commande des procédés chimiques. L'analyse dynamique et

la commande de ces unités remontent au tout début de l'histoire de la commande des procédés (ARIS and AMUNDSON, 1958). 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. Une bonne partie de la recherche dans ce domaine se concentre sur la commande des réacteurs bien mélangés (CSTR), décrits par des équations différentielles ordinaires (EDO). Dans le cas des réacteurs tubulaires (PFR), les techniques usuelles ne suffisent pas à assurer la performance et la stabilité. Typiquement, ces réacteurs sont décrits par des équations aux dérivées partielles (EDP) (DOCHAIN, 1994). Dans le cas des réactions exothermiques, il existe un risque de formation de points chauds qui risquent de déstabiliser le réacteur et qu'une commande à la frontière ne peut éviter (KARAFYLLIS and DAOUTIDIS, 2002).

Un exemple de réacteur tubulaire est le lessiveur, unité centrale du procédé *Kraft* dans l'industrie papetière. Depuis quelques années, plusieurs chercheurs s'intéressent à la commande distribuée de cette application et suggèrent la commande des profils le long du réacteur (DOYLE III and KAYIHAN, 1999). Actuellement, la méthodologie préconisée consiste à appliquer la commande prédictive (MPC) à une discrétisation du modèle (KAYIHAN, 1997). Cette approximation a pour effet une perte d'information sur la nature du système et des temps de calculs importants. Cette dernière caractéristique limite l'application de la commande et l'optimisation de tels systèmes en temps réel.

La méthode d'optimisation en ligne qui est développée dans ce mémoire est indépendante de la réaction. Cependant, d'un point de vue physique, le modèle de réacteur convection-réaction utilisé nécessite un nombre suffisant de mesures et d'actions de commande le long du réacteur, tel que présenté dans la littérature par CHRISTOFIDES (2001).

Dans le cas présent, on utilisera, au chapitre 5, deux réactions utilisées dans la

littérature de la commande de procédés et de l'optimisation des systèmes chimiques. Le système considéré ne possède pas directement d'équivalent physique. Mais, d'après les exemples décrits par RAY (1978), particulièrement la réaction de saponification, il y a lieu de croire que le développement générique contenu dans ce mémoire pourrait être, sous certaines conditions, étendu à des procédés réels.

La recherche adaptative d'extremum a pour objectif d'amener un système à son point d'opération optimal en adaptant en ligne les paramètres inconnus d'un modèle avec une structure connue (ou supposée). Cette technique a connu son essor au cours des années 1950 et 1960 (STERNBY, 1980; ÅSTRÖM and WITTENMARK, 1995), mais cette approche a graduellement disparue au profit de la commande adaptative par modèle de référence (MRAC), principalement par manque d'outils d'analyse garantissant la stabilité du système en boucle fermée. Au cours des dernières années, plusieurs équipes de chercheurs ont proposé de nouvelles approches de commande adaptative par recherche d'extremum. Entre autres, les travaux de Krstić et coll., basés sur la méthode de la moyenne, ainsi que ceux de Guay et coll., basés sur la méthode de Lyapunov, présentent des résultats intéressants d'optimisation en temps réels.

L'étude de GUAY et al. (2004*b*) présente l'application de la commande adaptative par recherche d'extremum à un réacteur CSTR où l'objectif est d'optimiser le rendement d'un système avec réactions multiples (réaction de van de Vusse). D'un point de vue de la conception des réacteurs, ce type de système est difficile à optimiser et la conception optimale est fortement fonction des paramètres cinétiques des réactions en cause (LEVENSPIEL, 1999). Dans le cas de la réaction de van de Vusse, De Vera et Varma ont montré que sous certaines conditions, un réacteur tubulaire est préférable au réacteur bien mélangé (DeVERA and VARMA, 1979). Dans le cas de réacteurs tubulaires, Bilous et Amundson ont montré, par des techniques d'analyse fonctionnelle, que le profil de température optimal peut

être déterminé (BILOUS and AMUNDSON, 1956*a*,*b*). Cependant, dans le cas de systèmes avec cinétiques inconnues, il est clair que ces dernières solutions ne sont pas utilisables.

1.2 Objectifs de la recherche

L'objectif principal de la recherche présentée dans ce mémoire consiste à étendre la méthodologie de recherche adaptative d'extremum à la commande de réacteurs piston non-isothermes, modélisés par des équations différentielles partielles hyperboliques non-linéaires.

Pour ce faire, les objectifs secondaires de cette recherche sont les suivants :

- Développer un modèle d'un réacteur piston dans lequel a cours des réactions multiples.
- Formuler le problème d'optimisation (dynamique) associé à ce modèle.
- Étudier la forme des profils optimaux en régime permanent de ce système.
- Effectuer la conception d'une commande adaptative par recherche d'extremum du système d'un point de vue des profils (commande distribuée).
- Vérifier la stabilité et la convergence des paramètres du système avec l'algorithme de commande adaptative développé.
- Développer un simulateur dynamique du réacteur permettant d'implanter et de tester la réponse des systèmes en boucle fermée.

1.3 Organisation du mémoire

Le chapitre 2 recense les principaux écrits portant sur la commande des systèmes à paramètres répartis, c'est-à-dire des systèmes décrits par des équations aux dérivées partielles et des équations intégro-différentielles. Dans le cas présent, la revue porte spécifiquement sur le premier type de système. Particulièrement, cette revue de littérature couvre l'extension des méthodes classiques de commande optimale et le développement de techniques de commande adaptative aux systèmes à paramètres répartis. Cette revue inclut un recensement des écrits sur l'utilisation des fonctionnelles de Lyapunov comme mesure de stabilité dans ce type de système. Quelques exemples de commande adaptative des systèmes à paramètres répartis seront montrés. Finalement, une synthèse des travaux portant sur la commande des réacteurs tubulaires dans la littérature est décrite.

Le chapitre 3 présente la formulation du problème. Principalement, il s'agit de développer un modèle du réacteur piston et d'explorer le problème d'optimisation des profils dans ce type de réacteur. De plus, le chapitre présente une revue du problème de commande et d'optimisation des systèmes avec réactions multiples et une analyse des propriétés statiques et dynamiques des réacteurs pistons.

Le chapitre 4 développe les techniques de commande adaptative par recherche d'extremum pour le problème d'intérêt. La première partie de ce chapitre recense les différentes approches de commande par recherche d'extremum et présente les deux méthodes d'analyse actuellement les plus utilisées (méthode de la moyenne et deuxième méthode de Lyapunov). Ensuite, le mémoire présente le développement d'une commande distribuée basée sur les techniques de Lyapunov. Il est aussi montré que, sous condition de persistence d'excitation, l'algorithme amène le système à l'étude dans le voisinage de son optimum.

Le chapitre 5 présente l'application numérique des commandes développées au cha-

pitre 4 à deux réactions bien connues dans la littérature en génie chimique, soient la réaction de van de Vusse et la réaction de Williams-Otto. Ce chapitre inclut les grandes lignes de développement et de l'analyse de la stabilité numérique du simulateur utilisé, basé sur la méthode des lignes. Ce chapitre présente aussi les principaux résultats obtenus au cours de la recherche.

1.4 Principales contributions

Ce travail présente, à la connaissance de l'auteur, la première application de la commande adaptative de profils en utilisant la méthode de recherche d'extremum. Les principales contributions à ce niveau sont les suivantes :

- Extension de la commande adaptative par recherche d'extremum à la commande de profils dans les systèmes hyperboliques non-linéaires ;
- Optimisation en temps réel de réactions multiples dans les réacteurs pistons avec cinétiques inconnues et des mesures du profil de température uniquement.

Ce travail est synthétisé dans les deux articles suivants :

a HUDON Nicolas, PERRIER Michel, GUAY Martin and DOCHAIN Denis (2004). *Adaptive Extremum Seeking Control of Non-Isothermal Tubular Reactor with Unknown Kinetics.* Accepté pour publication dans Computers and Chemical Engineering.

b HUDON Nicolas, PERRIER Michel, GUAY Martin and DOCHAIN Denis (2004). *Adaptive Extremum Seeking of Nonisothermal Tubular Reactor.* Accepté pour IEEE 43rd Conference on Decision and Control, Bahamas.

CHAPITRE 2

COMMANDE DES SYSTÈMES À PARAMÈTRES RÉPARTIS

Ce chapitre a pour objectifs de recenser les principales méthodes propres à la commande des systèmes à paramètres répartis. Le chapitre est divisé comme suit. La section 2.1 recense certains éléments classiques de la commande des systèmes à paramètres répartis. La section 2.2 présente certains résultats de développement de commande adaptative pour cette classe de problèmes. La section 2.3 montre le développement de critères de stabilité pour les systèmes décrits par des équations aux dérivées partielles à l'aide de fonctionnelles de Lyapunov. Finalement, la section 2.4 recense les applications de la commande aux réacteurs tubulaires. Il faut noter que certains éléments récents ne font pas l'objet de cette revue de littérature, particulièrement les inclusions différentielles partielles qui ouvrent la voie à de nouveaux développement dans le domaine. Le lecteur intéressé pourra consulter le livre de Aubin à cet effet (AUBIN, 1990) et plus particulièrement l'article (AUBIN, 1986). Cette revue porte uniquement sur la classe des systèmes à paramètres répartis représentée par des équations différentielles partielles et de ce fait, on n'aborde pas

les équations intégro-différentielles obtenues, par exemple dans l'étude des modèles de population (MANTZARIS and DAOUTIDIS, 2004).

Il est important de faire ici une distinction entre deux types de conception de commande des systèmes à paramètres répartis. Comme les systèmes à paramètres répartis sont de dimension infinie mais que les ordinateurs qui supportent leur simulation sont de dimension finie, il est nécessaire de faire une approximation dans la pratique. Certaines méthodes de conception utiliseront donc une pré-approximation, c'est-à-dire que la conception de la commande s'appuie sur une discrétisation préalable du système. À l'opposé, les méthodes dites de post-approximation permettent de déterminer l'expression du contrôle en fonction du temps et de l'espace, expression qui est ensuite discrétisée lors de sa mise en oeuvre.

2.1 Commande optimale

L'extension de la théorie de la commande optimale classique aux problèmes de dimension infinie, particulièrement des systèmes décrits par des équations différentielles partielles a débuté à la fin des années 1960 (LASIECKA, 1995), particulièrement avec les travaux de Butkovskyi (BUTKOVSKIY, 1969) du côté de l'application et de Fattorini (FATTORINI, 1968), Russell (RUSSELL, 1978) et Lions (LIONS, 1968) d'un point de vue théorique. Les travaux de Butkovskyi portaient principalement sur le contrôle de systèmes représentés par des équations de diffusion de la chaleur. La théorie de la commande optimale des systèmes de dimension infinie, portant à cette époque principalement sur les systèmes linéaires, consiste à transformer le système original en un système sur un espace de Banach (ou de Hilbert) de la forme :

$$\dot{x} = A(t)x(t) + B(t)u(t) \tag{2.1}$$

$$y(t) = C(t)x(t) \tag{2.2}$$

Avec $A(t)$, $B(t)$, $C(t)$, les générateurs d'un semi-groupe continu. Cette extension a permis de transposer certains éléments de la théorie de la commande de dimension finie (BARAS and BROCKETT, 1975). Certains éléments *pathologiques* de cette transposition sont aussi apparus aux chercheurs dès cette époque (LASIECKA, 1995), notamment la distinction entre la controllabilité approximative par un opérateur de contrôle compact (RUSSELL, 1978). Cette dernière référence reprend l'ensemble des résultats (et définitions) de commandabilité, observabilité, commande optimale et stabilité obtenus avant les années 1980. L'extension de la commande optimale linéaire aux systèmes à paramètres répartis représentés dans cet espace abstrait est présenté dans la monographie de CURTAIN and PRITCHARD (1978). Il faut noter que les résultats obtenus dans cette direction théorique de recherche percent très peu au niveau de l'application, mises à part certaines études reportées dans RAY and LAINIOTIS (1978).

Les années 1980 ont permis d'étendre l'analyse en fréquence aux systèmes de dimension infinie représentés dans des espaces abstraits. Une synthèse de ces travaux se retrouvent dans CURTAIN and ZWART (1995). Dans cette optique, beaucoup de travaux sur la commande des systèmes à paramètres répartis linéaires traitent du problème de la commande robuste.

Les travaux décrits plus haut se limitent au cas linéaire. Certaines extensions au cas non-linéaire de cette approche par opérateurs abstraits sont présentés dans le livre de Barbu (BARBU, 1993). Les concepts de stabilité dans le cadre de cette approche d'espaces abstraits (notamment l'extension du principe d'invariance de Lasalle) sont reportés dans LUO et al. (1999).

Dans la littérature de la commande appliquée, il faut noter quelques extensions des outils d'analyse de la commande non-linéaire aux systèmes à paramètres répartis. Notamment la commande par modes glissants (SIRA-RAMIREZ, 1989; ORLOV, 2000; HANCZYK and PALAZOGLOU, 1995; LEVAGGI, 2002), la platitude (FLIESS et al., 1998) et les variétés invariantes (KAZANTZIS and GOOD, 2002).

2.2 Commande adaptative

La théorie des systèmes à paramètres répartis décrite jusqu'à maintenant présuppose la connaissance des paramètres du modèle utilisé. Dans bien des cas d'application, cette connaissance n'est pas disponible *a priori*. Dans un premier temps, l'intérêt des chercheurs dans le domaine a porté sur l'extension de la théorie de l'estimation en ligne des paramètres. Dans une large mesure au cours de la dernière décennie, les travaux ont porté graduellement sur l'extension de la commande adaptative aux problèmes des systèmes à paramètres répartis.

Durant les années 1970, beaucoup de travaux ont porté sur l'estimation des paramètres pour les systèmes à paramètres répartis (POLIS and GOODSON, 1976). À la connaissance de l'auteur, la littérature de l'époque présente très peu d'application de la commande adaptative aux systèmes à paramètres répartis, hormis certaines applications par pré-approximation.

À partir des années 1980, qui ont vue s'imposer la théorie de la commande adaptative, certains auteurs ont reportés des extensions des techniques de la commande adaptative aux systèmes à paramètres répartis. Particulièrement, l'extension de commande adaptative universelle (commande par λ *-tracking*) par ILCHMANN and LOGEMANN (1998); LOGEMANN and ILCHMANN (1994) aux systèmes avec retards. L'utilisation de la méthode de la moyenne pour analyser la conver-

gence d'un algorithme de commande adaptative directe a été étudiée pour les équations paraboliques par HONG and BENTSMANN (1994). BAUMEISTER et al. (1997); BÖHM et al. (1998) ont développé la technique de commande adaptative par modèles de référence (MRAC) aux systèmes à paramètres répartis. L'intérêt de ces travaux se situent particulièrement au niveau de la définition des critères de persistence d'excitation (DEMETRIOU and ROSEN, 1994). BOŠKOVIĆ and KRSTIĆ (2002*a*); BOŠKOVIĆ et al. (2003) ont appliqué la méthode de commande par *backstepping* à des systèmes à paramètres répartis, particulièrement à la commande à la frontière des réacteurs tubulaires. Cette approche résulte en une conception par pré-approximation et la qualité du contrôle devient ainsi très sensible à la discrétisation. Finalement, la commande adaptative linéarisante a été étudiée par DOCHAIN (2001). Cette approche, appliquée à des réacteurs tubulaires, consistait à faire la conception par post-approximation d'un observateur asymptotique et d'une commande adaptative linéarisante.

2.3 Stabilité au sens de Lyapunov pour les systèmes à paramètres répartis

L'étude des systèmes à paramètres répartis non-linéaires requiert l'extension de certaines notions de stabilité, bien connues dans la littérature des systèmes de dimension finie. LUO et al. (1999) présentent l'utilisation de fonctions de Lyapunov à des systèmes à paramètres répartis représentés dans des espaces abstraits. Une autre manière d'étendre l'utilisation de fonctions de Lyapunov aux systèmes à paramètres répartis est via l'utilisation de fonctionnelles de Lyapunov. Cette section brosse un portait sommaire de la littérature à ce chapitre.

Les méthodes qualitatives d'étude des systèmes à paramètres répartis ont fait leur

apparition relativement tôt dans la littérature, comme en témoigne le chapitre 5 du livre de ZUBOV (1964) et la revue de SIRAZETDINOV (1972). Les travaux de WANG (1964, 1966) sont représentatifs de la période.

D'un point de vue du génie chimique, l'analyse de la stabilité au sens de Lyapunov apparaît dans BERGER and LAPIDUS (1968) et par la suite dans dans CLOUGH and RAMIREZ (1971); LIOU et al. (1974) pour l'analyse de stabilité de réacteurs tubulaires. Diverses méthodes d'interprétation et de construction des fonctionnelles de Lyapunov apparaissent aussi à cette époque (KITAMURA and NAGAGIRI, 1977; PACZYNSKI, 1977; MOCKAITIS and ABEL, 1971; ROMICKI, 1977; GORDON, 1987)

2.4 Application aux réacteurs tubulaires

Cette section de la revue de littérature sur la commande des systèmes à paramètres répartis porte spécifiquement sur les diverses méthodes utilisées pour le contrôle des réacteurs tubulaires. On ne se restreint pas ici aux systèmes hyperboliques. Cette revue n'est pas exhaustive mais elle reprend les principales étapes de la recherche sur la commande des réacteurs tubulaires, telle que présentée, par exemple, dans CHRISTOFIDES (2001). On pointera particulièrement les travaux les plus marquants depuis la parution de ce livre.

La revue de RAY (1978) présente les applications rapportées dans la littérature jusqu'en 1977. Principalement, les applications portent sur des réacteurs concernent l'identification et la conception optimale de réacteurs à lits fixes avec comme exception la conception optimale d'un réacteur tubulaire avec réaction de saponification par NEWBERGER and KADLEC (1971).

Dans le cas linéaire, l'application de la transformée de Laplace peut être utilisée

(RAY, 1981). Typiquement, en appliquant la transformée de Laplace sur le modèle original d'équations différentielles partielles, il est possible d'obtenir un système d'équations différentielles ordinaires.

Les travaux les plus importants de cette période sont ceux de Georgakis et.al. GEORGAKIS et al. (1977*a*,*b*,*c*). Ces travaux présentent particulièrement l'application numérique de la commande des réacteurs tubulaires, par exemple la commande modale et la stabilisation par design d'observateur.

Tel que mentionné dans DOCHAIN (1994), peu de travaux ont été publiés dans le domaine pendant les années 1980, outre la commande par modes glissants par SIRA-RAMIREZ (1989). Il faut attendre les travaux de DOCHAIN (1994) et ceux de Christofides et Daoutidis (CHRISTOFIDES and DAOUTIDIS, 1996, 1998) pour voir apparaître les principales applications de la commande sur des réacteurs tubulaires. Typiquement, les travaux de cette époque traite de l'application, via certaines approximations fonctionnelles (e.g. commande modale, utilisation des éléments finis) et méthodes de réduction de ces approximations pour étendre certaines méthodes de commande robuste (CHRISTOFIDES and DAOUTIDIS, 1998), de commande adaptative (DOCHAIN, 2001).

Ces travaux, ainsi que ceux déjà mentionnés de HANCZYK and PALAZOGLOU (1995) ont amené la communauté à ré-examiner la commande des réacteurs chimiques, dans certain cas sur des procédés réels. Par exemple, RENOU (2000) et BROWN (2001) ont étudié la commande des réacteurs de blanchiment du procédé Kraft décrits par des équations convection-diffusion-réaction (modèles paraboliques).

Comme aux sections précédentes, il faut noter la tendance lourde à étendre certaines méthodes et idées de la commande non-linéaire des systèmes de dimension finie à ceux de dimension infinie. Outre le backstepping (BOŠKOVIĆ and KRSTIĆ,

2002*a*,*b*; BOŠKOVIĆ et al., 2003) et la commande par modes glissants (ORLOV and DOCHAIN, 2002), il est intéressant de noter l'utilisation de la passivité (exprimée par la deuxième loi de la thermodynamique) par ALONSO et al. (2002). CHRISTOFIDES and DAOUTIDIS (1996) présente une analyse du problème du point de vue géométrique, notamment pour la réduction des modèles.

Les travaux de WINKIN et al. (2000), LAABISSI et al. (2001) et de AKSIKAS et al. (2004) ont permis d'étudier l'existence des trajectoires dans les réacteurs tubulaires décrits par des équations hyperboliques et paraboliques. Cette connaissance permet d'envisager une meilleure compréhension de ce type de réacteur et de ce fait de la commande (possiblement par post-approxmation) de ces réacteurs.

Finalement, il faut noter un certain rapprochement entre la commande et la conception des réacteurs tubulaires, particulièrement en utilisant les théories de la commande optimale (SMETS et al., 2002). En ce sens, la technique proposée par KARAFYLLIS and DAOUTIDIS (2002) permet de montrer l'utilité de la commande non-linéaire pour garantir, en ligne, de la bonne conduite de ce type de réacteurs.

CHAPITRE 3

FORMULATION DU PROBLÈME

Ce chapitre vise à formuler et à analyser le problème de l'optimisation et de la commande des réacteurs piston. 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. Dans un premier temps, la section 3.1 présente une revue des méthodes de conception, d'optimisation et de commande des systèmes avec réactions multiples. Bien que générale, cette revue porte particulièrement sur la réaction de van de Vusse, de loin le cas le plus étudié dans le cadre de l'optimisation et de la commande des réacteurs. La section 3.2 montre le développement d'un modèle générique de réacteur piston avec réactions multiples. Ensuite, l'analyse des propriétés de tels systèmes permet de montrer les conditions d'existence et d'unicité de la solution (section 3.3). Finalement, la section 3.4 présente les méthodes analytiques et numériques qui permettent de calculer les profils optimaux dans de tels réacteurs et comment l'atteindre par la théorie de la commande optimale.

3.1 Conception et optimisation de systèmes avec réactions multiples

La théorie du calcul des réacteurs vise à concevoir un (ou plusieurs) réacteur(s) de telle sorte que la production de produits désirés d'une réaction soit optimisée. On suppose des schémas réactionels de la forme :

$$a_{i,k}C_i \xrightarrow{R_k} b_{j,k}C_j \tag{3.1}$$

pour $i = 1, 2, ..., n$, $j = 1, 2, ..., m$, $k = 1, 2, ..., r$ et $C_i \in \mathbb{R}^n_+$ et $C_j \in \mathbb{R}^n_+$, représentant la concentration des réactifs et des produits de l'ensemble des réactions R. Ici, on suppose que les coefficients stoichiométriques $a_{i,k}$ et $b_{j,k}$ sont connus. Quelques définitions, tirées de (VILLERMAUX, 1993) s'imposent avant de pousser l'étude aux réactions multiples.

La **conversion**, X_i, d'une espèce chimique i, peut s'exprimer de la manière suivante :

$$X_i = \frac{N_{i0} - N_i}{N_{i0}} \tag{3.2}$$

avec N_{i0} et N_i, le nombre de moles à l'entrée et à la sortie du réacteur, respectivement. Le **rendement en produit utile**, $Y_{j/i}$, avec i et j représentant respectivement le réactif et le produit, s'exprime :

$$Y_{j/i} = \frac{N_j}{\nu N_{i,in}} \tag{3.3}$$

avec ν, le coefficient stoichiométrique du produit j par rapport au réactif i. Le **rendement en produits parasites** $\Pi_{j/i}$ est donné par :

$$\Pi_{j/i} = \frac{\nu(N_{i0} - N_i) - N_j}{\nu N_{i0}} \tag{3.4}$$

De ces définitions, on peut tirer l'identité suivante :

$$X_i = Y_{j/i} + \Pi_{j/i} \tag{3.5}$$

Clairement, ces critères peuvent se calculer directement dans le cas de réactions simples, c'est-à-dire des réactions de la forme :

$$A + B \xrightarrow{k} C + D$$

avec A, B, C et D des espèces chimiques homogènes et k, la cinétique de réaction. Dans le cas des réactions à l'équilibre,

$$A + B \underset{k_{-r1}}{\overset{k_{r1}}{\rightleftharpoons}} C + D$$

les procédures afin d'optimiser le rendement sont aussi bien connues (FOGLER, 1999). Pour la conception de réacteurs avec réactions multiples consécutives , c'est-à-dire des réactions de la forme :

$$A \xrightarrow{k_{r1}} B \xrightarrow{k_{r2}} C$$

on définit le **rendement relatif global (ou intégral)**, $\Phi_{j/i}$, donné par :

$$\Phi_{j/i} = \frac{N_j}{\nu(N_{i0} - N_i)} = \frac{Y_{j/i}}{X_i} \tag{3.6}$$

La théorie des réacteurs chimiques permet aussi d'effectuer la conception de réacteurs avec réactions multiples parallèles (concurrentes) de la forme :

$$A \xrightarrow{k_{r1}} B$$
$$A \xrightarrow{k_{r2}} C$$

Le critère généralement utilisé dans ce cas VILLERMAUX (1993) est la **sélectivité globale**, $S_{r1,r2}$ qui est donnée par :

$$S_{r1,r2} = \frac{N_{j,r1}}{N_{j,r2}} \frac{\nu_2}{\nu_1} \tag{3.7}$$

Le problème d'intérêt dans le cadre de ce mémoire consiste en une transformation mixte, c'est-à-dire une combinaison de réactions consécutives et concurrentes. Par exemple, la réaction de van de Vusse (van de VUSSE, 1964), donnée par :

$$A \xrightarrow{k_{r1}} B \xrightarrow{k_{r2}} C$$
$$2A \xrightarrow{k_{r3}} D$$

et la réaction de Williams-Otto (WILLIAMS and OTTO, 1960) :

$$A + B \xrightarrow{r_1} 2C$$
$$B + 2C \xrightarrow{r_2} P + 2E$$
$$2C + P \xrightarrow{r_1} 3G$$

Les études sur ce type de réactions en génie chimique datent de plusieurs décennies. Levenspiel (LEVENSPIEL, 1999) associe à Denbigh le formalisme associé à ce type de réaction. Les ouvrages de référence de Villermaux (VILLERMAUX, 1993) et de Levenspiel (LEVENSPIEL, 1999) présentent quelques règles afin d'optimiser le rendement pour ce type de réactions. Typiquement, dans le cas des réacteurs avec réactions mixtes, il est possible de favoriser certaines réactions par rapport à d'autres en sachant que :

- le fonctionnement à haute température favorise les réactions possédant des énergies d'activation plus élevées ;
- le fonctionnement à haute concentration d'un réactif favorise les réactions d'ordre plus élevées ;
- le mélange défavorise les réactions d'ordre élevé ;
- la ségrégation défavorise la dégradation des composés intermédiaires.

D'un point de vue qualitatif, il ressort que la combinaison de différents types de réacteurs idéaux, soient le réacteur piston (PFR) et le réacteur bien mélangé (CSTR), améliorent le rendement de ce type de réactions mixtes.

Lorsque les règles présentées plus haut entrent en conflit, une étude quantitative est nécessaire. Dans le cas de la réaction de van de Vusse, certains critères sont présentés dans l'ouvrage de Carberry (CARBERRY, 1976). De Vera et Varma

(DeVERA and VARMA, 1979) ont développé une série de critères basés sur des cinétiques linéaires de la réaction de van de Vusse permettant de déterminer quel type de réacteur (PFR ou CSTR) permet d'obtenir le maximum du produit d'intérêt. Les travaux de PARULEKAR et al. (1988) ont étendu ces critères au cas général en utilisant des critères issues de la théorie de la commande optimale.

Finalement, ce type de problèmes a encouragé certains chercheurs à développer de nouvelles techniques afin de déterminer les combinaisons optimales de réacteurs, par exemple, en utilisant des concepts géométriques et d'espaces réalisables (FEINBERG, 1999; HILDERBRANDT and GLASSER, 1990).

La commande de réacteurs non-isothermes avec réactions multiples a fait l'objet de plusieurs études spécifiques, particulièrement la réaction de van de Vusse (voir par exemple (KRAVARIS et al., 1997)). Cette réaction a suscité un certain intérêt puisque le système est à déphasage non-minimal, c'est-à-dire qu'il présente une réponse inverse (DOYLE III et al., 1992; NIEMEC and KRAVARIS, 2003). D'un point de vue général, l'étude de la géométrie et des invariants réactionnels apparaît dans les travaux de GAVALAS (1968).

L'idée maîtresse du présent mémoire consiste à utiliser le profil de température dans un réacteur tubulaire afin d'optimiser une fonction des composition à la sortie réacteur. Une telle utilisation de la température n'est pas nouvelle, elle remonte à Bilous et Amundson qui ont étudié le problème au cours des années cinquante (BILOUS and AMUNDSON, 1956*a*,*b*). À partir des équations de bilan, ces derniers obtiennent tout d'abord une forme fermée de la solution analytique. Ils dérivent ensuite l'expression de la fonctionnelle obtenue par rapport à la température pour obtenir le profil de la température. Le problème ici réside dans la nécessité d'obtenir la solution fermée de l'équation.

3.2 Modélisation d'un réacteur piston idéal

Cette section présente, dans un premier temps, la modélisation d'un réacteur tubulaire tel que présenté à la figure 3.1.

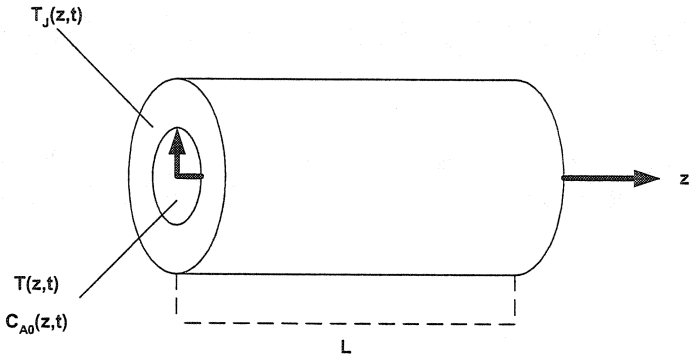

Figure 3.1 – Réacteur tubulaire

Les ouvrages de base en génie chimique présentent la dérivation des bilans de matière et d'énergie pour les réacteurs piston (e.g. FOGLER (1999)). La figure 3.2 présente une tranche infinitésimale du réacteur, en supposant que le transfert de matière est principalement l'effet de la convection (la diffusion est négligeable). Les propriétés mathématiques des réacteurs piston sont présentées dans VARMA and ARIS (1977).

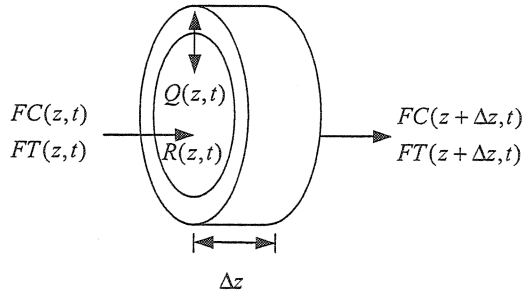

Figure 3.2 – Tranche infinitésimale d'un réacteur tubulaire

Avec F, le débit du fluide, C, le vecteur $n \times 1$ des profils de concentrations, T et

T_J les profils de température dans le réacteur et dans la chemise, respectivement. Ici, R représente le vecteur $r \times 1$ des cinétiques de réaction et Q le scalaire du taux d'échange thermique à la paroi. En supposant la masse volumique constante le long du réacteur, le bilan matière autour de cet élément est :

$$\underbrace{A\Delta z \frac{\partial C(z,t)}{\partial t}}_{\text{Taux d'accumulation}} = \underbrace{FC(z,t)}_{\text{Taux d'entrée par convection}} - \underbrace{FC(z+\Delta z,t)}_{\text{Taux de sortie par convection}} + \underbrace{A\Delta z M R(C(z,t),T(z,t))}_{\text{Taux de génération}} \tag{3.8}$$

avec M, la matrice $n \times r$ des coefficients stoichiométriques, et $A = \frac{\pi d^2}{4}$, la section du réacteur. En considérant la chaleur spécifique C_p constante, le bilan d'énergie sur cet élément est de la forme :

$$\underbrace{A\Delta z \rho C_p \frac{\partial T(z,t)}{\partial t}}_{\text{Taux d'accumulation}} = \underbrace{\rho C_p F T(z,t)}_{\text{Taux d'entrée par convection}} - \underbrace{\rho C_p F T(z+\Delta z,t)}_{\text{Taux de sortie par convection}} + \underbrace{A\Delta z R(C(z,t),T(z,t))(\Delta H^T)}_{\text{Taux de génération}} + \underbrace{(\pi d)\Delta z Q(z,t)}_{\text{Taux d'échange à la paroi}} \tag{3.9}$$

où ΔH, le vecteur $r \times 1$ des chaleurs de réactions. On suppose que le terme d'échange d'énergie à la paroi est donné par :

$$Q(z,t) = h(T(z,t) - T_J(z,t)) \tag{3.10}$$

Avec h, un coefficient d'échange, supposé constant. En divisant le bilan matière par $A\Delta z$ et le bilan d'énergie par $A\Delta z \rho C_p$ et par définition de la limite, on obtient :

$$\frac{\partial C(z,t)}{\partial t} = -v\frac{\partial C(z,t)}{\partial z} + MR(C(z,t),T(z,t)) \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial T(z,t)}{\partial t} = -v\frac{\partial T(z,t)}{\partial z} + \lambda_1 R(C(z,t),T(z,t)) + \lambda_2(T_J(z,t) - T(z,t)) \quad (3.12)$$

$$\lambda_1 = \frac{\Delta H^T}{\rho C_p}$$

$$\lambda_2 = \frac{4h}{d\rho C_p}$$

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

$$C(0,t) = C_{in} \quad (3.13)$$

$$T(0,t) = T_{in} \quad (3.14)$$

L'objectif de ce travail de recherche consistera à concevoir une commande par la température dans la chemise, $T_J(z,t)$, qui permet d'optimiser une fonction scalaire de la concentration à la sortie du réacteur de la forme :

$$y = HC(L,\cdot) \quad (3.15)$$

3.3 Propriétés du modèle

Cette section permettra de faire le point sur les propriétés mathématiques du modèle obtenu. Premièrement, on présentera la classification des équations différentielles

partielles (EDP). Cette classification est nécessaire au développement de l'approximation numérique (simulateur) au chapitre 5.

3.3.1 Classification des EDP

La classification géométrique des EDP est bien définie pour les systèmes d'ordres 1 et 2. Soit l'équation caractéristique suivante :

$$A\frac{\partial^2 f(x_1,x_2)}{\partial x_1^2} + B\frac{\partial^2 f(x_1,x_2)}{\partial x_1 \partial x_2} + C\frac{\partial^2 f(x_1,x_2)}{\partial x_2^2} + D\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1} + E\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2} + F = 0 \tag{3.16}$$

Le discriminant Δ de cette expression est donné par :

$$\Delta = B^2 - 4AC \tag{3.17}$$

Typiquement, les EDP sont qualifiées selon trois types :

- **Hyperbolique**, si $\Delta > 0$
- **Parabolique**, si $\Delta = 0$
- **Elliptique**, si $\Delta < 0$

De manière générale, ces termes ont la signification suivante (HEATH, 2002) :

Hyperbolique Ces équations décrivent des phénomènes physiques conservatif qui n'évoluent pas vers des profils spatiaux permanents (e.g. phénomène de convection).

Parabolique Ces équations décrivent des phénomènes physiques dissipatif qui évoluent vers des profils spatiaux permanents (e.g. phénomène de diffusion).

Elliptique Ces équations décrivent des phénomènes physiques de conservation qui ont atteint leur profils spatiaux permanents.

Il est aussi possible de caractériser les conditions frontières nécessaires à la solution (ou l'étude des formes des solutions) des équations différentielles partielles.

- **Conditions de Dirichlet** : $f(x_1(0), x_2(\cdot)) = 0$

- **Conditions de Neumann** : $\frac{\partial f(x_1(0), x_2(\cdot))}{\partial x_i} = 0$

Le système d'équations à l'étude (3.11, 3.12) n'est pas de deuxième ordre et de ce fait, l'application de la classification présentée ci-haut n'est pas appropriée. Cependant, la littérature suggère que les systèmes de premier ordre comme celui présenté à la section précédente se comportent comme des systèmes hyperboliques.

Cela aura une incidence importante sur la résolution numérique des équations. Typiquement, l'énergie dans un système hyperbolique est constante (contrairement à un système parabolique), c'est-à-dire que le système hyperbolique propage les perturbations aux frontières sans les atténuer. Les systèmes hyperboliques de premier ordre s'apparentent en effet à des systèmes à retard.

3.3.2 Propriétés dynamiques

Cette section présente quelques pistes liées à l'existence et l'unicité des trajectoires (profils) dans les réacteurs pistons.

Dans un premier temps, on s'intéresse aux propriétés dynamiques du modèle hyper-

bolique présenté à la section précédente. On se basera principalement sur la théorie des systèmes de dimension infinie appliquée au réacteur tubulaire. Le prochain chapitre permettra de mieux cerner certaines notions de cette théorie, principalement définies pour les systèmes linéaires (CURTAIN and ZWART, 1995), mais étendu aux systèmes non-linéaires dans LUO et al. (1999).

Pour ce qui suit, on s'intéresse surtout aux travaux publiés par LAABISSI et al. (2001); WINKIN et al. (2000); AKSIKAS et al. (2004) qui font intervenir les notions d'opérateurs dans des espaces de Hilbert pour inférer sur les notions d'existence, d'unicité et de stabilité des solutions (profils) dans les réacteurs tubulaires.

Les travaux de AKSIKAS et al. (2004) ont démontré que les trajectoires (profils) existent et sont uniques pour des conditions frontières données dans le cas des réacteurs pistons décrits par des EDP hyperboliques semi-linéaires. L'idée générale de la technique consiste à représenter le système sous la forme d'un générateur infinitésimal d'un semi-groupe de contraction non-linéaire. Dans le cas étudié en (AKSIKAS et al., 2004), il est possible de montrer que si l'opérateur est dissipatif, alors l'équilibre existe et est asymptotiquement stable. Ceci permet de montrer que le système est invariant au sens de Lasalle.

Ici, on n'assume à proprement dit aucune connaissance du terme de réaction $R(C,T)$. Tout au plus, on suppose que les termes de réactions sont Lipschitz. Nous ne tenterons donc pas de montrer l'existence et l'unicité des trajectoires dans le réacteur avec les méthodes décrites plus haut et nous nous limiterons à les supposer. Ces techniques dépassent largement les objectifs de ce mémoire. Cependant, il est possible d'envisager ces techniques dans le cadre de travaux futurs.

3.4 Trajectoires optimales

Cette section du mémoire explore les méthodes d'optimisation du système en régime permanent, c'est-à-dire lorsque $\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial T}{\partial t} = 0$. On présente les méthodes analytiques (principe du maximum de Pontryagin) et numériques pour résoudre ce type de problèmes.

3.4.1 Principe du Maximum

L'optimisation des profils de concentration et de température de réacteurs tubulaires non-isothermes est un problème qui intéresse les chercheurs depuis les années cinquante (BILOUS and AMUNDSON, 1956*a*,*b*). Dans ce qui suit, on s'attarde particulièrement à la méthode développée par SMETS et al. (2002), c'est-à-dire d'utiliser la théorie de la commande optimale pour déterminer les profils de température et de concentrations optimaux en régime permanent.

En régime permanent, les équations (3.11) et (3.12) deviennent :

$$\frac{\partial C(z)}{\partial z} = \frac{M}{v} R(C(z), T(z)) \tag{3.18}$$

$$\frac{\partial T(z)}{\partial z} = \frac{\lambda_1}{v} R(C(z), T(z)) + \frac{1}{v}\lambda_2 (T_J(z) - T(z)) \tag{3.19}$$

Le problème est complété par les conditions frontières :

$$C(0) = C_{in} \tag{3.20}$$

$$T(0) = T_{in} \tag{3.21}$$

On veut maximiser une fonction de la concentration à la sortie du réacteur en utilisant le profil de température dans la chemise $T_J(z)$. Formellement, il s'agit de résoudre :

$$\begin{aligned} &\max \mathcal{J} = HC(L) \\ &u(z) \in \mathcal{U} \\ &\text{s.t. } T_{min}(z) \leq T(z) \leq Tmax \end{aligned}$$

On pose tout d'abord un vecteur des variables d'état du système :

$$x(z) = [C(z)\ T(z)]^T$$

où $x \in \mathbb{R}_+^{(n+1)\times 1}$ et on définit $u(z) \triangleq T_J(z)$. D'après le principe du maximum de Pontryagin, l'Hamiltonien, $\mathcal{H}$, est donné par :

$$\mathcal{H} = \nu(z)^T \frac{dx(z)}{dz} \tag{3.22}$$

Avec $\nu(z) \in \mathbb{R}^{(n+1)\text{x}1}$, les états adjoints du système. À partir de la forme de (3.19), on peut déduire que l'Hamiltonien est de la forme :

$$\mathcal{H} = \phi(x, \nu) + \psi(\nu)u \tag{3.23}$$

D'après le principe du maximum, le profil optimal est obtenu pour les valeurs de u qui réalisent :

$$\mathcal{H}(x^*, u^*, \nu^*, z) = \min\mathcal{H}(x^*, u, \nu^*, z),\ u \in U \tag{3.24}$$

Sans contrainte, le problème se ramène à :

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u} = 0 \tag{3.25}$$

Cette connaissance permet d'étudier la forme de la commande optimale selon le critère reporté en (SMETS et al., 2002).

$$u(z) = u_{max} \text{ si } \psi(z) < 0$$
$$u(z) = u_{min} \text{ si } \psi(z) > 0$$
$$u(z) = u_{sing} \text{ si } \psi(z) = 0$$

L'intérêt ici est donc de connaître le signe de ψ le long du réacteur. Ici, ψ donné par :

$$\psi(z) = \frac{L\lambda_2}{v}\nu_{n+1}(z) \tag{3.26}$$

Avec le terme $\frac{L\lambda_2}{v} > 0$. Il s'agit donc d'étudier l'évolution des états adjoints, et plus particulièrement de ν_{n+1} le long du réacteur. De la théorie de la commande optimale, les états adjoints satisfont :

$$\frac{d\nu(z)}{dz} = -\frac{d\mathcal{H}}{dx} \tag{3.27}$$

Soit,

$$\frac{d\nu_{1\ldots n}(z)}{dz} = -\nu_{1\ldots n}^T \frac{L}{v} M \frac{\partial R}{\partial C_{1\ldots n}} - \nu_{n+1} \frac{L}{v} \lambda_1 \frac{\partial R}{\partial C_{1\ldots n}} \tag{3.28}$$

$$\frac{d\nu_{n+1}}{dz} = -\nu_{1\ldots n}^T \frac{L}{v} M \frac{\partial R}{\partial T} - \nu_{n+1} \frac{L}{v} \left(\lambda_1 \frac{\partial R}{\partial T} - \lambda_2 \right) \tag{3.29}$$

Avec les conditions frontières :

$$\nu(L) = [H \ 0]^T \tag{3.30}$$

En prenant la seconde dérivée par rapport à z du système (3.28 et 3.29), on a :

$$\frac{d^2\nu_{1\ldots n}(z)}{dz^2} = \frac{L}{v} \Big(- \frac{d\nu_{1\ldots n}^T}{dz} M \frac{\partial R}{\partial C_{1\ldots n}} - \nu_{1\ldots n}^T M \frac{\partial^2 R}{\partial C_{1\ldots n}^2} \frac{dx_{1\ldots n}}{dz} - \frac{d\nu_{n+1}}{dz} \lambda_1 \frac{\partial R}{\partial C_{1\ldots n}} - \nu_{n+1} \lambda_1 \frac{\partial^2 R}{\partial C_{1\ldots n}^2} \frac{dC_{1\ldots n}}{dz} \Big) \tag{3.31}$$

$$\frac{d^2\nu_{n+1}}{dz^2} = \frac{L}{v} \Big(- \frac{d\nu_{1\ldots n}^T}{dz} M \frac{\partial R}{\partial T} - \nu_{1\ldots n}^T M \frac{\partial^2 R}{\partial T^2} \frac{dT}{dz} - \frac{d\nu_{n+1}}{dz} \lambda_1 \frac{\partial R}{\partial T} - \nu_{n+1} \lambda_1 \frac{\partial^2 R}{\partial T^2} \frac{dT}{dz} \Big) \tag{3.32}$$

L'intérêt ici est de vérifier l'évolution du signe de ν_{n+1} le long de la trajectoire. On suppose pour débuter que la commande est singulière, c'est-à-dire $\psi(z) = 0$ le long du réacteur. Ce qui signifie que toutes les dérivées par rapport à z seront aussi nulles sur cet intervalle. Or, de l'équation (3.26), cela équivaut au critère suivant :

$$\nu_{n+1} = 0$$
$$\frac{d\nu_{n+1}}{dz} = 0$$
$$\frac{d^2\nu_{n+1}}{dz^2} = 0$$
$$\dots$$

En utilisant comme point de départ, l'expression des équations (3.28) et (3.29), on a :

$$\frac{d\nu_{1\dots n}(z)}{dz} = -\nu_{1\dots n}^T M \frac{\partial R}{\partial C_{1\dots n}} \tag{3.33}$$
$$0 = -\nu_{1\dots n}^T M \frac{\partial R}{\partial T} \tag{3.34}$$

et de (3.31) et (3.32), on a :

$$\frac{d^2\nu_{1\dots n}(z)}{dz^2} = -\frac{d\nu_{1\dots n}^T}{dz} M \frac{\partial R}{\partial C_{1\dots n}} - \nu_{1\dots n}^T M \frac{\partial^2 R}{\partial C_{1\dots n}^2} \frac{dC_{1\dots n}}{dz} \tag{3.35}$$
$$0 = -\frac{d\nu_{1\dots n}^T}{dz} M \frac{\partial R}{\partial T} - \nu_{1\dots n}^T M \frac{\partial^2 R}{\partial T^2} \frac{dT}{dz} \tag{3.36}$$

De (3.34), on obtient :

$$\nu_{1\dots n}^T \frac{\partial R}{\partial T} = 0 \tag{3.37}$$

On ne peut rien déduire de cette dernière équation sur la forme des états adjoints sans connaître la forme de la matrice stoechiométrique. On reviendra plus loin sur ce critère dans le cas des réactions qui nous occupent.

De (3.36), on obtient :

$$\frac{d\nu_{1\ldots n}^T}{dz} M \frac{\partial R}{\partial T} = -\nu_{1\ldots n}^T M \frac{\partial^2 R}{\partial T^2} \frac{dT}{dz} \tag{3.38}$$

En remplaçant l'expression de $\frac{d\nu_{1\ldots n}}{dz}$ de (3.33) dans (3.38), on a :

$$\left(\nu_{1\ldots n}^T M \frac{\partial R}{\partial C_{1\ldots n}}\right)^T M \frac{\partial R}{\partial T} = \nu_{1\ldots n}^T M \frac{\partial^2 R}{\partial T^2} \frac{dT}{dz} \tag{3.39}$$

les états adjoints se simplifient, ce qui amène :

$$M \frac{\partial R}{\partial C_{1\ldots n}} M \frac{\partial R}{\partial x_{n+1}} = M \frac{\partial^2 R}{\partial T^2} \frac{dT}{dz} \tag{3.40}$$

En multipliant de chaque côté par la matrice pseudo-inverse à gauche $M^\dagger$, définie par $I = M^\dagger M$, cette expression devient :

$$\frac{\partial R}{\partial C_{1\ldots n}} M \frac{\partial R}{\partial T} = \frac{\partial^2 R}{\partial T^2} \frac{dT}{dz} \tag{3.41}$$

On peut remplacer son expression par celle donnée en 3.19.

$$\frac{\partial R}{\partial C_{1\ldots n}} M \frac{\partial R}{\partial T} = \frac{\partial^2 R}{\partial T^2} \left(\frac{L}{v}\lambda_1 R(C(z), T(z)) + \frac{L}{v}\lambda_2 (T_J(z) - T(z))\right) \tag{3.42}$$

En considérant que la température, $T(z)$, est mesurée le long du réacteur, l'expression de $T_J(z)$ est donnée par :

$$T_J(z) = T(z) + \frac{v}{L\lambda_2}\left(\left(\frac{\partial^2 R}{\partial x_{n+1}^2}\right)^{-1}\frac{\partial R}{\partial C_{1\ldots n}}M\frac{\partial R}{\partial T} - \frac{L}{v}\lambda_1 R(C(z),T(z))\right) \quad (3.43)$$

En ré-injectant cette expression dans l'équation 3.19, on pourrait tenter de solutionner le problème aux valeurs initiales et finales (TPBVP) formées par les équations d'état et les équations adjointes et les conditions frontières respectives. Cela nécessite évidemment l'expression des taux de réaction. Ce problème pourrait être solutionné numériquement (par exemple, par programmation dynamique). La section suivante présente une alternative à cette approche, où l'expression de la commande n'a pas à être substituée, soit une approche numérique de la commande optimale.

3.4.2 Méthodes numériques de commande optimale

Cette sous-section traite de deux méthodes numériques de commande optimale, soit la paramétrisation de la commande telle que présentée dans (RAY, 1981; HICKS and RAY, 1971) et de la méthode du gradient. Cette dernière méthode a récemment été utilisée par BONVIN et al. (2003); SRINIVASAN et al. (2003) pour effectuer la commande optimale de réacteurs de fermentation *fed-batch*. Ce dernier problème comporte plusieurs similitudes avec l'optimisation de profils dans un réacteur tubulaire en régime permanent et est parfois qualifié de dual dans le temps du problème de réacteur piston (PARULEKAR et al., 1988).

Méthode du gradient

Cette méthode vise principalement la solution numérique du système et du système d'états adjoints. Soient les équations en régime permanent :

$$\frac{\partial C(z)}{\partial z} = \frac{L}{v} M R(C(z), T(z)) \tag{3.44}$$

$$\frac{\partial T(z)}{\partial z} = \frac{L}{v} \lambda_1 R(C(z), T(z)) + \frac{L}{v} \lambda_2 (T_J(z) - T(z)) \tag{3.45}$$

$$\frac{d\nu_{1\ldots n}(z)}{dz} = -\nu_{1\ldots n} \frac{L}{v} M \frac{\partial R}{\partial C} - \nu_{n+1} \frac{L}{v} \lambda_1 \frac{\partial R}{\partial C} \tag{3.46}$$

$$\frac{d\nu_{n+1}}{dz} = -\nu_{1\ldots n} M \frac{\partial R}{\partial T} - \nu_{n+1} (\frac{L}{v} \lambda_1 \frac{\partial R}{\partial T} - \lambda_2) \tag{3.47}$$

Le problème est complété par les conditions frontières :

$$C(0) = C_{in}$$

$$T(0) = T_{in}$$

$$\nu(L) = [-H \ 0]^T$$

L'idée de cette méthode est de minimiser la fonction coût est par itérations successives sur la commande dans la direction qui minimise le plus fortement l'expression (RAY, 1981) :

$$\delta \mathcal{J} = \int_0^L \left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u} \delta u(z) \right] dz \tag{3.48}$$

En supposant que $u(z)$ ne soit pas optimal, $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u} \neq 0$. En choisissant $\delta u(z)$ corrigé dans la direction du gradient à chaque itération sur z produit la meilleure amélioration sur $\mathcal{J}$. Soit :

$$\delta u(z) = \epsilon \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u} \right) dz \tag{3.49}$$

on obtient, pour $\epsilon > 0$:

$$\delta \mathcal{J} = \epsilon \int_0^L \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u} \right)^2 dz > 0 \tag{3.50}$$

La difficulté ici réside dans la détermination du ϵ optimal. L'algorithme de la page suivante est proposé.

- Supposer $u_i(z)$ pour $0 \leq z \leq L$, $i = 0$
- **Tant que** Convergence atteinte sur $\mathcal{J}$
  - Intégrer (3.44) et (3.45) pour $z = 0 \rightarrow L$
  - Intégrer (3.46) et (3.47) pour $z = L \rightarrow 0$
  - Supposer ϵ_j, $j = 0$
  - **Tant que** ϵ_{opt} trouvé
    - $u_j = u_i$
    - $u_{j+1} = u_j + \epsilon_j \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u}$
    - **si** $\mathcal{J}_{j+1} > \mathcal{J}_j$
      - $\epsilon_{j+1} = 2\epsilon_j$
      -
    - **sinon**
      - $\epsilon_{j+1} = \frac{\epsilon_j}{2}$
  - $u_{i+1} = u_i + \epsilon_{opt} \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u} \right)$

Malheureusement, la dépendance de la fonction objectif (qui ne fait pas intervenir la commande explicitement) par rapport à la température du réacteur est trop faible pour permettre à cet algorithme de converger.

Paramétrisation de la commande

Cette méthode utilise avantageusement des méthodes de recherche directe pour déterminer la meilleure commande en régime permanent (sous forme paramétrisée) possible. Cette méthode ne fait pas intervenir l'intégration à rebours des états adjoint).

La figure 3.3 présente cet algorithme :

On peut distinguer deux classes de paramétrisation. Dans un premier temps, en **boucle ouverte** :

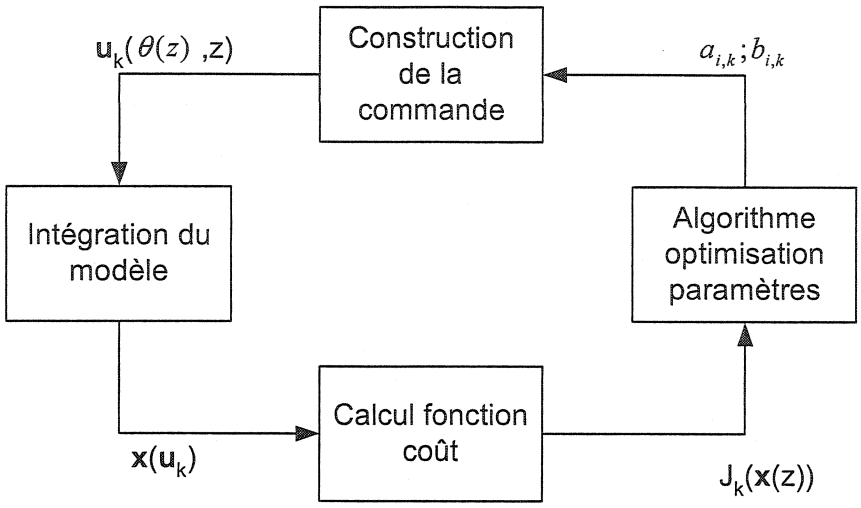

Figure 3.3 – Commande optimale par paramétrisation du contrôle

$$u_i(z) = \Sigma_{j=1}^{s} a_i \phi_{i,j}(z) \tag{3.51}$$

RAY (1981) suggère cependant lorsque possible d'utiliser une formulation par retour d'état ou de sortie (en **boucle fermée**) :

$$u_i(z) = \Sigma_{j=1}^{p} b_i \phi_{i,j}(C,T) \tag{3.52}$$

Les coefficients a_i et b_i sont déterminés par l'optimisation paramétrique par intégrations successives du système (3.44) et (3.45).

L'expérience reportée en (RAY, 1981) suggère que la convergence numérique vers une solution est plus rapide pour la formulation en boucle fermée (voir aussi HICKS and RAY (1971)).

Le défi ici est de déterminer les meilleures formes de fonction de base, $\phi(i,j)(z)$ ou $\phi(i,j)(C,T)$ pour la commande. Ici encore, la sensibilité de la fonction objectif

par rapport à la température dans le manteau est trop faible pour permettre la convergence de cet algortithme.

Les techniques numériques de commande optimale ne sont pas très intéressantes pour la solution du problème tel que formulé dans ce projet. Principalement, il faut noter que la fonction objectif n'est pas une fonction explicite de la commande. La sensibilité de la fonction coût est ici trop faible pour permettre de trouver une direction de recherche de la valeur de la commande le long du réacteur.

CHAPITRE 4

DÉVELOPPEMENT DE L'ALGORITHME DE COMMANDE

Ce chapitre présente l'extension de la méthode de la recherche adaptative d'extremum au problème développé au chapitre 3. La section 4.1 présente une revue de la littérature sur la méthode. La section 4.2 permet de paramétriser le problème d'intérêt. On présente ensuite l'application de la méthode au réacteur piston basé sur le concept de stabilité de Lyapunov (section 4.3). Finalement, la section 4.4 montre que l'algorithme de commande et d'estimation permet la convergence des paramètres et amène graduellement le système à son profil optimal sous condition d'excitation des paramètres.

4.1 Revue de la commande par recherche d'extremum

Un objectif de la commande de procédés consiste à garder un procédé à un point d'opération donné (dans la pratique, on espère que ce point d'opération est un optimum). Pour certaines applications, il peut être difficile de déterminer *a priori* ce point d'opération. L'objectif de la commande adaptative par recherche d'extremum consiste à déterminer en-ligne cet optimum et de garder le procédé à cet optimum. Dans le cadre de ce projet, on s'intéresse à un profil optimal. Le schéma 4.1 , tiré de la section 13.3 de (ÅSTRÖM and WITTENMARK, 1995) présente l'idée générale de la méthode.

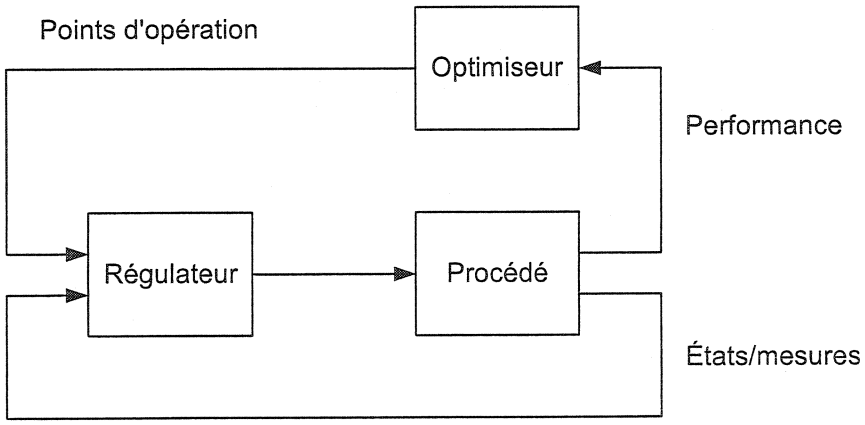

Figure 4.1 – Schéma commande par recherche d'extremum

La littérature sur la commande par recherche d'extremum est très riche. Les racines de ces méthodes remontent aux années 1950. La présente section recense la littérature sur le sujet de la manière suivante. Dans un premier temps, la section 4.1.1 présente les premiers développement de la méthode au cours des années 1950 et 1960. Principalement, il s'agit d'applications de la recherche d'extremum avec des preuves de stabilité extrêmement limitées. Les sous-sections 4.1.2 et 4.1.3 présentent

deux méthodes d'analyse qui permettent de garantir, sous certaines conditions, la stabilité des systèmes sous contrôle avec cette forme de commande. Nommément, il s'agit d'utiliser la méthode de la moyenne (section 4.1.2) ou la deuxième méthode de Lyapunov (section 4.1.3).

4.1.1 Développements classiques

Cette partie du mémoire recense les principaux travaux en commande par recherche d'extremum avant les années 1990. Le lecteur intéressé par une revue plus complète peut se référer au premier chapitre de ARIYUR and KRSTIĆ (2003) et de la revue de STERNBY (1980). La première application de cette méthode est attribuée à Leblanc dans les années 1920. Pendant les années 1950, la technique s'est imposée dans la littérature à partir du travail de DRAPER and LI (1954). La revue de la commande adaptative de ASELTINE et al. (1958) présente la commande par recherche d'extremum comme une des grandes classes de la commande adaptative. Les travaux de MOROSANOV (1957) et de OSTROVKII (1957) ont démontré l'utilité de la méthode comme méthode d'optimisation en temps réel. La synthèse de BLACKMAN (1962) démontre la méthodologie généralement utilisée à cette époque.

STERNBY (1980) divise les types d'algorithmes de la commande par recherche d'extremum en quatre classes principales : méthode de perturbation, méthode de commutation, méthode d'ajustements automatiques des performances et méthode de paramétrisation de modèles. La méthode de perturbation consiste à additionner au signal d'entrée un signal de superposition afin de mesurer, sur la variable de sortie, l'information sur le gradient du système. Il s'agit de la méthode la plus utilisée dans la pratique. La méthode de commutation consiste à ajuster la variable d'entrée à un taux constant jusqu'à ce que l'extremum soit atteint. Dans le cas

des commandes par ajustements automatiques des performances, il n'y a aucun changement pré-défini, l'algorithme utilise la sortie du système pour ajuster la commande en entrée. L'utilisation de modèles paramétrisés est probablement la méthode la plus proche de la commande adaptative, telle qu'envisagée dans le cadre de ce travail. Les algorithmes classés dans cette catégorie combine l'idée d'identification en-ligne des paramètres d'un modèle entre l'entrée et la sortie du système en régime permanent et applique l'entrée optimale en conséquence.

Vers le milieu des années 1960, l'apparition de la commande par modèle de référence (MRAC) et surtout le manque de preuve de stabilité du système en boucle fermée a fait peu à peu disparaître la technique dans la littérature du contrôle. La recherche d'extremum a cependant été reprise dans le domaine de l'optimisation.

À partir des années 1960, très peu de développement significatif de la méthode a été reporté dans la littérature du contrôle. L'idée de la méthode sera utilisée graduellement dans le domaine de l'optimisation. Du point de vue de la commande adaptative, le développement de la commande adaptative par modèle de référence (MRAC) qui utilisait les concepts de stabilité de Lyapunov a fait disparaître graduellement la commande adaptative par recherche d'extremum.

Quelques exceptions peuvent cependant être notées, par exemple, les travaux de au début des années 1990, notamment certaines études de ZARROP and ROMMENS (1993); ZARROP (1994) au niveau de l'étude de la convergence des algorithmes par ajustements automatique des performances pour des systèmes sous contraintes. L'application de ce type d'algorithme a été étudié, notamment par WELLSTEAD and SCOTSON (1990).

La littérature présente aussi quelques applications de cette méthode aux procédés de génie chimique, particulièrement les travaux de GOLDEN and YDSTIE (1989) qui ont couplé des algorithmes de commande par ajustements automatiques des

performances avec un algorithme d'estimation par moindres carrés récursifs. Leur application consistait à maximiser la masse cellulaire d'un bio-réacteur.

Sauf les travaux de Meerkov (MEERKOV, 1967), les applications de la commande adaptative par recherche d'extremum ne comportait pas de preuves de stabilité. Au cours des années 1990 cependant, les travaux de WITTENMARK and URQUHART (1995) pour les systèmes stochastiques et plus particulièrement de Krstić ont permis d'appliquer les avancées de la commande adaptative réalisée au cours des années 1980 (e.g. ANDERSON et al. (1986)) à la stabilité de la commande par recherche d'extremum.

4.1.2 Analyse par la méthode de la moyenne

L'idée de cette méthode remonte aux travaux de MEERKOV (1967). L'algorithme étudié originellement par KRSTIĆ and WANG (2000); KRSTIĆ (2000) pour les cas linéaires et non-linéaires sont très semblables à ceux présents dans la littérature des années 1960 (méthode des perturbations). Le mérite de Krstić réside dans la preuve de stabilité par la méthode de la moyenne dérivée des travaux de ANDERSON et al. (1986). La figure 4.2 présente le schéma de l'algorithme.

Cet algorithme suppose la mesure en ligne de la fonction objectif mais ne nécessite pas de modèle *a priori* pour la conception de l'algorithme (déterminer les paramètres). La thèse de ARIYUR (2002) présente plusieurs variantes de cet algorithme, particulièrement l'optimisation par recherche de gradient. Cette variante de l'algorithme est appliqué à la commande de systèmes de propulsion. WANG et al. (1999) ont appliqué cet forme d'algorithme à l'optimisation en ligne de bio-réacteurs.

L'ouvrage de ARIYUR and KRSTIĆ (2003) présente la synthèse des travaux

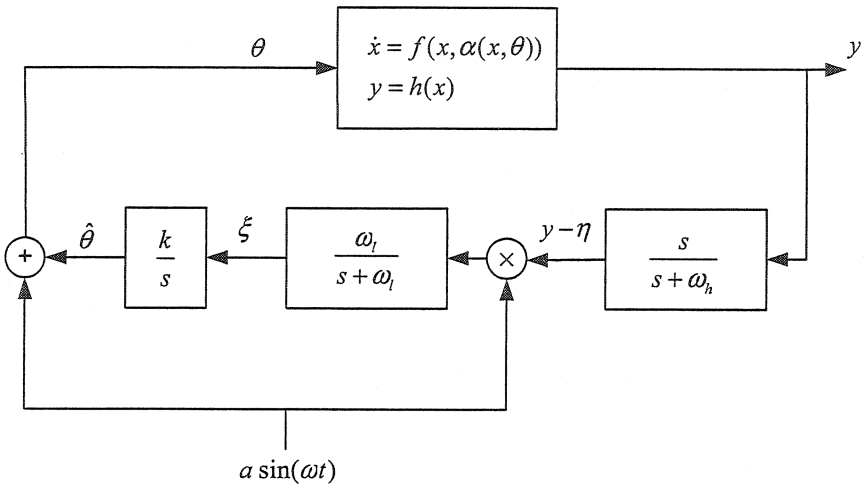

Figure 4.2 – Schéma de commande par recherche d'extremum - Krstić et. al.

réalisés par ce groupe de recherche dans le domaine de commande adaptative par recherche d'extremum.

4.1.3 Analyse par la méthode directe de Lyapunov

Tel que mentionné à la section précédente, la méthode étudiée par Krstć et. al. n'utilise pas de modèles pour la conception de l'algorithme de commande. La présente méthode, étudiée dans le présent mémoire, considère qu'il est possible de disposer d'une forme de modèle (avec incertitude sur les paramètres).

Les bases de cette méthode ont été présentées par POMET and PRALY (1992). L'idée est de faire l'adaptation des paramètres en utilisant une fonction de Lyapunov candidate. L'idée d'utiliser de lier les techniques d'optimisation non linéaire aux problèmes de recherche d'extremum a été présentée par TEEL and POPOVIĆ (2001).

La méthode développée par ZHANG and GUAY (2001) consiste à minimiser une

fonction de Lyapunov candidate pour minimiser une fonction coût. La stabilité du système est ainsi assurée. Le succès de cette méthode est liée à la convergence des paramètres, assurée par une condition de persistence d'excitation. La figure 4.3 présente l'idée de la méthode.

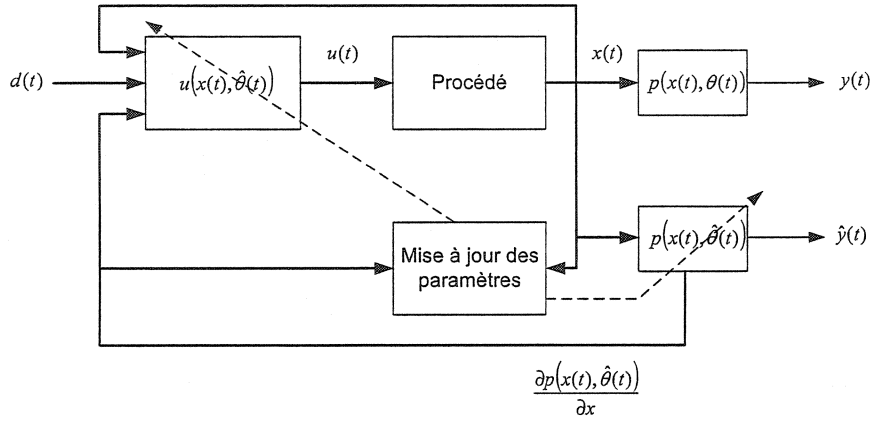

Figure 4.3 – Schéma de commande par recherche d'extremum - Guay et.al.

L'algorithme a été appliqué à l'estimation des paramètres et à la commande de réacteurs biochimiques avec divers modèles et sous différentes conditions (ZHANG and GUAY, 2002; ZHANG et al., 2003; MARCOS et al., 2004*a*,*b*; TITICA et al., 2003). L'extension de la méthode à des problèmes sous contraintes est donnée par DeHAAN and GUAY (2004).

La méthode qui sera utilisée dans le cadre de la présente recherche est dérivée des travaux (GUAY et al., 2003, 2004*b*) où l'expression des cinétiques de réaction est supposée inconnue. Dans les deux cas, l'objectif est de maximiser la production d'un composé chimique intermédiaire dans un réacteur CSTR non-isotherme.

4.2 Étapes préliminaires à l'application

4.2.1 Rappel du problème à l'étude

Le système à l'étude, inspiré de CHRISTOFIDES (2001) est repris à la figure 4.4.

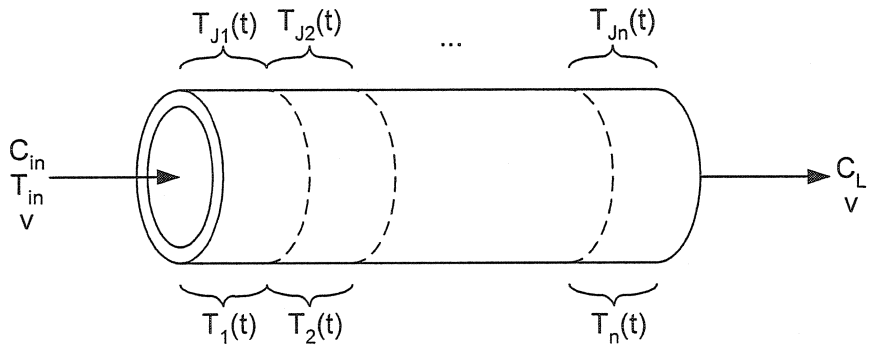

Figure 4.4 – Description physique du réacteur considéré

Les équations de bilans dans ce réacteur piston sont données par :

$$\frac{\partial C(z,t)}{\partial t} = -v\frac{\partial C(z,t)}{\partial z} + MR(C(z,t),T(z,t)) \tag{4.1}$$

$$\frac{\partial T(z,t)}{\partial t} = -v\frac{\partial T(z,t)}{\partial z} + \lambda_1 R(C(z,t),T(z,t)) + \lambda_2(T_J(z,t) - T(z,t)) \tag{4.2}$$

Avec le vecteur de concentrations, $C \in S_C \subset \mathbb{R}_+^{n\times 1}$, la matrice des coefficients stoichiométriques, $M \in \mathbb{R}^{n\times r}$ et les termes cinétiques des réactions, $R \in \mathbb{R}^{r\times 1}$. La température est donnée par $T \in S_T \subset \mathbb{R}_+$, Les paramètres $\lambda_1 \in \mathbb{R}^{1\times r}$ et $\lambda_2 \in \mathbb{R}^1$ sont données par :

$$\lambda_1 = \frac{\Delta H^T}{\rho C_p}$$

$$\lambda_2 = \frac{4h}{d\rho C_p}$$

Avec les chaleurs de réactions $\Delta H \in \mathbb{R}^{r\times 1}$ et ρ, C_p, h et d des constantes représentant la masse volumique, la capacité calorifique, le coefficient d'échange à la paroi et le diamètre du réacteur respectivement. Les conditions initiales $C(z,0) = C_0(z)$ et $T(z,0) = T_0(z)$ sont supposées connues. Les conditions à la frontière sont de la forme :

$$C(0,t) = C_{in} \tag{4.3}$$

$$T(0,t) = T_{in} \tag{4.4}$$

On considère que la stoechiométrie, M, et les chaleurs de réaction, ΔH, sont connues. La commande $u(z,t)$ est assurée par le profil de température dans la chemise $T_J(z,t)$. On suppose que les mesures et actions de commande sont distribuées uniformément le long du réacteur. Les cinétiques de réaction de $R(C(z,t), T(z,t))$ sont supposées inconnues.

L'objectif est de concevoir une commande $u(z,t)$ qui maximise, en régime permanent, une fonction de la forme :

$$y = HC(L,\cdot) \tag{4.5}$$

soit une fonction de la concentration à la sortie du réacteur avec $H \in \mathbb{R}^n$.

4.2.2 Profils à l'équilibre

La première étape de résolution consiste à exprimer les profils de concentration à l'équilibre en fonction du profil de température à l'équilibre, $T^*(z)$, noté T. En régime permanent, (4.1) devient :

$$v\frac{dC(z)}{dz} = MR(C(z), T) \tag{4.6}$$

On suppose qu'il existe une fonction continue $\pi(T^*(z))$, notée $\pi(T)$, solution de :

$$v\frac{d\pi(T)}{dz} = MR(\pi(T), T) \tag{4.7}$$

On suppose que la solution $\pi(T)$ existe et est continue sur S_T. On pose maintenant deux hypothèses fondamentales pour la suite de l'étude.

Hypothèse 4.1 *La fonction $H\pi(T)$ est continuement différentiable et admet un maximum sur $\Psi_T = C \in S_C | C = \pi(T)$. C'est-à-dire que $\frac{d\pi(T)}{dT} = 0$ avec $\frac{d^2\pi(T)}{dT^2} \leq 0$ sur le domaine de T.*

On considère les systèmes à déphasage minimal. Cette condition s'exprime sous la forme suivante :

Hypothèse 4.2 *On considère le bilan de matière 4.1. Il existe une fonctionnelle définie positive V(C) telle que :*

- $c_1\|C\|^2 \leq V(C) \leq c_2\|C\|^2$
- $\dot{V} \leq -c_3\|C - \pi(T)\| + c_4\|C\|\|\pi(T)\|$

pour c_1, c_2, c_3 *et* c_4, *des constantes positives non-nulles* $\forall T \in S_T$.

L'hypothèse 4.2 garantit le déphasage minimal du système sur l'intervalle de la température de la chemise. Cette hypothèse est nécessaire à l'inversion du système pour le design du contrôle. Pour garantir la convergence de la concentration C à un voisinage de l'équilibre $\pi(T)$, cette condition est nécessaire. Ici, cette condition revient à supposer que que pour un profil donné de température, il existe un profil unique de concentration à l'équilibre $\pi(T)$.

On étudie maintenant la dynamique de la température 4.2 en utilisant l'information donnée par le profil à l'équilibre des concentrations (4.7). Par la règle d'enchaînement,

$$\frac{d\pi(T)}{dz} = \frac{\partial \pi}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial \pi(T)}{\partial z} \tag{4.8}$$

et (4.7) devient :

$$v\left(\frac{\partial \pi}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial \pi(T)}{\partial z}\right) = MR(\pi(T), T) \tag{4.9}$$

En isolant $R(\pi(T), T)$, on obtient :

$$R(\pi(T), T) = vM^{\dagger}\left(\frac{\partial \pi}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial \pi(T)}{\partial z}\right) \tag{4.10}$$

Avec $M^{\dagger}$, la matrice pseudo-inverse à gauche des coefficients stoechiométriques M, c'est-à-dire $M^{\dagger}M = I_r$ avec I_r, la matrice identité $r \times r$.

En ajoutant et en soustrayant le terme de chaleur de réaction $(\lambda_1 R(\pi(T), T))$

au membre de droite du bilan de température (4.2), il est possible de ré-écrire l'équation dynamique :

$$\frac{\partial T(z,t)}{\partial t} = -v\frac{\partial T}{\partial z} + \lambda_1 R(C,T) + \lambda_2 \left(T_J(z,t) - T(z,t)\right) + \lambda_1 \left(R(\pi(T),T) - R(\pi(T),T)\right) \tag{4.11}$$

En ré-arrangeant cette dernière expression et en utilisant (4.10) pour exprimer l'approximation de la chaleur de réaction, on obtient :

$$\frac{\partial T(z,t)}{\partial t} = -v\frac{\partial T}{\partial z} + v\lambda_1 M^{\dagger}\left(\frac{\partial \pi}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial \pi(T)}{\partial z}\right) + \lambda_2 \left(T_J(z,t) - T(z,t)\right) + \lambda_1 \Delta \tag{4.12}$$

Avec l'erreur d'approximation $\Delta = R(C,T) - R(\pi(T),T)$.

On pose l'hypothèse suivante :

Hypothèse 4.3 $\forall C \in S_C$ *et* $\forall T \in S_T$, *il existe une constante* $L_1 > 0$ *tel que*

$$\|R(C,T) - R(\pi(T),T)\| \leq L_1 \|C - \pi(T)\| \tag{4.13}$$

Cette hypothèse est essentiellement une condition de continuité globale de Lipschitz sur la cinétique de réaction, R, avec une constante de Lipschitz de 1. En général, la dépendance de la cinétique vis-à-vis la température respecte cette condition.

4.2.3 Paramétrisation des profils optimaux

Dans la présente étude, on approxime la fonction $\pi(T(z))$, par :

$$\pi(T(z)) = W^T S(T(z)) + \mu_l(z,t) \tag{4.14}$$

avec $S(T(z))$, une série tronquée de fonctions de base qui exprime le profil de concentration optimal au profil de température optimal et W, les paramètres optimaux de cette paramétrisation. On utilise ici

$$S(T(z)) = [s_1(T(z)), s_2(T(z)), ..., s_l(T(z))]^T \tag{4.15}$$

avec

$$s_i(T(z)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[\frac{-(T(z)-\varphi_i)^T(T(z)-\varphi_i)}{\sigma_i^2}\right] - \frac{(T(z)-\varphi_i)^2}{\sigma^2},\ i = 1,2,...,l. \tag{4.16}$$

L'approximation fonctionnelle du profil d'équilibre est dépendant de la distribution des centres, φ_i et de la variance donnée à la fonction Gaussienne, σ_i. Les résultats donnés en (SANNER and SLOTINE, 1992) et (SESHAGIRI and KHALIL, 2000) au sujet des approximateurs universels indiquent que si le nombre de fonctions d'approximation, l, est choisi suffisament grand, alors $W^T S(T(z))$ peut approximer n'importe quelle fonction continue sur le domaine des paramètres avec la précision voulue.

On décompose ainsi le terme de réaction de la manière suivante :

$$\lambda_1 M^\dagger \pi(T(z)) = \lambda_1 M^\dagger W^T S(T(z)) + \lambda_1^T M^\dagger \mu_l(z,t) \tag{4.17}$$

On suppose maintenant que l'hypothèse suivante tient pour l'approximation décrite plus haut :

Hypothèse 4.4 *L'erreur d'approximation de la paramétrisation satisfait* $|\mu_l(z,t)| \leq \bar{\mu}_l$ *pour des valeurs constantes de* $\bar{\mu}_p > 0$ *et* $\bar{\mu}_l > 0$ *sur l'ensemble compact* $\Omega_w \times S_T$.

La dynamique de la température (4.12) peut donc être ré-écrite sous la forme suivante :

$$\frac{\partial T(z,t)}{\partial t} = -v\frac{\partial T}{\partial z} + v\lambda_1 M^\dagger \left(W^T \frac{\partial S}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial \mu_l}{\partial z} \right) + \lambda_2 \left(T_J(z,t) - T(z,t) \right) + \lambda_1 \Delta \tag{4.18}$$

comme fonctions de base de la paramétrisation. D'autres fonctions de base pourraient être utilisées, par exemple des fonctions d'approximation de Gram-Charlier. Cependant, elles doivent satisfaire aux différentes hypothèses établies ici. Les fonctions radiales de bases présentent un avantage de construction. De plus amples études seraient nécessaires pour mesurer l'impact du choix de type de fonctions de base.

Dans la plupart des applications, il n'est pas nécessaire de suivre tous les profils de concentration. En effet, on tente, le plus souvent, d'optimiser le profil d'un composant donné. Par conséquent, il n'est pas nécessaire d'estimer les paramètres W de tous les profils. Afin de garder la formulation la plus générale possible, nous allons ré-écrire la dynamique de la température (4.18) en explicitant le terme associé à la chaleur de réaction. L'idée consiste à paramétriser le terme de chaleur de réaction :

$$\lambda_1 M^\dagger \left(\frac{\partial \pi}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial z}\frac{\partial \pi}{\partial z} + \right) = \lambda_1 M^\dagger W^T \frac{\partial S}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial z} + \lambda_1 M^\dagger \frac{\partial \mu_l}{\partial z} \tag{4.19}$$

En décomposant (4.19) de nouveau :

$$\lambda_1 M^\dagger W^T \frac{\partial S}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial z} = \lambda_1 M^\dagger H^T W_b^T \frac{\partial S}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial z} + W_a^T \frac{\partial S}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial z} \tag{4.20}$$

Le premier terme du membre de droite de (4.20) montre la contribution du composé chimique à optimiser au bilan d'énergie. Le deuxième terme permet d'estimer la contribution globale des réactions au bilan d'énergie. L'équation (4.18) peut donc être ré-écrite :

$$\begin{aligned}\frac{\partial T}{\partial t} = &- v\frac{\partial T}{\partial z} + v(\lambda_1 M^\dagger H^T W_b^T + W_a^T)\frac{\partial S}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial z} \\ &+ v\lambda_1 M^\dagger \frac{\partial \mu_l}{\partial z} + \lambda_2 (T_J - T) + \lambda_1 \Delta\end{aligned} \tag{4.21}$$

Cette dernière équation constitue la base du développement de l'algorithme de contrôle présenté à la section suivante.

4.3 Développement de l'algorithme de commande

Cette section décrit la solution du problème de commande adaptative par recherche d'extremum du réacteur piston dans le cas où l'on pose une contrainte sur la température le long du réacteur, $T(z)$. Le résultat est un algorithme de commande par retour de sortie couplé à un estimateur de paramètre en ligne. Formellement, le problème à résoudre est de la forme :

$$\begin{aligned}&\max\ HC(L) \\ &\text{s.t. } T_{min} \leq T(z,t) \leq T_{max}\end{aligned} \tag{4.22}$$

Dans un premier temps, ce problème sera re-formulé de manière à pouvoir utiliser les contraintes sur la température dans l'algorithme. Ensuite, la conception de la commande et de l'estimation des paramètres, basée sur la paramétrisation présentée précédemment, est réalisée en formulant une fonctionnelle de Lyapunov et en utilisant l'information contenue dans le bilan d'énergie. Les preuves de stabilité et de convergence sont présentées à la section 4.4.

4.3.1 Reformulation du problème d'optimisation avec contraintes

$$\begin{aligned} &\max\ HC(L) \\ &\text{s.t. } T_{min} \leq T \leq T_{max} \end{aligned} \tag{4.23}$$

En introduisant des fonctions barrières logarithmique (NASH and SOFER, 1996; NOCEDAL and WRIGHT, 1999), on ré-exprime le problème d'optimisation (4.23) sous la forme suivante :

$$y = HC(L) + \mu_1 \log(T(z) - T_{min} - \epsilon_1) + \mu_2 \log(T_{max} - T(z) - \epsilon_2) \tag{4.24}$$

avec μ_1, μ_2, ϵ_1 et ϵ_2 des constantes strictement positives. Cette méthode permet de garder les états contraints du système à l'intérieur des bornes par addition d'une pénalité à la fonction coût. Ce concept est illustré à la figure 4.5.

En utilisant la paramétrisation développée à la section précédente, la fonction objectif peut être ré-exprimée sous la forme :

$$y = W_b^T S(T) + \mu_1 \log(T(z) - T_{min} - \epsilon_1) + \mu_2 \log(T_{max} - T(z) - \epsilon_2) \tag{4.25}$$

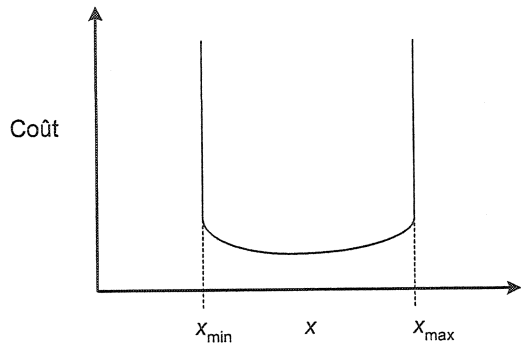

Figure 4.5 – Fonctions barrières logarithmique

4.3.2 Design de l'estimateur et du contrôleur

Les vrais poids, W_b, qui relient le profil de concentration optimal et le profil de température sont inconnus. On pose $\hat{W}_b$, les valeurs estimées des paramètres optimaux de la paramétrisation. On développe maintenant l'algorithme d'estimation des paramètres. L'estimation de la fonction objectif (4.25) peut s'écrire :

$$y_e = \hat{W}_b^T S(T) + \mu_1 \log(T - T_{min} - \epsilon_1) + \log(\frac{\mu_2}{T_{max} - T - \epsilon_2}) \tag{4.26}$$

L'expression du gradient de la fonction objectif par rapport à la température, T, est égal à :

$$\Gamma_1 = \left(\hat{W}_b \frac{\partial S(T)}{\partial T}\right) + \frac{\mu_1}{T - T_{min} - \epsilon_1} - \frac{\mu_2}{T_{max} - T - \epsilon_2} \tag{4.27}$$

et le Hessien de y_e par rapport à T s'exprime comme suit :

$$\Gamma_2 = \left(\hat{W}_b \frac{\partial^2 S(T(z))}{\partial T^2}\right) - \frac{\mu_1}{(T - T_{min} - \epsilon_1)^2} - \frac{\mu_2}{(T_{max} - T - \epsilon_2)^2} \tag{4.28}$$

On définit un signal auxiliaire :

$$z_s = \Gamma_1 - d(t) \tag{4.29}$$

avec $d(t)$, un signal de superposition qui sera développé dans la suite.

Dans le but de faire la conception de la loi de commande et de l'estimateur, on définit aussi un signal auxiliaire faisant intervenir l'erreur d'approximation :

$$\eta_1 = z_s - c_1(z,t)^T \tilde{W} \tag{4.30}$$

où $\tilde{W} = W - \hat{W}$, l'erreur d'approximation sur les paramètres et $c_1(z,t)$, un vecteur variable dans le temps et le long de la trajectoire. W est définit comme le vecteur $[W_a^T, W_b^T]^T$.

On propose la fonctionnelle de Lyapunov suivante :

$$V = \frac{1}{2}\int_0^L \eta_1(z,t)^2 dz \tag{4.31}$$

L'intégrale (4.31) est définie positive. En dérivant la fonctionnelle par rapport au temps, on obtient :

$$\dot{V} = \int_0^L \eta_1 \Big[\frac{\partial \eta_1}{\partial t}\Big] dz \tag{4.32}$$

Par définition de η_1, on a :

$$\dot{V} = \int_0^L \eta_1 \Big[\frac{\partial z_s}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t} \Big(c_1(z,t)^T \tilde{W} \Big) \Big] dz \tag{4.33}$$

et en utilisant la définition de z_s.

$$\dot{V} = \int_0^L \eta_1 \Big[\frac{\partial \Gamma_1}{\partial t} - \dot{d}(t) - \dot{c}_1(z,t)^T \tilde{W} - c_1(z,t)^T \dot{\tilde{W}} \Big] dz \tag{4.34}$$

Par définition de $\tilde{W}$, on a

$$\dot{\tilde{W}} = \dot{W} - \dot{\hat{W}}. \tag{4.35}$$

Sachant que $\dot{W} = 0$ et en prenant la définition de $\Gamma_1(\hat{W}(t), T)$, l'équation (4.34) devient :

$$\dot{V} = \int_0^L \eta_1 \Big[\Gamma_2 \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial T} \dot{\hat{W}} - \dot{d}(t) - \dot{c}_1(z,t)^T \tilde{W} + c_1(z,t)^T \dot{\hat{W}} \Big] dz \tag{4.36}$$

En remplaçant l'expression de $\frac{\partial T}{\partial t}$ par sa définition de (4.21), on obtient :

$$\begin{aligned} \dot{V} = \int_0^L \quad & \eta_1 \Big[\Gamma_2 \Big(- v \frac{\partial T}{\partial z} + v \Big((\lambda_1 M^\dagger H^T W_b^T + W_a^T) \frac{\partial S}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial z} \Big) + \\ & v \lambda_1 M^\dagger \frac{\partial \mu}{\partial z} + \lambda_2 (T_J - T) + \lambda_1 \Delta \Big) + \frac{\partial S}{\partial T} \dot{\hat{W}}_b + - \dot{d}(t) - \dot{c}_1^T \tilde{W} + c_1^T \dot{\hat{W}} \Big] dz \end{aligned} \tag{4.37}$$

On propose la loi de commande dynamique suivant :

$$\dot{c}_1(z,t)^T = -k_z c_1(z,t)^T + \Gamma_2 F(T)^T \tag{4.38}$$

$$\dot{d}(t) = -k_d d(t) + a(t) - \frac{\partial S}{\partial T}\dot{\hat{W}}_b \tag{4.39}$$

$$T_j = T + \frac{1}{\lambda_2}\left[v\frac{\partial T}{\partial z}\left(1 - (\lambda_1^T M^\dagger H^T \hat{W}_b^T + \hat{W}_a^T)\frac{\partial S}{\partial T}\right) - \frac{1}{\Gamma_2}\left(- \dot{d} + c_1(z,t)^T \dot{\hat{W}} - k_z z_s\right)\right]. \tag{4.40}$$

avec k_z et k_d, des paramètres de conception strictement positifs et

$$F(T) = v\frac{\partial T}{\partial z}\left[\frac{\partial S^T}{\partial T}, \lambda_1^T M^\dagger H^T \frac{\partial S^T}{\partial z}\right]$$

Le signal $a(t)$ est un signal de superposition secondaire à concevoir qui permet de garantir la persistence d'excitation. En utilisant la définition de η_1 de (4.30) et en substituant les équations (4.38), (4.39) et (4.40) dans l'expression (4.37). En utilisant l'hypothèse 4.3, on obtient :

$$\dot{V} \leq \int_0^L \left(- k_z \eta_1^2 + \eta_1 \Gamma_2 v \lambda_1 M^\dagger \frac{\partial \mu}{\partial z}) + |\eta_1||\Gamma_2|\|\lambda_1\|L_1\|C - \pi(T)\|\right) dz \tag{4.41}$$

De plus, de l'hypothèse 4.2, il ressort que $\sup_{C\in S_C, T\in S_T} \|C - \pi(T)\| = c_1$ existe est tend vers une valeur finie. En complétant les carrés, on définit k_z, comme étant :

$$k_z \;=\; k_{z0} + \frac{k_1}{2}\|\lambda_1\|^2\Gamma_2^2 v^2 \|M^\dagger\|^2 + \frac{k_2}{2}\|\lambda_1\|^2\Gamma_2^2, \tag{4.42}$$

avec k_{z0}, k_1 et k_2, des constantes strictement positives . L'inégalité 4.41 devient donc :

$$\dot{V} \leq \int_0^L \left(-k_{z0}\eta_1^2 + \left(\frac{1}{2k_1}\right)\left|\frac{\partial \mu_l}{\partial z}\right|^2 + \left(\frac{1}{2k_2}\right) L_1^2 c_1^2 \right) dz. \tag{4.43}$$

ou, en utilisant la définition de la fonctionnelle de Lyapunov :

$$\dot{V} \leq -k_{z0}V + \int_0^L \left(\left(\frac{1}{2k_1}\right)\left|\frac{\partial \mu_l}{\partial z}\right|^2 + \left(\frac{1}{2k_2}\right) L_1^2 c_1^2 \right) dz \tag{4.44}$$

En intégrant, on obtient :

$$V(t) \leq V(0)e^{-k_{z0}(t-t_0)} + c_2 \tag{4.45}$$

avec

$$c_2 = \sup_{0\leq\tau\leq t} \left[\int_0^L \left(\left(\frac{1}{2k_4}\right)\left|\frac{\partial \mu_l(\tau,z)}{\partial z}\right|^2 + \left(\frac{1}{2k_5}\right) L_1(z)^2 c_1(z)^2 \right) dz \right] \tag{4.46}$$

De l'hypothèse 4.2, la constante c_2 existe et tend vers une valeur finie. La borne sur η_1 peut alors être calculée avec :

$$\left(\int_0^L \eta_1^2 dz \right)^{1/2} \leq \alpha_1 e^{-\beta_1(t-t_0)} + \sqrt{2c_2} \tag{4.47}$$

avec $\alpha_1 = \sqrt{2V(t_0)}$ et $\beta_1 = k_{z0}/2$.

L'équation (4.47) établit la convergence de η_1 vers un voisinage de l'origine. Il faut maintenant établir la convergence du signal z_s (et par conséquent, du gradient) et de l'erreur $\tilde{W}$ vers un voisinage de l'origine.

4.4 Analyse de convergence et d'optimalité

Comme z_s dépend de l'estimation des paramètres $\hat{W}$, il n'est pas suffisant de montrer que z_s tend vers un voisinage de l'origine pour en établir la convergence. Il faut

d'abord établir, à l'aide d'une condition d'excitation persistente, la convergence de $\hat{W}$ vers la valeur des paramètres optimaux W.

On considère le vecteur suivant :

$$\Upsilon(z,t) = c_1(z,t)^T$$

Par construction, on considère que ce vecteur solutionne le système d'équations différentielles suivant :

$$\dot{\Upsilon}(z,t) = -K(z,t)\Upsilon(z,t) + B(z,t) \tag{4.48}$$

avec $K(t,z) = k_z$ et $B(z,t) = \Gamma_2 F(T)^T$.

Les éléments de $B(z,t)$ sont tels que,

$$\|B(z,t)\|^2 \leq \Gamma_2^2 \left(\frac{v}{L}\right)^2 \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)^2 (1 + \lambda_1 M^\dagger H^T)^2 \frac{\partial S^T}{\partial T}\frac{\partial S}{\partial T}. \tag{4.49}$$

Dans le cas particulier des bases choisies dans l'approximation utilisée ici, nous avons $\|S\| \leq \sqrt{N}$, où N est le nombre de paramètres utilisés dans l'approximation. Le terme Γ_2 est borné par :

$$\|\Gamma_2\| \leq \|\hat{W}\|\|d^2S\| + \frac{\mu_1}{\epsilon_1^2} + \frac{\mu_2}{\epsilon_2^2}$$

Les dérivés premières et secondes dS et d^2S de l'approximation par fonctions radiales (4.16) sont données par :

$$\frac{\partial S_i}{\partial T} = -2\frac{(T-\varphi_i)}{\sigma_i^2}\exp\left[-\frac{(T-\varphi_i)^2}{\sigma_i^2}\right] \tag{4.50}$$

$$\frac{\partial^2 S_i}{\partial T^2} = \left(-2\frac{1}{\sigma^2}+4\frac{(T-\varphi_i)^2}{\sigma^4}\right)\exp\left[-\frac{(T-\varphi_i)^2}{\sigma_i^2}\right] \tag{4.51}$$

pour $i = 1,\ldots,l$. Des équations (4.50)-(4.51), on a $\|dS\| \leq 2\sqrt{\frac{NT_U}{\sigma_m^2}}$ et $\|d^2S\| \leq 2\sqrt{\frac{N}{\sigma_m^2}} + 4\sqrt{N}\frac{T_U}{\sigma_m^2}$ avec $\sigma_m = \min_{1\leq i\leq N}\{\sigma_i\}$ et T_U la borne supérieure sur T dans l'ensemble compact S_T. On assume $\varphi_i \in S_T$, $1 \leq i \leq N$.

Une borne sur les estimés des paramètres $\hat{W}$ peut être assuré en choisissant la loi d'estimation des paramètres suivante :

$$\dot{\hat{W}} = \begin{cases} \gamma_w\Gamma & \text{si } \|\hat{W}\| < w_m \text{ ou} \\ & \text{si } \|\hat{W}\| = w_m \text{ et } \hat{W}^T\Gamma \leq 0 \\ \gamma_w\left(I - \frac{\hat{W}\hat{W}^T}{\hat{W}^T\hat{W}}\right)\Gamma & \text{sinon} \end{cases} \tag{4.52}$$

avec $\Gamma = \int_0^L \Upsilon(z,t)^T z_s(z,t)dz$. L'équation (4.52) est un algorithme de projection qui assure que $\|\hat{W}\| \leq w_m$. Les détails sur cet algorithme est donné dans KRSTIĆ et al. (1995). De l'analyse précédente, la norme de $B(z,t)$ peut être bornée comme suit :

$$\begin{aligned} \|B(t,z)\| &\leq \left(w_m\left[2\sqrt{\frac{l}{\sigma_m^2}}+4\sqrt{l}\frac{T_U}{\sigma_m^2}+\frac{\mu_1}{\epsilon_1^2}+\frac{\mu_2}{\epsilon_2^2}\right]\right)|\frac{v}{L}|\left((1+|\lambda^T M^\dagger H^T|)2\sqrt{\frac{lT_u}{\sigma_m^2}}\right)\left|\frac{\partial T}{\partial z}\right| \\ &= B_M\left|\frac{\partial T}{\partial z}\right| \end{aligned}$$

De l'équation (4.48) et de la borne sur $B(z,t)$, une borne explicite sur l'équation (4.48) peut être obtenue :

$$\left(\int_0^L \|\Upsilon(z,t)\|^2 dz\right)^{1/2} \leq \quad \alpha_2 e^{-\beta_2(t-t_0)} + \frac{B_M}{\beta_2}\int_{t_0}^{t}\int_0^L \left|\frac{\partial T(z,\sigma)}{\partial z}\right| dz d\sigma. \qquad (4.53)$$

avec $\alpha_2 = \left(\int_0^L \|\Upsilon(z,0)\|^2 dz\right)^{1/2}$ et $\beta_2 > 0$ une constante positive. L'intégrale de $\left|\frac{\partial T}{\partial z}\right|$ est telle que :

$$\int_0^L \left|\frac{\partial T(z,\sigma)}{\partial z}\right| dz \leq L|T_U - T_L| \qquad (4.54)$$

d'où

$$\left(\int_0^L \|\Upsilon(z,t)\|^2 dz\right)^{1/2} \leq \alpha_2 e^{-\beta_2(t-t_0)} + \frac{B_M}{\beta_2} L|T_U - T_L|. \qquad (4.55)$$

Maintenant, on montre que l'erreur d'approximation $\tilde{W}$ converge dans un voisinage de l'origine.

Après substitution de $z_s = \eta + \Upsilon(z,t)\tilde{W}$, la dynamique de l'erreur sur les paramètres d'estimation est donnée par

$$\dot{\tilde{W}} = -\gamma_w \int_0^L \left(\Upsilon(z,t)^T \Upsilon(z,t) \tilde{W}(t) + \Upsilon(z,t)^T \eta(z,t) \right) dz$$

$$+ \begin{cases} 0 & \text{si } \|\hat{W}\| < w_m \text{ ou} \\ & \text{si } \|\hat{W}\| = w_m \\ & \text{et } \hat{W}^T \Gamma \leq 0 \\ \gamma_w \frac{\hat{W}\hat{W}^T}{\hat{W}^T\hat{W}} \left(\int_0^L \left(\Upsilon(z,t)^T \Upsilon(z,t) \tilde{W} + \Upsilon(z,t)^T \eta(z,t) \right) dz \right) & \text{sinon} \end{cases} \tag{4.56}$$

Dans ce qui suit, on montre que sous certaines hypothèses, la dynamique de l'erreur sur les paramètres d'estimation du système non-perturbé (*i.e.*, $\eta(z,t) \equiv 0$) est exponentiellement stable. À cette fin, on utilise l'hypothèse suivante :

Hypothèse 4.5 : La solution de l'équation (4.48) est telle qu'il existe deux constantes positives $\tau > 0$ et $k_l > 0$ telles que

$$\int_t^{t+\tau} \int_0^L \Upsilon(z,\sigma)^T \Upsilon(z,\sigma) dz d\sigma \geq k_l I_l \tag{4.57}$$

où I_l est la matrice identité de dimension l.

Le lemme suivant sera requis pour la suite du développement.

Lemme 4.4.1 *On considère l'équation différentielle suivante :*

$$\dot{x}(t) = -\phi(t)^T \phi(t) x(t) \tag{4.58}$$

et on fait l'hypothèse qu'il existe $T > 0$ et $k > 0$ tel que

$$\int_t^{t+T} \phi(\tau)^T \phi(\tau) \geq kI \tag{4.59}$$

alors l'origine est un point d'équilibre asymptotiquement stable du système.

La preuve de ce Lemme est donné par ANDERSON et al. (1986). L'équation (4.58) est utilisée pour démontrer la stabilité de $\tilde{W}$ dans un voisinage de l'origine. Ici, elle s'applique à une équation intégro-différentielle de la forme :

$$\dot{x}(t) = \left(\int_0^L \phi(z,t)^T \phi(z,t) dz) \right) x(t). \tag{4.60}$$

Si la fonction vectorielle $\phi(z,t)$ satisfait la condition

$$\left(\int_0^L \phi(z,t)^T \phi(z,t) dz) \right) \geq kI$$

alors il le Lemme 4.4.1 s'applique directement au système (4.60). Le Lemme 4.4.1 établit que l'origine de l'équation différentielle

$$\dot{\tilde{W}} = -\gamma_w \left(\int_0^L \Upsilon(z,t)^T \Upsilon(z,t) dz \right) \tilde{W} \tag{4.61}$$

est un équilibre exponentiellement stable. De la preuve du Lemme 4.4.1, la fonction de Lyapunov

$$V_w = \frac{1}{2\gamma_w} \tilde{W}^T \tilde{W} \tag{4.62}$$

est telle que :

$$\dot{V}_w = -\tilde{W}^T \left(\int_0^L \Upsilon(z,t)^T \Upsilon(z,t) dz \right) \tilde{W} \leq -c_3 \|\tilde{W}\|^2 \tag{4.63}$$

avec $c_3 > 0$.

Le taux de variation de V_w le long des trajectoires du système (4.56) est donné par :

$$\begin{aligned}\dot{V}_w = \quad & -\tilde{W}^T\left(\int_0^L \Upsilon(z,t)\Upsilon(z,t)dz\right)\tilde{W} - \tilde{W}^T\int_0^L \Upsilon(z,t)^T\eta_1(z,t)dz \\ + & \begin{cases} 0 & \text{si } \|\hat{W}\| \leq w_m \text{ ou} \\ & \text{si} \|\hat{W}\| = w_m \text{ et } \hat{W}^T\Gamma \leq 0 \\ \gamma_w\tilde{W}^T\frac{\hat{W}\hat{W}^T}{\hat{W}^T\hat{W}}\left(\int_0^L\left(\Upsilon(z,t)^T\Upsilon(z,t)\right)\tilde{W} + \int_0^L \Upsilon(z,t)^T\eta_1(z,t)dz\right) & \text{sinon} \end{cases}\end{aligned} \tag{4.64}$$

En utilisant les propriétés de l'algorithme de projection, on obtient que :

$$\dot{V}_w \leq -\tilde{W}^T\left(\int_0^L \Upsilon(z,t)^T\Upsilon(z,t)dz\right)\tilde{W} - \tilde{W}^T\int_0^L \Upsilon(z,t)^T\eta_1(z,t)dz$$

En complétant les carrés

$$\dot{V}_w \leq -\frac{1}{2}\tilde{W}^T\left(\int_0^L \Upsilon(z,t)^T\Upsilon(z,t)dz\right)\tilde{W} + \frac{1}{2}\int_0^L \eta_1(z,t)^2dz$$

et par stabilité exponentielle du système nominal (4.61),

$$\dot{V}_w \leq -\frac{c_3}{2}\|\tilde{W}\|^2 + \frac{1}{2}\eta_1^2 = -c_3\gamma_w V_w + \frac{1}{2}\int_0^L \eta_1^2(z,t)dz.$$

En substituant (4.47), on obtient

$$\dot{V}_w \leq -c_3\gamma_w V_w + \left(V(0)e^{-k_{z0}(t-t_0)} + C_2\right) \tag{4.65}$$

En integrant, on a

$$V_w(t) \leq \frac{V(0)}{c_3\gamma_w - k_{z0}}(e^{-k_{z0}(t-t_0)} + e^{-c_3\gamma_w(t-t_0)}) + \frac{C_2}{c_3\gamma_w}(1 + e^{-c_3\gamma_w(t-t_0)}) + V_w(0)e^{-c_2\gamma_w(t-t_0)}$$

et

$$V_w(t) \leq \theta_1 e^{-\theta_2(t-t_0)} + \frac{C_2}{c_3\gamma_w}$$

avec $\theta_1 = \max\left[\frac{V(0)}{c_3\gamma_w - k_{z0}}, \frac{C_2}{c_3\gamma_w}, V_w(0)\right]$ et $\theta_2 = \min\left[k_{z0}, c_3\lambda_w\right]$.

L'erreur d'estimation sur les paramètres décroît donc exponentiellement comme suit :

$$\|\tilde{W}\|^2 \leq 2\gamma_w\theta_1 e^{-\theta_2(t-t_0)} + \frac{2C_2}{c_3} \tag{4.66}$$

ou

$$\|\tilde{W}\| \leq \alpha_3 e^{-\beta_3(t-t_0)} + \sqrt{\frac{2C_2}{c_3}} \tag{4.67}$$

avec $\alpha_3 = \sqrt{\theta_1}$, $\beta_3 = \theta_2/2$. En prenant la limite lorsque $t \to \infty$, on confirme que l'erreur d'estimation converge vers un voisinage arbitrairement petit de l'origine défini par

$$\lim_{t\to\infty} \|\tilde{W}\| \leq \sqrt{\frac{2C_2}{c_3}}. \tag{4.68}$$

Nous allons maintenant établir et prouver le résultat principal de cette étude.

Théorème 4.4.2 *On considère le modèle (4.1)-(4.2) d'un réacteur piston non-isotherme sous l'action en boucle fermée de la loi de commande (4.40), du signal de superposition (4.39) et de la loi d'estimation des paramètres (4.52). En supposant que le signal de superposition secondaire $a(t)$ est tel que,*

$$\int_t^{t+\tau} \left(\int_0^L \Upsilon(z,\sigma)^T \Upsilon(z,\sigma) dz \right) d\sigma \geq k_l I_l \tag{4.69}$$

pour $\tau > 0$ et $k_l > 0$ où $\Upsilon(z,t)$ est la solution de (4.48). Alors,

- *l'erreur d'estimation des paramètres $\tilde{W}$ converge exponentiellement dans un voisinage arbitrairement petit de l'origine.*
- *l'erreur d'approximation du profil optimal en régime permanent, z_s, converge exponentiellement dans un voisinage de l'origine.*

Preuve : Sous l'hypothèse de persistence d'excitation, on démontre que l'erreur d'approximation des paramètres et des états re-formulés, $\eta_1(t,z)$, convergent exponentiellement dans un voisinage arbitrairement petit de l'origine. En fait, la taille de ce voisinage peut être ajusté en augmentant le gain d'observation et on réduisant l'erreur d'approximation. Par définition, on peut borner l'estimation du gradient, z_s, comme suit

$$\left(\int_0^L z_s^2 dz \right)^{1/2} \leq \left(\int_0^L \eta_1(z,t)^2 dz \right)^{1/2} + \left(\int_0^L \|\Upsilon(z,t)\| dz \right)^{1/2} \|\tilde{W}\|.$$

En substituant $|\eta_1|$, $\|\Upsilon(z,t)\|$ et $\tilde{W}$, on obtient

$$|z_s| \leq \alpha_4 e^{-\beta_4(t-t_0)} + c_4 \tag{4.70}$$

où

$$
\begin{aligned}
\alpha_4 &= \max\left\{\alpha_1, \alpha_2\alpha_3, \alpha_2\sqrt{\frac{2C_2}{c_3}}, \alpha_3\frac{B_M}{\beta_2}L(T_U - T_L)\right\} \\
\beta_4 &= \min\left\{\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_2 + \beta_3\right\} \\
c_4 &= \sqrt{2C_2} + \frac{B_M}{\beta_2}L(T_U - T_L)\sqrt{\frac{2C_2}{c_3}}.
\end{aligned}
$$

La convergence de l'estimation du gradient, z_s, permet d'assurer, sous les hypothèses formulées ici, la convergence exponentielle du système en boucle fermée vers un voisinage arbitrairement petit de l'optimum en régime permanent. Ceci complète la preuve.

CHAPITRE 5

APPLICATION NUMÉRIQUE

Ce chapitre présente l'application numérique de l'algorithme de commande développé au chapitre précédent. Avant tout, on présente le développement d'un outil de simulation du réacteur tel que décrit au chapitre 2. La simulation des équations aux dérivées partielles est un sujet très riche dans la littérature et il existe plusieurs méthodes pour résoudre les équations hyperboliques. La section 5.1 présente brièvement quelques méthodes avant de se concentrer sur la méthode utilisée ici, soit la méthode des lignes (section 5.1.2).

La section 5.2 présente l'application de la méthode à la réaction de van de Vusse en utilisant les paramètres cinétiques proposés par KLATT and ENGELL (1998); ENGELL and KLATT (1993). La section 5.3 montre l'application de la méthode à la réaction de Williams-Otto (WILLIAMS and OTTO, 1960). Dans les deux cas, l'objectif est de maximiser la production d'un composé intermédiaire.

5.1 Simulation des EDP

La résolution numérique des équations aux dérivées partielles (EDP), est un sujet très riche (voir THOMÉE (2001) pour un compte rendu complet). Il existe plusieurs méthodes pour intégrer ces équations, décrites brièvement à la sous-section 5.1.1. Dans l'optique de la commande, on utilisera ici un schéma semi-discret, la méthode des lignes (5.1.2), méthode très flexible pour la présente application.

5.1.1 Revue des méthodes

Il existe plusieurs méthodes pour solutionner numériquement les EDP. L'objectif ici n'est pas d'en donner un recensement exhaustif, mais de montrer les avantages et les inconvénients des méthodes les plus utilisées dans le domaine de la commande.

Le choix de la méthode numérique est importante, puisque comme le suggère LASIECKA (1995), *certaines méthodes traditionnelles de simulation des équations aux dérivées partielles (e.g. méthodes des éléments finis) ne permettent pas de reconstruire les propriétés de commande du modèle original.*

La première méthode utilisée pour étudier la commande de procédés décrits par des équations aux dérivés partielles a été la décomposition modale (GEORGAKIS et al., 1977*b*; RAY, 1981). Cette méthode permet principalement de décomposer la solution du système en termes de modes lents et de modes rapides. Cette décomposition permet alors de réduire la dimension du système et, dans certains cas, d'obtenir une expression analytique de cette solution (BROWN, 2001). D'autres instruments d'approximation ont aussi été étudiés pour simuler et pour concevoir la commande des systèmes à paramètres répartis. Il faut souligner ici l'utilisation de la collocation orthogonale par DOCHAIN (1994). Cette méthode, comme les méthodes de Galerkin et la méthode des moments, fait partie de la

classe des méthodes à résidus pondérés. L'avantage de la méthode de collocation orthogonale consiste principalement à garantir l'obtention de la solution exacte aux points de collocation. Évidemment, le développement de la méthode des éléments finis au cours des dernières années a aussi été étudié dans le cadre de la commande (voir par exemple BECKER et al. (2000)).

L'utilisation de la méthode des différences finies, de loin la méthode la plus facile à implanter (LAPIDUS and FINDER, 1982), est assez répandue comme instrument de simulation pour étudier le contrôle des systèmes à paramètres répartis, particulièrement lorsque des schémas semi-discrets (par exemple la méthode des lignes) sont utilisés. La prochaine section présente la méthode utilisée dans le cadre de ce travail.

5.1.2 Méthode des lignes

La méthode des lignes permet de tirer avantage des algorithmes d'intégration des équations différentielles ordinaires. Typiquement, on effectue une discrétisation dans l'espace et on intègre le système d'équations différentielles ordinaires dans le temps à l'aide des algorithme disponibles, ici une méthode de Runge-Kutta à pas variable. La figure 5.1 présente l'idée de la méthode telle que présentée par CONSTANTINIDES and MOSTOUFI (1999).

Dans le cadre de ce travail, on approxime les dérivées spatiales par des différences arrières de deuxième ordre. On a,

$$\frac{du}{dz} = \frac{3u_k - 4u_{k-1} + u_{k-2}}{2\Delta z} + O(\Delta z)^2 \tag{5.1}$$

où Δz est le pas de discrétisation. L'erreur de l'approximation spatiale est d'ordre

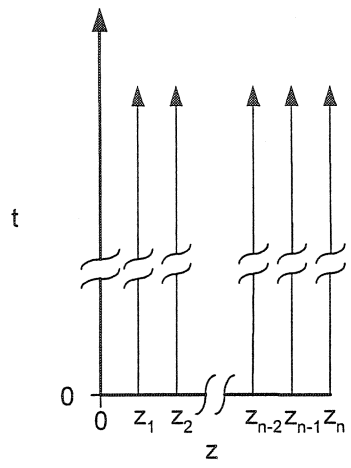

Figure 5.1 – Méthodes des lignes

2. Le problème ici est de savoir comment cette erreur se propage avec l'intégration dans le temps. L'ouvrage de HUNDSDORFER and VERWER (2003) montre l'analyse de convergence de la méthode des lignes dans le cas d'opérateurs linéaires. L'idée de cette analyse suit le théorème de Lax qui stipule :

Théorème 5.1.1 *Si un algorithme numérique est bien posé et consistent, alors il converge si et seulement si il est stable.*

L'objectif de ce mémoire n'est pas d'étudier la convergence de la méthode des lignes. On présentera aux prochaines sections, l'effet du pas de discrétisation sur les essais sur les résultats d'optimisation obtenus.

5.2 Application à la réaction de van de Vusse

L'utilisation de la réaction de van de Vusse (van de VUSSE, 1964) pour analyser les méthodes de commande (DOYLE III et al., 1992; KRAVARIS et al., 1997) et de conception (PARULEKAR et al., 1988; WU et al., 1998; BIKIĆ et al., 2002) est

très répandue dans la littérature. Nous testerons donc l'algorithme de commande développé au chapitre précédent sur ce problème.

5.2.1 Description de la réaction

Ici, les paramètres de simulation présentés au tableau 5.1 sont tirés de KLATT and ENGELL (1998); ENGELL and KLATT (1993). 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.

$$A \xrightarrow{r_1} B \xrightarrow{r_3} C$$
$$2A \xrightarrow{r_2} D$$

Le vecteur des concentrations que l'on utilise ici est :

$$C = \begin{bmatrix} C_A & C_B \end{bmatrix}^T$$

L'objectif ici est de maximiser la concentration du produit intermédiaire B à la sortie du réacteur, le vecteur H est donc donné par :

$$H = \begin{bmatrix} 0 & 1 \end{bmatrix}$$

La matrice stoechiométrique est donnée par :

$$M = \begin{bmatrix} -1 & 0 & -2 \\ 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

et la pseudo-inverse à gauche de M, $M^{\dagger}$, par :

$$M^{\dagger} = \begin{bmatrix} -0.1111 & 0.4444 \\ -0.1111 & -0.5556 \\ -0.4444 & -0.2222 \end{bmatrix}$$

Le calcul de $M^{\dagger}$ est effectué à l'aide de la fonction *pinv* de Matlab. L'algorithme utilise la décomposition en valeurs singulières pour minimiser :

$$MM^{\dagger}M = M \tag{5.2}$$

L'expression des cinétiques de réactions réelles (mais inconnues) sont données par :

$$R(C,T) = \begin{bmatrix} k_{10}e^{-E_1/T}C_A \\ k_{20}e^{-E_2/T}C_B \\ k_{30}e^{-E_3/T}C_A^2 \end{bmatrix}$$

Les paramètres de simulation sont donnés au tableau 5.1.

5.2.2 Conception du contrôleur

On reporte au Tableau 5.2.2 les principaux éléments du contrôleur dynamiques développé au chapitre précédent.

Les principaux paramètres de conception sont les suivants. Les commentaires sont tirés de Guay et al. (2004*a*) :

Tableau 5.1 – Paramètres de simulation - réaction de van de Vusse

k_{10}	=	1.287 10^{12}	h^{-1}
k_{20}	=	1.287 10^{12}	h^{-1}
k_{30}	=	9.034 10^{9}	m^3 $molA^{-1}$ h^{-1}
E_1	=	9758.3	K
E_2	=	9758.3	K
E_3	=	8560.0	K
ΔH_{R1}	=	4.20	kJ $molA^{-1}$
ΔH_{R2}	=	-11.00	kJ $molB^{-1}$
ΔH_{R3}	=	-41.85	kJ $molA^{-1}$
ρ	=	934.2	kg / m^3
C_p	=	3.01	kJ kg^{-1} K^{-1}
h	=	4032	KJ /(h m^2 K)
d	=	0.1	m
L	=	1	m
v	=	5.0	m h^{-1}
C_{Ain}	=	5.1	molA /m^3
C_{Bin}	=	0	molB /m^3
T_{in}	=	298	K
$C_A(0,z)$	=	5.1	molA /m^3
$C_B(0,z)$	=	0	molB /m^3
$T(0,z)$	=	298	K

Tableau 5.2 – Synthèse de l'algorithme de contrôle

Action de commande
$T_j = T + \frac{1}{\lambda_2}\left[v\frac{\partial T}{\partial z}\left(1 - (\lambda_1^T M^\dagger H^T \hat{W}_b^T + \hat{W}_a^T)\frac{\partial S}{\partial T}\right)\right]$
Signal de superposition
$\dot{d}(t) = -k_d d(t) + a(t) - \frac{\partial S}{\partial T}\dot{\hat{W}}_b$
Estimation de la température et filtre
$\dot{c}_1(z,t)^T = -k_z c_1(z,t)^T + \Gamma_2 F(T)^T$
$F(T) = v\frac{\partial T}{\partial z}\left[\frac{\partial S^T}{\partial T}, \lambda_1^T M^\dagger H^T \frac{\partial S^T}{\partial z}\right]$
Loi d'adaptation des paramètres
$\dot{\hat{W}} = \left\{\begin{array}{ll} \gamma_w \Gamma & \text{si } \|\hat{W}\| < w_m \text{ ou} \\ & \text{si } \|\hat{W}\| = w_m \text{ et } \hat{W}^T\Gamma \leq 0 \\ \gamma_w \left(I - \frac{\hat{W}\hat{W}^T}{\hat{W}^T\hat{W}}\right)\Gamma & \text{sinon.} \end{array}\right\}$
$\Gamma = \int_0^L \Upsilon(z,t)^T z_s(z,t) dz$

1 Gains du contrôleur.

Trois gains doivent être spécifiés par l'utilisateur. Le gain k_z commande la vitesse de convergence de l'estimé du gradient. Augmenter la valeur de ce gain augmente la vitesse de convergence de l'algorithme mais augmente aussi l'amplitude du signal de superposition. Le gain d'adaptation, γ_w, doit être choisi assez large pour permettre une certaine forme de robustesse. Le gain du signal de superposition, k_d, doit être choisi aussi grand que possible pour diminuer l'effet du signal $d(t)$ sur l'action de contrôle.

2 Conditions initiales du filtre et du signal de superposition

Dans le cas présent, ils sont initialisés à zéro. D'autres études seraient nécessaires pour en mesurer l'effet.

3 Paramètres des fonctions de base : ϕ_i et σ_i

De la théorie des approximateurs universels, il est connu que la paramétrisation aura les propriétés désirées lorsque les centres ϕ_i sont répartis uniformément sur le domaine de température. Le paramètre de variance, σ_i, doit être choisi aussi large que possible afin d'éviter la présence d'extrema multiples sur S_T.

4 Conditions initiales sur les poids des fonctions de base

Dans la plupart des applications, il est difficile d'obtenir des estimés fiables *a priori*. Les estimés des paramètres sont donc initialisés à de petites valeurs positives.

5 Conception du signal de perturbation

Dans la plupart des cas, le choix d'un signal de superposition qui permet une excitation suffisante demeure difficile à évaluer. Dans le cadre de cette étude, on utilisera la forme générale suivante :

$$a(t) = \sum_{i=1}^{N} (A_{1i}\sin((10+9i)t) + A_{2i}cos((10+9i)t))$$

Les amplitudes A_{1i} et A_{2i} sont données par des nombres aléatoires unitaires. La seule contrainte utilisée ici est que le nombre N de fréquences excitées doit être plus grand ou égal au nombre de fonctions de base de l'approximation.

6 Le pas de discrétisation

Dans le cas présent, le nombre de point de discrétisation correspond, d'un point de vue physique, au nombre de mesures et d'actuateurs distribués le long du réacteur. De ce fait, il est clair que plus le nombre de points de discrétisation de l'approximation numérique est grand, plus le contrôle sera précis.

Dans ce qui suit, on étudiera l'influence des paramètres de conception suivants :

- Discrétisation ;
- Gains K_z, K_d et γ_w ;
- Nombre de bases et variance σ_i

Ici, on étudie pas l'influence des pénalités μ et tel que mentionné plus haut, des estimés initiaux des paramètres. La synthèse de cette conception de commande sera ensuite présentée.

Influence du pas de discrétisation

On montre ici l'effet du pas de discrétisation sur les résultats d'application de l'algorithme de contrôle. Ici, il faut noter que le nombre de points de discrétisation devient le nombre de mesures de température disponibles et, par extension, du nombre d'actuateurs utilisés. En somme, une discrétisation très fine, impossible dans la pratique, augmente substantiellement le nombre de degrés de liberté dans le contrôle.

La figure 5.2.2 présente les profils en z et t du produit pour quatre pas de disrétisation

différents (N = 10, 20, 50 et 100 points).

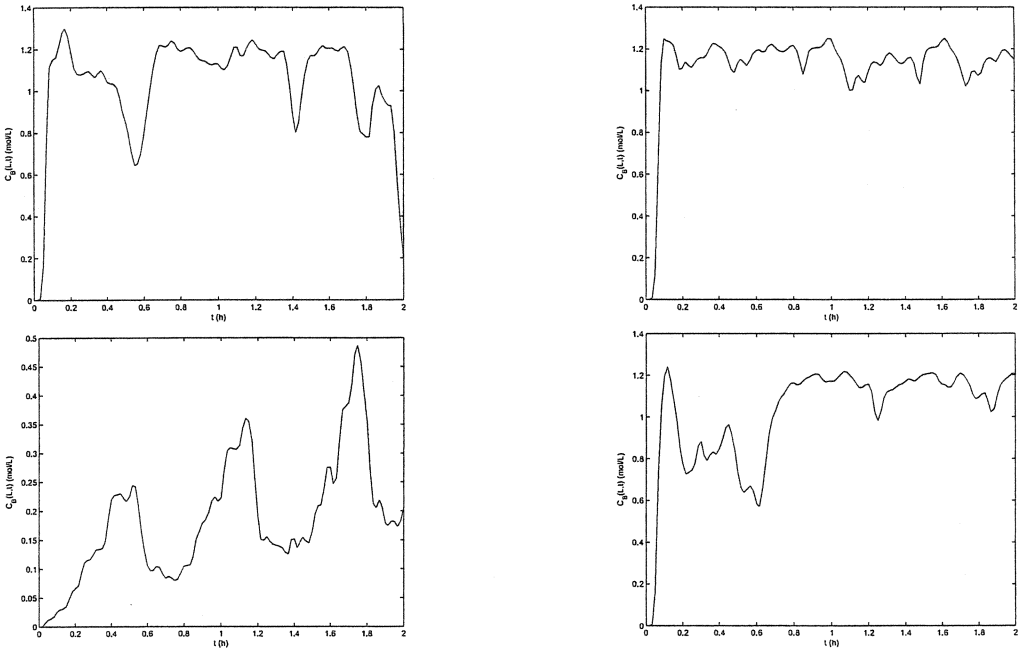

Figure 5.2 – Profils de $C_B(z,t)$ pour différents nombres de points de discrétisation - van de Vusse.

Les figures 5.2.2 et 5.2.2 présentent les différents profils de température et de la température dans la chemise pour les différents pas de discrétisation. Les paramètres de contrôle utilisés sont donnés au tableau 5.4.

L'effet de la discrétisation est négligeable (sauf pour une erreur résiduelle). Dans la pratique, en supposant un nombre suffisant de mesures discrètes le long du réacteur, il est donc possible d'appliquer l'algorithme sans interpolation.

Le temps de simulation requis pour les simulations présentées dans cette section sont donnés au tableau 5.2.2. Ces calculs ont été réalisés avec la version Microsoft Windows de MATLAB 6.5 sur un processeur Pentium III cadensé à 750 GHz.

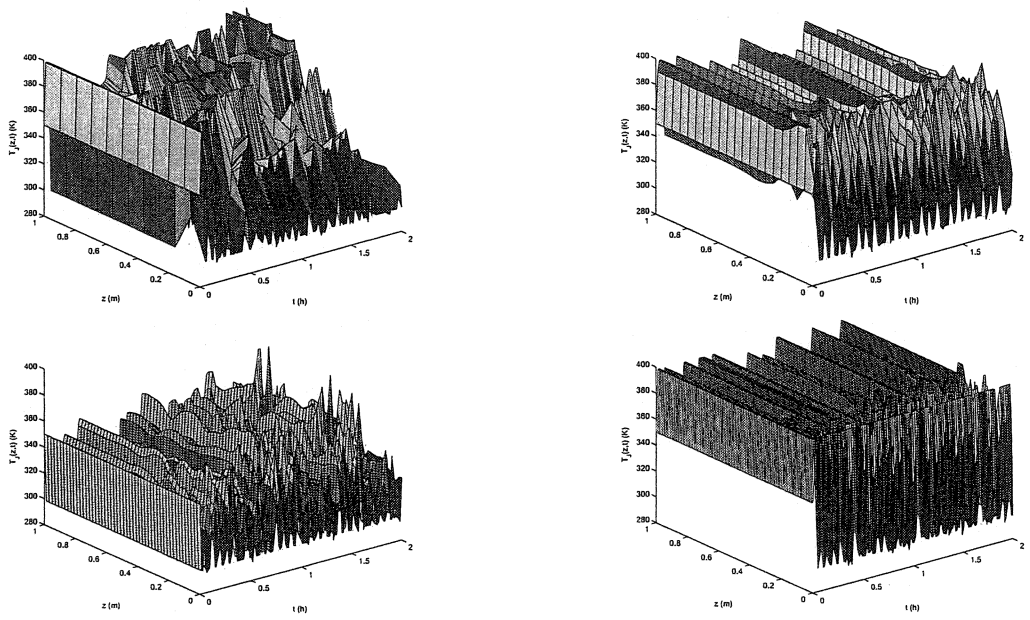

Figure 5.3 – Profils de $T_J(z,t)$ pour différents nombres de points de discrétisation - van de Vusse.

Tableau 5.3 – Temps de simulation en fonction des pas de discrétisation

N	temps (secondes)
10	506.2
20	1323
50	6412
100	34 410

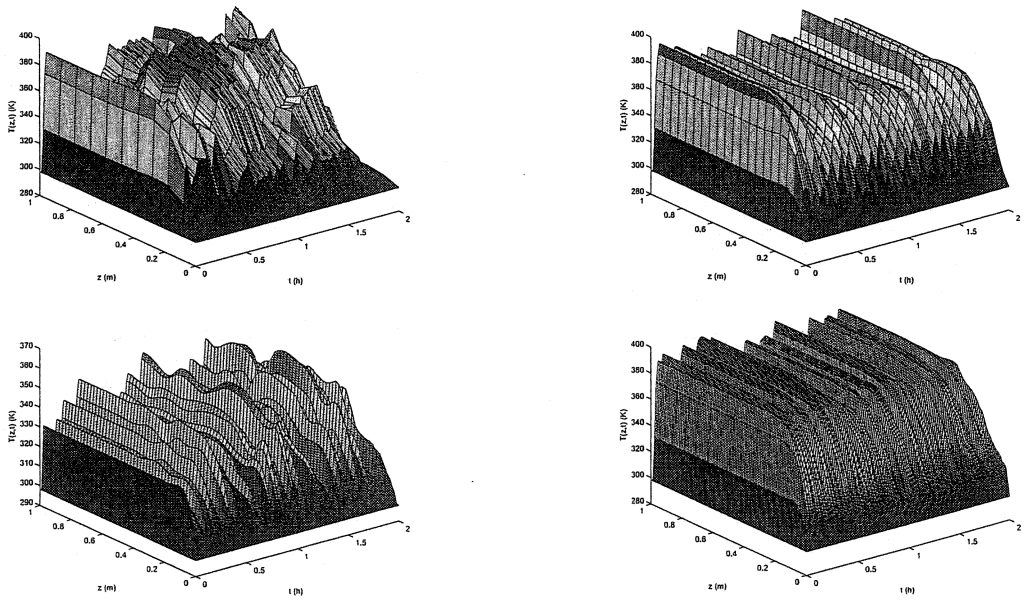

Figure 5.4 – Profils de $T(z,t)$ pour différents nombres de points de discrétisation - van de Vusse.

Influence des gains K_z, K_d et γ_w

L'effet de la variation des gains de contrôle K_z, K_d et γ_w sur la valeur de la concentration du produit à la sortie du réacteur sont présentées aux figures 5.5, 5.6 et 5.7 respectivement. Pour l'ensemble de ces simulations, les paramètres fixes sont donnés au tableau 5.4.

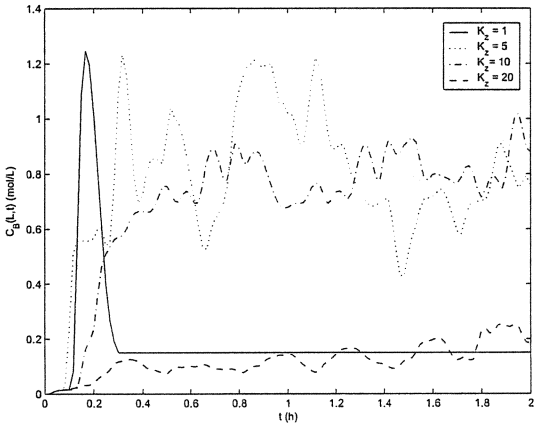

Figure 5.5 – Influence du gain K_z sur la fonction objectif - van de Vusse

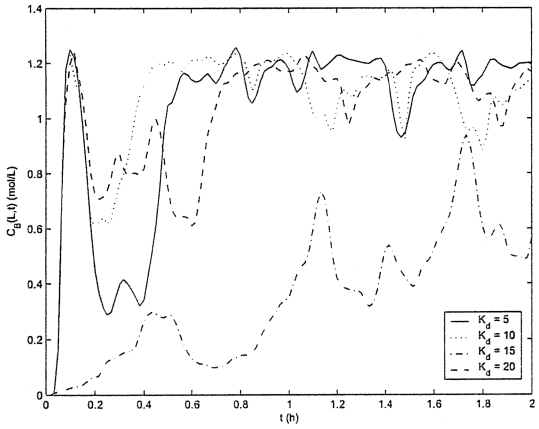

Figure 5.6 – Influence du gain K_d sur la fonction objectif - van de Vusse

Le gain de contrôle doit être choisi avec soin. À la figure 5.5, un gain trop faible a

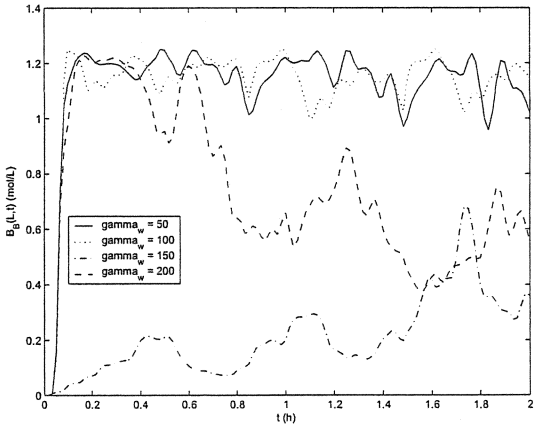

Figure 5.7 – Influence du gain γ sur la fonction objectif - van de Vusse

pour effet de faire diverger l'algorithme. Un gain trop fort ralentit la convergence de l'algorithme (les variations de la variable manipulée sont cependant trop importantes). Le choix du gain K_d doit être fait en fonction de la valeur du gain du contrôleur. Sinon, une convergence trop lente ou des effets dynamiques indésirables (e.g. $K_d = 5$ dans 5.6) surviennent. On observe ici qu'un gain d'adaptation trop élevé amène l'algorithme à une mauvaise approximation de l'optimum. Une valeur de γ_w trop faible a pour effet de ralentir la convergence (oscillations encore fortes à la fin de la simulation).

Influence des bases

Pour faire ressortir les effets des paramètres étudiés ici, on utilise des gains plus faibles pour les simulations de cette section. L'influence du nombre de bases sur la valeur de la fonction objective est montrée à la figure 5.8.

Pour cette exemple de simulation, le nombre de bases est important pour amener le système au bon régime permanent. Le temps de simulation en est cependant affecté.

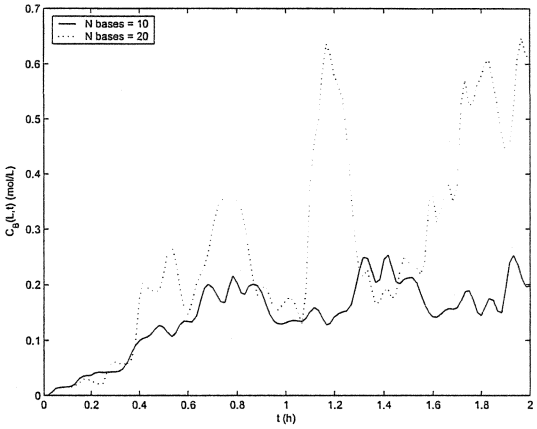

Figure 5.8 – Influence du nombre de bases la fonction objectif - van de Vusse

La figure 5.9 présente l'effet de la valeur du paramètre de variance de l'approximation utilisée. On voit ici la nécessité d'utilisé une variance qui permet de couvrir adéquatement le domaine de la température pour obtenir une approximation adéquate de la cinétique et converger vers l'optimum.

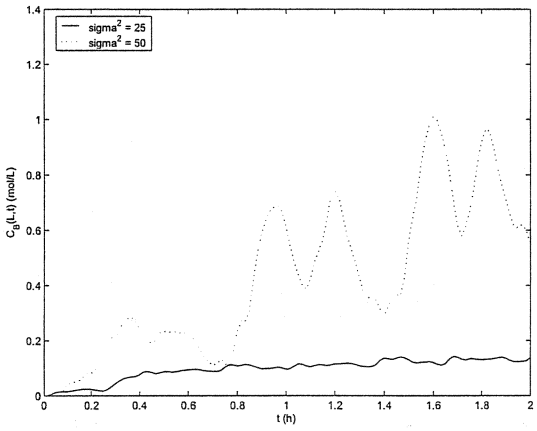

Figure 5.9 – Influence du nombre de bases la fonction objectif - van de Vusse

Tableau 5.4 – Paramètres de contrôle - réaction de van de Vusse

K_z	=	10
K_d	=	20
γ_w	=	100
σ^2	=	25
$\mu_{1,2}$	=	1
$\epsilon_{1,2}$	=	0.001
w_m	=	1000
$\hat{\theta}_{A,B}(z,0)$	=	$\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1\end{bmatrix}^T$

Synthèse

Les paramètres de contrôle les plus appropriés déterminés dans la présente étude pour la réaction de van de Vusse sont présentés au tableau 5.4.

La figure 5.10 présente le profil de concentration du composant désiré et la figure 5.11 présente la concentration du composant désiré à la sortie. La figure 5.24, le profil de température (avec 20 points de discrétisation).

Le profil de la variable manipulée $T_J(z,t)$ pour les valeurs montrés plus haut est présenté à la figure 5.13.

Pour cette application, l'algorithme amène le système assez rapidement au profil optimal. L'effet du signal de superposition pourrait probablement être diminué plus rapidement. Le profil de température dans la chemise tient le système assez loin des contraintes de température et empêche la formation d'un point chaud dans le réacteur.

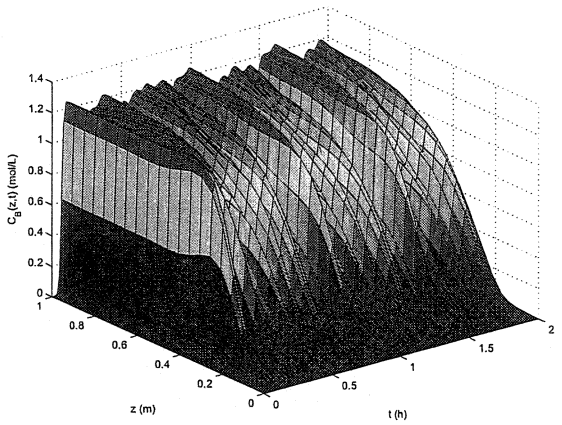

Figure 5.10 – Profil du produit désiré - van de Vusse

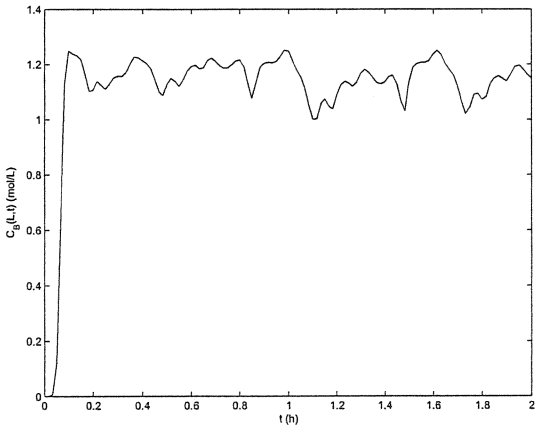

Figure 5.11 – Évolution du produit désiré à la sortie du réacteur - van de Vusse

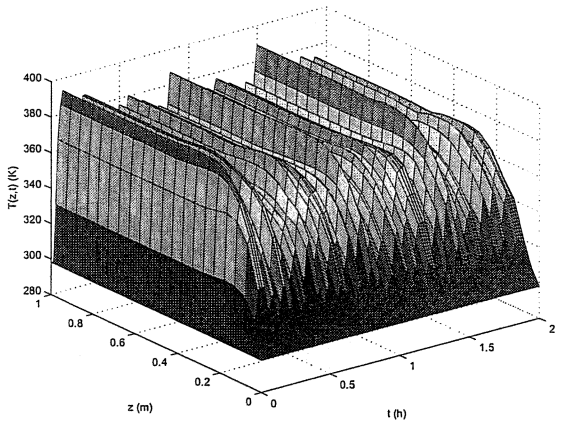

Figure 5.12 – Profil de température - van de Vusse

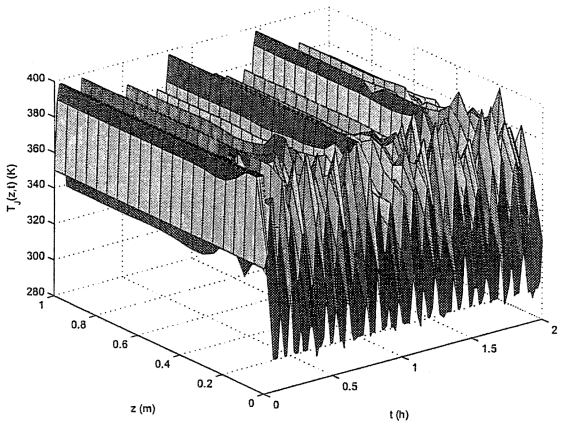

Figure 5.13 – Profil de température dans la chemise - van de Vusse

5.3 Application à la réaction de Williams-Otto

Cette section permettra de tester l'algorithme développé au chapitre 4 sur la réaction de Williams-Otto, présentée originalement dans le contexte de l'optimisation d'une usine par WILLIAMS and OTTO (1960). Dans le présent mémoire, on se concentre exclusivement sur le problème modifié par ROBERTS (1979) sans courant de recirculation.

5.3.1 Description de la réaction

La réaction de Williams-Otto est donnée par :

$$\begin{aligned} A + B &\xrightarrow{r_1} 2C \\ B + 2C &\xrightarrow{r_2} P + 2E \\ 2C + P &\xrightarrow{r_1} 3G \end{aligned}$$

Le vecteur des fractions massiques est donné par :

$$X = \begin{bmatrix} X_A & X_B & X_C & X_P & X_E & X_G \end{bmatrix}^T$$

L'objectif est de maximiser la concentration du produit d'intérêt, P, et le vecteur H est donné par :

$$H = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

La matrice stoechiométrique, M, est la suivante :

$$M = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 0 \\ 2 & -2 & -2 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

La pseudo-inverse à gauche de M, $M^{\dagger}$, est égale à :

$$M^{\dagger} = \begin{bmatrix} -0.2290 & -0.2815 & 0.2448 & -0.0017 & 0.1049 & 0.1626 \\ -0.0524 & -0.1713 & -0.1119 & 0.1294 & 0.2378 & -0.0315 \\ -0.0542 & -0.0437 & -0.0490 & -0.0997 & -0.0210 & 0.2675 \end{bmatrix}$$

L'expression des cinétiques de réactions réelles sont données par :

$$\mathbf{R}(\mathbf{C}, T) = \begin{bmatrix} k_{10} e^{-E_1/T} X_A X_B \\ k_{20} e^{-E_2/T} X_B X_C \\ k_{30} e^{-E_3/T} X_C X_P \end{bmatrix}$$

Les paramètres de simulation sont donnés au tableau 5.5.

5.3.2 Conception du contrôleur

On reprend ici sensiblement la même étude qu'à la section 5.2.

Tableau 5.5 – Paramètres de simulation - réaction de Williams-Otto

k_{10}	=	1.6599 x 10^{6}	s^{-1}
k_{20}	=	7.2117 x 10^{8}	s^{-1}
k_{30}	=	2.6725 x 10^{12}	s^{-1}
E_1	=	6 666.7	K
E_2	=	8 333.3	K
E_3	=	11 111.1	K
ΔH_{R1}	=	263.8	kJ
ΔH_{R2}	=	158.3	kJ
ΔH_{R3}	=	226.3	kJ
ρ	=	800.9205	kg m^3
C_p	=	1.6733	kJ kg^{-1} K^{-1}
h	=	1.338	J /(s m^2 K)
d	=	1.3	m
L	=	2	m
v	=	0.0063	m s^{-1}
$M_{A,B,P}$	=	100	kg/kmol
$M_{C,E}$	=	200	kg/kmol
M_G	=	300	kg/kmol
$X_A(0,t) = X_A(z,0)$	=	0.2764	kg_A /kg
$X_B(0,t) = X_B(z,0)$	=	0.7236	kg_B /kg
$X_{C,P,G}(0,t) = X_{C,P,G}(z,0)$	=	0	$kg_{C,E,P,G}$ /kg
$T(z,0) = T(0,t)$	=	325	K
T_min	=	322.2	K
T_max	=	377.7	K

Influence du pas de discrétisation

On montre ici l'effet du pas de discrétisation sur les résultats d'application de l'algorithme de contrôle.

La figure 5.3.2 présente les profils en z et t du produit pour quatre pas de disrétisation différents (N = 10, 20, 50 et 100 points).

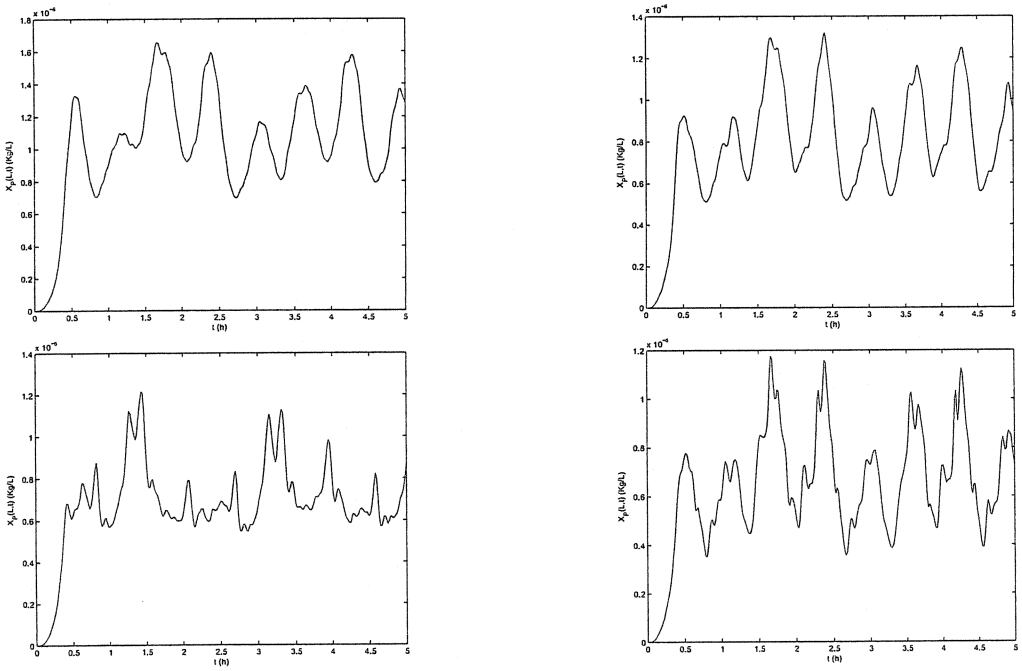

Figure 5.14 – Profils de $X_P(z,t)$ pour différents nombres de points de discrétisation - Williams-Otto.

Les figures 5.3.2 et 5.3.2 présentent les différents profils de température et de la température dans la chemise pour les différents pas de discrétisation. Les paramètres des contrôleurs sont donnés au tableau 5.6.

L'effet de la discrétisation est très limitée pour la réaction de Williams-Otto, particulièrement si l'on considére la forme générale des profils de concentration. Il faut

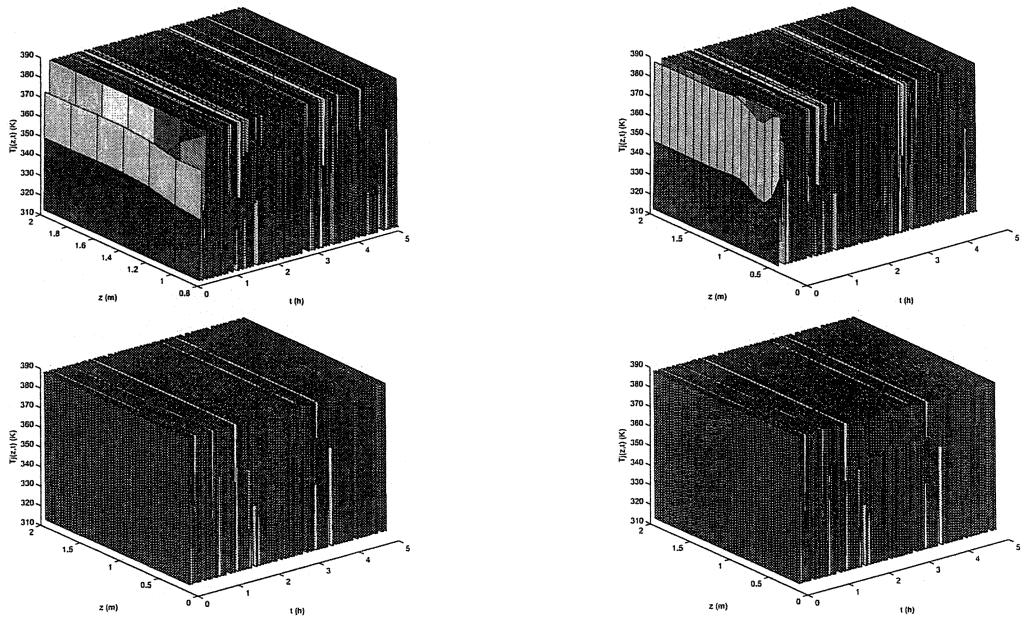

Figure 5.15 – Profils de $T_J(z,t)$ pour différents nombres de points de discrétisation - Williams-Otto.

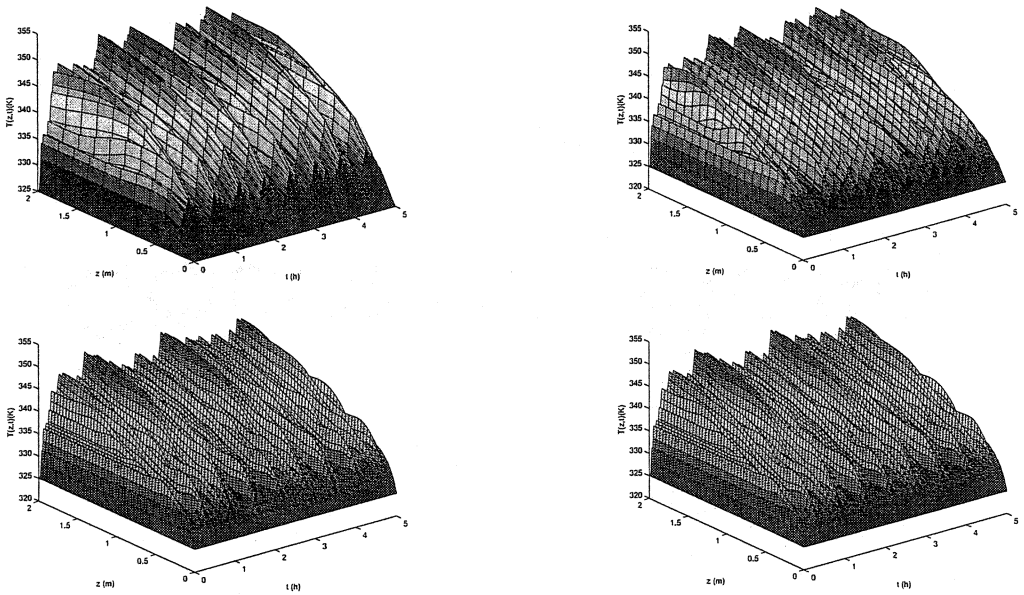

Figure 5.16 – Profils de $T(z,t)$ pour différents nombres de points de discrétisation - Williams-Otto.

cependant noter l'effet sur la commande $T_J(z,t)$. Un filtre sur le calcul de la dérivée spatiale de température ou une pénalité plus importante sur la commande pourrait probablement limitée cet effet. Les implications sur le résultat final devraient être étudiés dans de futures études. L'erreur résiduelle en $z = L$ (valeurs absolues) est limitée, mais demeure très difficile à estimer.

Influence des gains K_z, K_d et γ_w

L'effet de la variation des gains de contôle K_z, K_d et γ_w sur la valeur de la concentration du produit à la sortie du réacteur sont présentées aux figures 5.17, 5.18 et 5.19 respectivement.

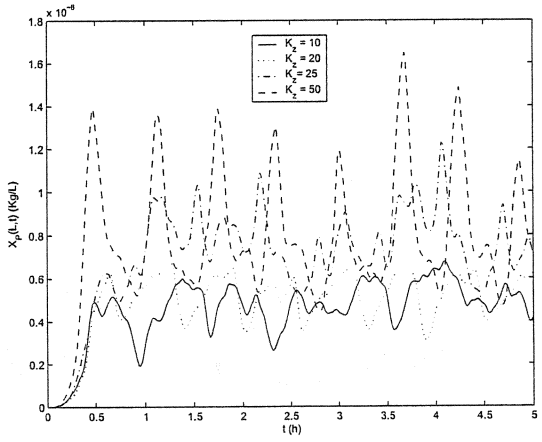

Figure 5.17 – Influence du gain K_z sur la fonction objectif - Williams-Otto

Les résultats du choix des gains pour la réaction de Williams-Otto montrent peu d'effet pour les valeurs finales de la fonction objectif. Cependant, particulièrement pour le gain de contrôle, les effets dynamiques peuvent être importants. On peut voir les désavantages (fortes oscillations) d'un gain K_z trop fort. Le gain du signal de superposition doit être choisi avec soin afin d'assurer de trouver l'optimum. L'effet de γ_w est cependant relativement négligeable sur la plage étudiée.

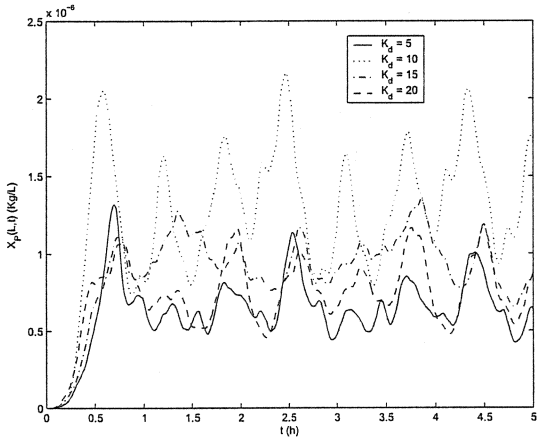

Figure 5.18 – Influence du gain K_d sur la fonction objectif - Williams-Otto

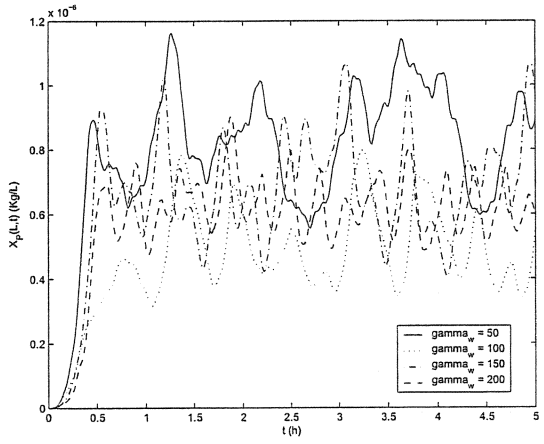

Figure 5.19 – Influence du gain γ sur la fonction objectif - Williams-Otto

Influence des bases

L'influence du nombre de bases sur la valeur de la fonction objective est montrée à la figure 5.20.

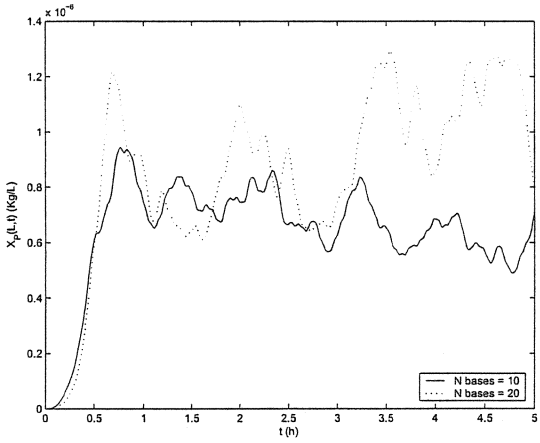

Figure 5.20 – Influence du nombre de bases sur la fonction objectif - Williams-Otto

Dans le cas présent, on remarque que le nombre de bases a peu d'effet sur la convergence et sur le résultat de l'algorithme.

La figure 5.21 présente l'effet de la valeur du paramètre de variance de l'approximation utilisée. On remarque que pour cette application, outre l'effet dynamique, le résultat final est relativement semblable. Prendre une valeur de σ trop faible risque cependant de faire converger l'algorithme vers un régime permanent sous-optimal.

Synthèse

Les paramètres de contrôle les plus appropriés déterminés dans cette étude pour la réaction de Williams-Otto sont présentés au tableau 5.6.

La figure 5.22 présente le profil de concentration du composant désiré et la figure

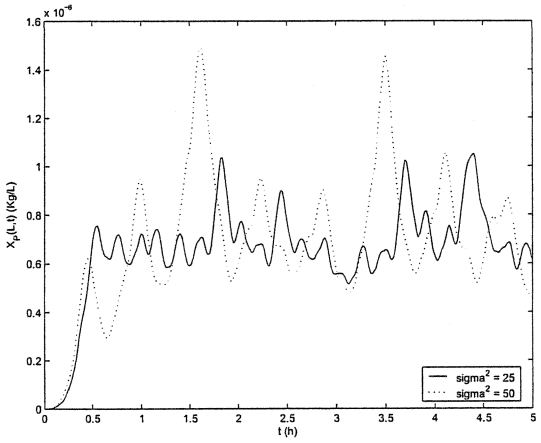

Figure 5.21 – Influence de σ sur la fonction objectif - Williams-Otto

Tableau 5.6 – Paramètres de contrôle - réaction de Williams-Otto

K_z	=	10
K_d	=	10
γ_w	=	100
σ^2	=	25
μ_1	=	1
μ_2	=	1
ϵ_1	=	0.001
ϵ_2	=	0.001
w_m	=	1000
$\hat{\theta}_{A,B}(z,0)$	=	$\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1\end{bmatrix}^T$

5.23 présente la concentration du composant désiré à la sortie. La figure 5.24, le profile de température (avec 20 points de discrétisation).

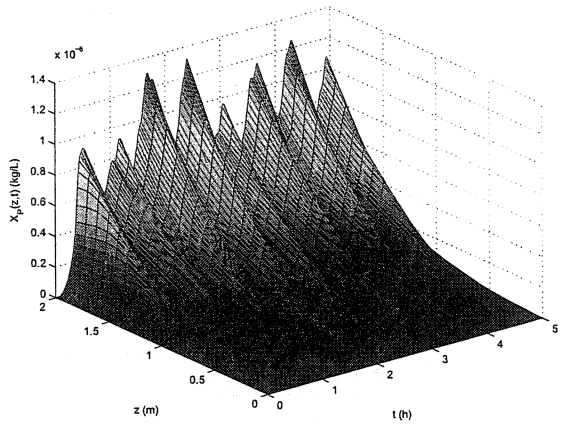

Figure 5.22 – Profil du produit désiré - Williams-Otto

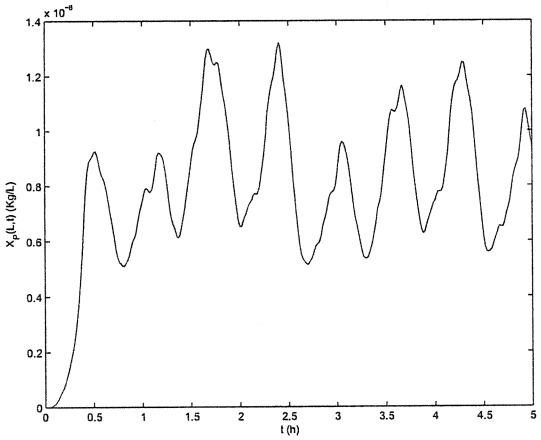

Figure 5.23 – Évolution du produit désiré à la sortie du réacteur - Williams-Otto

Le profil de $T_J(z,t)$ est présenté à la figure 5.25.

Pour cette application, le profil de $T_J(z)$ est irréaliste. Afin de limiter la commande (et les amplitudes de changement de cette commande), il faudrait probablement imposer un filtre sur la dérivée spatiale de la température, $\frac{dT(z)}{dz}$, qui est inversée

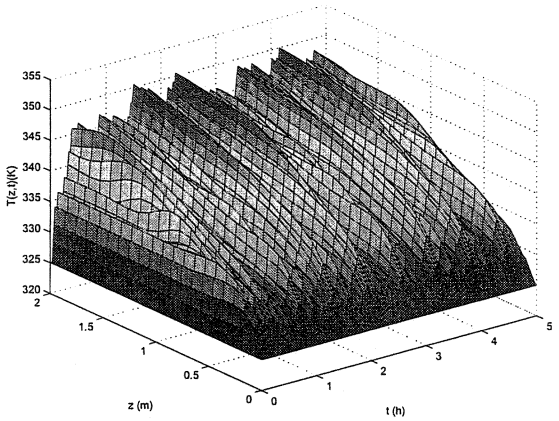

Figure 5.24 – Profil de température - Williams-Otto

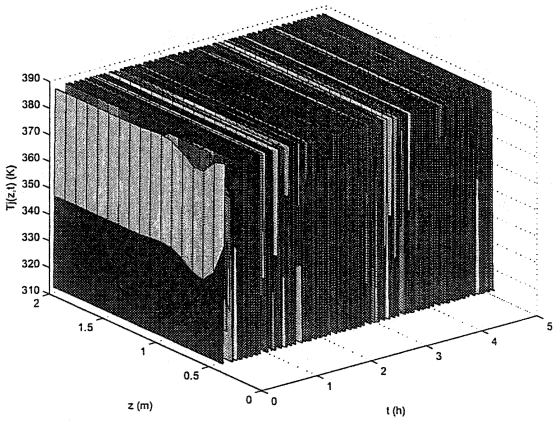

Figure 5.25 – Profil de température dans la chemise - Williams-Otto

dans l'algorithme. Le choix des poids μ_1 et μ_2 permet de limiter cet effet, malheureusement, au prix d'une commande trop conservative (et de ce fait, d'une perte d'optimimalité). Ceci devrait être étudié dans de futures applications.

CHAPITRE 6

CONCLUSIONS ET RECOMMANDATIONS

6.1 Conclusions générales

L'objectif de ce mémoire était d'étendre l'application de la commande adaptative par recherche d'extremum, telle que développée par (GUAY et al., 2003, 2004*b*) à des systèmes décrits par des équations aux dérivées partielles hyperboliques de premier ordre (réacteur piston). L'idée maîtresse de cette recherche consistait à optimiser en ligne une fonction de la concentration sous contraintes de température à la sortie du réacteur en utilisant le profil de température dans la chemise du réacteur.

Dans le cadre de cette étude, l'expression des cinétiques de réaction était supposée inconnue et de ce fait, la conception d'un algorithme de commande et d'estimation a été réalisée. La stabilité du système en boucle fermée a été démontrée en utilisant une fonctionnelle de Lyapunov, évaluée le long du réacteur. La convergence

du système à un de ses profils optimaux a été garantie au prix d'une condition d'excitation persistante des paramètres.

Certains éléments de commande optimale des profils en régime permanent (principe du maximum) ont aussi été examinés au préalable. La technique de commande adaptative de recherche d'extremum a été testée et validée numériquement sur un simulateur qui approxime le système d'équations aux dérivées partielles par la méthode des lignes. Deux réactions ont été testées : les réactions de van de Vusse et de Williams-Otto.

La section suivante présente quelques pistes de recherches subséquentes au travail présenté dans ce mémoire et de manière plus générale, de la commande adaptative par recherche d'extremum.

6.2 Recommandations et travaux futurs

La technique de commande adaptative par recherche d'extremum appliquée à des réacteurs chimiques non-isothermes a montré son efficacité pour la commande et l'optimisation en ligne des réacteurs CSTR (GUAY et al., 2003, 2004*b*). Ce mémoire a montré la première application dans la littérature à des réacteurs pistons décrits par des équations hyperboliques de premier ordre.

Dans un premier temps, plusieurs problèmes proches de celui traité dans le cadre de ce mémoire peuvent être envisagés. Entre autre, il n'a pas été étudié, jusqu'à présent, d'utiliser, pour les systèmes hyperboliques, une commande à la frontière (utilisation de la température d'entrée, par exemple), la méthode la plus généralement utilisée pour la commande des systèmes à paramètres répartis. Le système pourrait alors être traité comme un retard pur. Une deuxième voie concerne la commande adaptative des réacteurs tubulaires avec convection-diffusion-réaction (décrits par

des équations paraboliques). Le principal point ici consiste à formuler le problème d'optimisation en tenant compte de la dérivée spatiale seconde. Pour ce cas, la commande à la frontière devient une voie de recherche intéressante. La formulation de la fonction objectif pourrait aussi être révisée, particulièrement pour inclure plus spécifiquement le coût de la commande dans la fonctionnelle objectif, tel que défini dans l'application présentée par SMETS et al. (2002).

Du point de vue de la technique proposée, certains éléments devraient être ré-étudiés. Il faut observer ici la nécessité, dans l'application de la méthode, de garantir l'existence et l'unicité de profils optimaux. Ceci nécessiterait fort probablement l'utilisation de la théorie des systèmes à paramètres répartis telle que présentée dans (LUO et al., 1999), c'est-à-dire via une représentation du système dans un espace abstrait. L'utilisation de cette théorie pour l'analyse des systèmes non-linéaires n'est pas encore totalement définie au niveau de l'application. Cependant, certains travaux récents (AKSIKAS et al., 2004) permettent d'envisager cette analyse dans un proche futur.

La question de la persistence d'excitation, nécessaire à la convergence des paramètres, devrait être abordée dans l'optique des systèmes à paramètres répartis, particulièrement au sens de la conception du signal d'excitation. Les travaux de TEEL (2000) et de DEMETRIOU and ROSEN (1994) mériteraient d'être étudiés plus en profondeur.

RÉFÉRENCES

AKSIKAS, I., WINKIN, J. and DOCHAIN, D. (2004), Asymptotic Stability of Infinite-Dimensional Semilinear Systems : Application to a Non-Isothermal Reactor. Submitted to Automatica.

ALONSO, A. A., YDSTIE, E. and BANGA, J. R. (2002), 'From Irreversible Thermodynamics to a Robust Control Theory for Distributed Process Systems', *Journal of Process Control* **12**, 507–517.

ANDERSON, B., BITMEAD, R., JOHNSON, C., KOKOTOVIĆ, P., KOSUT, R., MAREELS, I., PRALY, L. and RIEDLE, B. (1986), *Stability of Adaptive Systems : Passivity and Averaging Analysis*, MIT Press.

ARIS, R. and AMUNDSON, N. R. (1958), 'An Analysis of Chemical Reactor Stability and Control - I : The Possibility of Local Control, with Perfect or Imperfect Control Mechanisms', *Chemical Engineering Science* **7**, 121–131.

ARIYUR, K. B. (2002), *Multiparameter Extremum Seeking and Applications to Propulsion and Aerodynamics Problems*, PhD thesis, University of California, San Diego.

ARIYUR, K. B. and KRSTIĆ, M. (2003), *Real-Time Optimization by Extremum-Seeking Control*, John Wiley and Sons.

ASELTINE, J., MANCINI, A. and SARTURE, C. (1958), 'A Survey of Adaptive Control Systems', *IRE Transactions of Automatic Control* **6**, 102–108.

ÅSTRÖM, K. J. and WITTENMARK, B. (1995), *Adaptive Control 2nd ed.*, Addison-Wesley Publishing Company.

AUBIN, J.-P. (1986), Viability Theorems for Control Systems with Feedbacks, *in* I. Lasiecka and R. Triggiani, eds, 'Control Problems for Systems Described by Partial Differential Equations and Applications. Proceedings of the IFIP-WG 7.2 Working Conference', Springer-Verlag, Gainesville, FA.

AUBIN, J.-P. (1990), *Viability Theory*, Systems and Control : Foundations and Applications, Birkhäuser, Boston.

BARAS, J. and BROCKETT, R. (1975), 'H^2-Functions and Infinite-Dimensional Realization Theory', *SIAM J. Control* **13**(1), 221–241.

BARBU, V. (1993), *Analysis and Control of Nonlinear Infinite Dimensional Systems*, Mathematics in Science and Engineering, Academic Press, Boston.

BAUMEISTER, J., SCONDO, W., DEMETRIOU, M. and ROSEN, I. (1997), 'On-Line Parameter Estimation for Infinite-Dimensional Dynamical Systems', *SIAM Journal on Control and Optimization* **35**(3), 678–713.

BECKER, R., KAPP, H. and RANACHER, R. (2000), 'Adaptive Finite Element Methods for Optimal Control of Partial Differential Equations : Basic Concept', *SIAM Journal on Control and Optimisation* **39**, 113–132.

BERGER, A. J. and LAPIDUS, L. (1968), 'An Introduction to the Stability of Distributed Systems via a Liapunov Functional', *AIChE Journal* **14**(4), 558–568.

BIKIĆ, D., BUTINA, B. and GLAVIĆ, P. (2002), 'Optimal Reactor Systems for van de Vusse Reaction Scheme with Multicomponent Feed', *Computers and Chemical Engineering* **26**, 1335–1343.

BILOUS, O. and AMUNDSON, N. R. (1956*a*), 'Optimum Temperature Gradients in Tubular Reactor - I : General Theory and Methods', *Chemical Engineering Science* **5**, 81–92.

BILOUS, O. and AMUNDSON, N. R. (1956*b*), 'Optimum Temperature Gradients in Tubular Reactor - II : Numerical Study', *Chemical Engineering Science* **5**, 115–126.

BLACKMAN, P. (1962), Extremum-Seeking Regulators, *in* 'An Exposition of Adaptive Control', Pergamon Press, Imperial College of Science and Technology, pp. 36–50.

BÖHM, M., DEMETRIOU, M., REICH, S. and ROSEN, I. (1998), 'Model Reference Adaptive Control of Distributed Parameter Systems', *SIAM Journal on Control and Optimization* **36**(1), 33–81.

BONVIN, D., SRINIVASAN, B. and PALANKI, S. (2003), 'Dynamic Optimization of Batch Processes I. Characterization of the Nominal Solution', *Computers and Chemical Engineering* **27**(1), 1–26.

BOŠKOVIĆ, D. M., BALOGH, A. and KRSTIĆ, M. (2003), 'Backstepping in Infinite Dimension for a Class of Parabolic Distributed Parameter Systems', *Mathematics of Control, Signals and Systems* **16**, 44–75.

BOŠKOVIĆ, D. M. and KRSTIĆ, M. (2002*a*), 'Backstepping Control of Chemical Tubular Reactors', *Computers and Chemical Engineering* **26**(7-8), 1077–1085.

BOŠKOVIĆ, D. M. and KRSTIĆ, M. (2002*b*), Boundary Control of Chemical Tubular Reactors, *in* 'Proceedings of the 15th Triennial World Congress', IFAC, Barcelona, Spain.

BROWN, J. L. (2001), '*Modal Decomposition of Convection-Reaction-Diffusion Systems*', M. Eng. thesis, University of Alberta, Edmonton.

BUTKOVSKIY, A. (1969), *Distributed Control Systems*, American Elsevier Publishing Company, New-York.

CARBERRY, J. J. (1976), *Chemical and Catalytic Reaction Engineering*, McGraw-Hill Chemical Engineering Series, McGraw-Hill.

CHRISTOFIDES, P. D. (2001), *Nonlinear and Robust Control of PDE Systems*, Systems and Control : Foundations and Applications, Birkäuser, Boston.

CHRISTOFIDES, P. D. and DAOUTIDIS, P. (1996), 'Feedback Control of Hyperbolic PDE Systems', *AIChE Journal* **42**, 3063–3086.

CHRISTOFIDES, P. D. and DAOUTIDIS, P. (1998), 'Robust Control of Hyperbolic PDE Systems', *Computers and Chemical Engineering* **53**, 85–105.

CLOUGH, D. E. and RAMIREZ, W. F. (1971), Local Stability of Tubular Reactors, *in* 'Proceedings of the IFAC Symposium on Control of Distributed Parameter Systems', Banff, Canada.

CONSTANTINIDES, A. and MOSTOUFI, N. (1999), *Numerical Methods for Chemical Engineers with MATLAB Applications*, Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences, Prentice-Hall.

CURTAIN, R. F. and PRITCHARD, A. J. (1978), *Infinite Dimensional Linear Systems Theory*, Lectures Notes in Control and Information Sciences, Springer-Verlag, Berlin.

CURTAIN, R. and ZWART, H. (1995), *An Introduction to Infinite-Dimensional Linear Systems Theory*, Texts in Applied Mathematics, Springer-Verlag, New-York.

DeHAAN, D. and GUAY, M. (2004), Extremum Seeking Control of Nonlinear Systems with Parametric Uncertainties and State Constraints. Submitted to NOLCOS.

DEMETRIOU, M. and ROSEN, I. (1994), 'On the Persistence of Excitation in the Adaptive Estimation of Distributed Parameter Systems', *IEEE Transactions on Automatic Control* **39**(5), 1117–1123.

DeVERA, A. L. and VARMA, A. (1979), 'Yield Optimization for the van de Vusse Reaction', *Chemical Engineering Journal* **17**, 163–167.

DOCHAIN, D. (1994), '*Contribution to the Analysis and Control of Distributed Parameter Systems with Application to (Bio)Chemical Processes and Robotics*', Thèse d'habilitation.

DOCHAIN, D. (2001), 'State Observation and Adaptive Linearizing Control for Distributed Parameter (bio)Chemical Reactors', *International Journal of Adaptive Control and Signal Processing* **15**, 633–653.

DOYLE III, F., ALLGOWER, F., OLIVEIRA, S., GILLES, E. and MORARI, M. (1992), On Nonlinear Systems with Poorly Behaved Zero Dynamics, *in* 'Proceedings of the American Control Conference', IEEE, Chicago, IL, USA, pp. 2571–2575.

DOYLE III, F. J. and KAYIHAN, F. (1999), 'Reaction Profile Control of the Continuous Pulp Digester', *Chemical Engineering Science* **54**, 2679–2688.

DRAPER, C. and LI, Y. (1954), 'Principles of optimizing control systems', *ASME Publications* .

ENGELL, S. and KLATT, K.-U. (1993), Nonlinear Control of a Non-Minimum Phase CSTR, *in* 'Proceedings of the American Control Conference', San-Francisco, CA, pp. 2941–2945.

FATTORINI, H. (1968), 'Boundary Control Systems', *SIAM J. Control* **6**(3), 349–385.

FEINBERG, M. (1999), 'Recent Results in Optimal Reactor Synthesis via Attainable Region Theory', *Chemical Engineering Science* **54**, 2535–2543.

FLIESS, M., MOUNIER, H., ROUCHON, P. and RUDOLPH, J. (1998), A Distributed Parameter Approach to the Control of a Tubular Reactor : a Multi-Variable Case, *in* 'Proceedings of the 37th IEEE Conference on Decision and Control', Tampa, FA, USA, pp. 439–442.

FOGLER, H. S. (1999), *Elements of Chemical Reaction Engineering 3rd ed.*, Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences, Prentice Hall PTR, Upper Saddle River, NJ.

GAVALAS, G. R. (1968), *Nonlinear Differential Equations of Chemically Reacting Systems*, Springer-Verlag.

GEORGAKIS, C., ARIS, R. and AMUNDSON, N. R. (1977*a*), 'Studies in the Control of Tubular Reactors - I : General Considerations', *Chemical Engineering Science* **32**, 1359–1369.

GEORGAKIS, C., ARIS, R. and AMUNDSON, N. R. (1977*b*), 'Studies in the Control of Tubular Reactors - II : Stabilization by Modal Control', *Chemical Engineering Science* **32**, 1371–1379.

GEORGAKIS, C., ARIS, R. and AMUNDSON, N. R. (1977*c*), 'Studies in the Control of Tubular Reactors - III : Stabilization by Observer Design', *Chemical Engineering Science* **32**, 1381–1387.

GOLDEN, M. P. and YDSTIE, B. E. (1989), 'Adaptive Extremum Control Using Approximate Process Models', *AIChE Journal* **35**(7), 1157–1169.

GORDON, T. (1987), 'Simple Method for the Design of Lyapunov Functionals in Distributed-Parameter Systems', *International Journal of Control* **46**(2), 709–717.

GUAY, M., DOCHAIN, D. and PERRIER, M. (2003), Adaptive Extremum Seeking Control of Nonisothermal Continuous Stirred Tank Reactors with Temperature Constraints, *in* 'Proceedings of the 43rd IEEE Conference of Decision and Control', pp. 4753–4758.

Guay, M., Dochain, D. and Perrier, M. (2004*a*), Adaptive Extremu Seeking Control of Nonisothermal Continuous Stirred Tank Reactors. in Press.

GUAY, M., DOCHAIN, D. and PERRIER, M. (2004*b*), Adaptive Extremum Seeking Control of Nonisothermal Continuous Stirred Tank Reactors with Temperature Constraints. Submitted to International Journal of Robust and Nonlinear Control.

HANCZYK, E. and PALAZOGLOU, A. (1995), 'Nonlinear Control of a Distributed Parameter Process : the Case of Characteristics', *Industrial and Engineering Chemistry Research* **34**, 4406.

HEATH, M. T. (2002), *Scientific Computing : An Introductory Survey*, 2nd edn, McGraw-Hill.

HICKS, G. and RAY, W. (1971), 'Approximation Methods for Optimal Control Synthesis', *The Canadian Journal of Chemical Enginnering* **49**, 522–528.

HILDERBRANDT, D. and GLASSER, D. (1990), 'The Attainable Region and Optimal Reactor Stuctures', *Chemical Engineering Science* **45**(8), 2161–2168.

HONG, K.-S. and BENTSMANN, J. (1994), 'Direct Adaptive Control of Parabolic Systems : Algorithm Synthesis and Convergence and Stability Analysis', *IEEE Transactions on Automatic Control* **39**(10), 2018–2033.

HUNDSDORFER, W. and VERWER, J. (2003), *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*, Springer.

ILCHMANN, A. and LOGEMANN, H. (1998), 'Adaptive λ-Tracking for a Class of Infinite-Dimensional Systems', *Systems and Control Letters* **34**, 11–21.

KARAFYLLIS, I. and DAOUTIDIS, P. (2002), 'Control of Hot Spots in Plug Flow Reactors', *Computers and Chemical Engineering* **26**, 1087–1094.

KAYIHAN, F. (1997), Kappa Number Profile Control for Continuous Digesters, *in* R. Berber and C. Kravaris, eds, 'Nonlinear Model Based Process Control', NATO Advanced Study Institute, Kluwer Academic Publishers, Antalya, Turkey, pp. 805–829.

KAZANTZIS, N. and GOOD, T. (2002), 'Invariant Manifolds and the Calculation of the Long-Term Asymptotic Response of Nonlinear Processes Using Singular PDEs', *Computers and Chemical Engineering* **26**, 999–1012.

KITAMURA, S. and NAGAGIRI, S. (1977), On the Path Integral and Lyapunov Functional for a Class of Distributed Systems, *in* S. Banks and A. Pritchard, eds, 'Proceedings of the Second IFAC Symposium on Control of Distributed Parameter Systems', Coventry, Great Britain, pp. 147–156.

KLATT, K.-U. and ENGELL, S. (1998), 'Gain-Scheduling Trajectory Control of a Continuous Stirred Tank Reactor', *Computers and Chemical Engineering* **22**(4-5), 491–502.

KRAVARIS, C., NIEMEC, M., BERBER, R. and BROSILOW, C. B. (1997), Nonlinear Model-Based Control of Nonmiminum-Phase Processes, *in* R. Berber and

C. Kravaris, eds, 'Nonlinear Model Based Process Control', NATO, Kluwer Academic Publishers, Antalya, Turkey, pp. 115–142.

KRSTIĆ, M. (2000), 'Performance Improvement and Limitations in Extremum Seeking Control', *Systems and Control Letters* **39**(5), 313–326.

KRSTIĆ, M., KANELLAKOPOULOS, I. and KOKOTOVIĆ, P. (1995), *Nonlinear and Adaptive Control Design*, John Wiley and Sons.

KRSTIĆ, M. and WANG, H.-H. (2000), 'Stability of Extremum Seeking Feedback for General Nonlinear Dynamic Systems', *Automatica* **36**(4), 595–601.

LAABISSI, M., ACHHAB, M., WINKIN, J. and DOCHAIN, D. (2001), 'Trajectory Analysis of Nonisothermal Tubular Reactor Nonlinear Models', *Systems and Control Letters* **42**(3), 169–184.

LAPIDUS, L. and FINDER, G. F. (1982), *Numerical Solution of Partial Differential Equations in Science and Engineering*, John Wiley and Sons.

LASIECKA, I. (1995), Control of Systems Governed by Partial Differential Equations : A Historical Perspective, *in* 'Proceedings of the 34th Conference on Decision and Control', New Orleans, LA.

LEVAGGI, L. (2002), 'Infinite Dimensional Systems' Sliding Motions', *European Journal of Control* **8**, 508–516.

LEVENSPIEL, O. (1999), *Chemical Reaction Engineering, 3rd ed.*, John Wiley and Sons, NY.

LIONS, J.-L. (1968), *Contrôle optimal de systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles*, Dunod, Paris.

LIOU, C. T., LIM, H. C. and WEIGAND, W. A. (1974), 'Liapunov Functional Method for Analysis of Nonadiabatic Tubular Reactors with Axial Mixing and Recycle', *Chemical Engineering Science* **29**, 705–711.

LOGEMANN, H. and ILCHMANN, A. (1994), 'An Adaptive Servomechanism for a Class of Infinite-Dimensional Systems', *SIAM Journal on Control and Optimization* **32**(4), 917–936.

LUO, Z.-H., GUO, B.-Z. and MORGUL, O. (1999), *Stability and Stabilization of Infinite Dimensional Systems with Applications*, Springer-Verlag, London.

MANTZARIS, N. and DAOUTIDIS, P. (2004), 'Cell Population Balance Modeling and Control in Continuous Bioreactors', *Journal of Process Control* **14**, 775–784.

MARCOS, N., GUAY, M. and DOCHAIN, D. (2004*a*), 'Adaptive Extremum Seeking Control of a Continuous Stirred Tank Bioreactor with Haldane's Kinetics', *Journal of Process Control* pp. 317–328.

MARCOS, N., GUAY, M. and DOCHAIN, D. (2004*b*), 'Output Feedback Adaptive Extremum Seeking Control of a Continuous Stirred Tank Bioreactor with Monod's Kinetics', *Journal of Process Control* pp. 807–818.

MEERKOV, S. (1967), 'Asymptotic Methods for Investigating a Class of Forced States in Extremal Systems', *Automation and Remote Control* **28**, 1916–1920.

MOCKAITIS, A. P. and ABEL, J. M. (1971), Explicit Synthesis of Lyapunov Functionals for Continuous Systems, *in* 'Proceedings of the IFAC Symposium on Control of Distributed Parameter Systems', Banff, Canada. see discussions.

MOROSANOV, I. (1957), 'Methods of Extremum Control', *Automation and Remote Control* **18**, 1077–1092.

NASH, S. G. and SOFER, A. (1996), *Linear and Nonlinear Programming*, McGraw-Hill.

NEWBERGER, M. R. and KADLEC, R. N. (1971), 'Optimal Operation of a Tubular Chemical Reactor', *AIChE Journal* **17**, 1381–1387.

NIEMEC, M. P. and KRAVARIS, C. (2003), 'Nonlinear Model-State Feedback Control for Nonminimum-Phase Processes', *Automatica* **39**, 1295–1302.

NOCEDAL, J. and WRIGHT, S. J. (1999), *Numerical Optimization*, Springer-Verlag, NY.

ORLOV, Y. (2000), 'Sliding Mode Observer-Based Synthesis of State Derivative-Free Model Reference Adaptive Control of Distributed Parameter Systems', *Journal of Dynamic Systems, Measurement, and Control* **122**, 725–731.

ORLOV, Y. and DOCHAIN, D. (2002), 'Discontinuous Feedback Stabilization of Minimum-Phase Semilinear Infinite-Dimensional Systems with Application to Chemical Tubular Reactor', *IEEE Transactions on Automatic Control* **47**(8), 1293–1304.

OSTROVKII, I. (1957), 'Extremum Regulation', *Automation and Remote Control* **18**, 900–907.

PACZYNSKI, J. (1977), The Functional Analysis Interpretation of Lyapunov Stability, *in* S. Banks and A. Pritchard, eds, 'Proceedings of the Second IFAC Symposium on Control of Distributed Parameter Systems', Coventry, Great Britain, pp. 157–162.

PARULEKAR, S. J., WAGHMARE, R. S. and LIM, H. C. (1988), 'Yield Optimization for Multiple Reactions', *Chemical Engineering Science* **43**(11), 3077–3091.

POLIS, M. P. and GOODSON, R. E. (1976), 'Parameter Identification in Distributed Systems : A Synthesizing Overview', *Proceeding of the IEEE* **64**, 45–61.

POMET, J.-B. and PRALY, L. (1992), 'Adaptive Nonlinear Regulation : Estimation from the Lyapunov Equation', *IEEE Transactions on Automatic Control* **37**, 729–740.

RAY, W. (1978), 'Some Recent Applications of Distributed Parameter Systems Theory – A Survey', *Automatica* **14**, 281–287.

RAY, W. H. (1981), *Advanced Process Control*, McGraw-Hill.

RAY, W. and LAINIOTIS, D. (1978), *Distributed Parameter Systems : Identification, Estimation, and Control*, System and Control Theory, Marcel Dekker, NY. QA 402 D57.

RENOU, S. (2000), *Commande non linéaire d'un système décrit par des équations paraboliques : application au blanchiment*, PhD thesis, Université de Montréal.

ROBERTS, P. (1979), 'An Algorithm for Steady-State Optimization and Parameter Estimation', *International Journal of Systems Science* **10**, 719–734.

ROMICKI, S. (1977), Stability Conditions and Design of Control Using Liapunov-Zubov Functionals, *in* S. Banks and A. Pritchard, eds, 'Proceedings of the Second IFAC Symposium on Control of Distributed Parameter Systems', Coventry, Great Britain, pp. 163–171.

RUSSELL, D. L. (1978), 'Controllability and Stabilizability Theory for Linear Partial Differential Equations : Recent Progress and Open Questions', *SIAM Review* **20**(4), 639–739.

SANNER, R. M. and SLOTINE, J.-J. E. (1992), 'Gaussian Networks for Direct Adaptive Control', *IEEE Transactions on Neural Networks* **3**(6), 837–863.

SESHAGIRI, S. and KHALIL, H. K. (2000), 'Output Feedback Control of Nonlinear Systems Using RBF Neural Networks', *IEEE Transactions on Neural Networks* **11**(1), 69–79.

SIRA-RAMIREZ, H. (1989), 'Distributed Sliding Mode Control in Systems Described by Quasi-Linear Partial Differential Equations', *Systems and Control Letters* **13**, 177–.

SIRAZETDINOV, T. K. (1972), 'Method of Lyapunov Functions in Control Problems for Distributed-Parameter Systems. A Survey.', *Automation and Remote Control (English translation of Avtomatika i Telemekhanika)* **33**(7), 1063–1077.

SMETS, I. Y., DOCHAIN, D. and van IMPE, J. F. (2002), 'Optimal Temperature Control of a Steady-State Exothermic Plug-Flow Reactor', *AIChE Journal* **48**(2), 279–286.

SRINIVASAN, B., BONVIN, D., VISSER, E. and PALANKI, S. (2003), 'Dynamic Optimization of Batch Processes II. Role of Measurements in Handling Uncertainty', *Computers and Chemical Engineering* **27**(1), 27–44.

STERNBY, J. (1980), Extremum Control Systems - An Area for Adaptive Control?, *in* 'Proceedings of the Joint American Control Conference', San-Francisco, CA, USA.

TEEL, A. R. (2000), Lyapunov Methods in Nonsmooth Optimization, Part II : Persistenly Exciting Finite Difference, *in* 'Proceedings of the 39th IEEE Conference on Decision and Control', Sydney, Australia, pp. 118–123.

TEEL, A. R. and POPOVIĆ, D. (2001), Solving Smooth and Nonsmooth Multivariable Extremum Seeking Problems by the Methods of Nonlinear Programming, *in* 'Proceedings of the American Control Conference', Arlington, VA, pp. 2394–2399.

THOMÉE, V. (2001), 'From Finite Differences to Finite Elements. A Short History of Numerical Analysis of Partial Differential Equations', *Journal of Computational and Applied Mathematics* **128**, 1–54.

TITICA, M., DOCHAIN, D. and GUAY, M. (2003), 'Adaptive Extremum-Seeking Control of Fed-Batch Biorectors', *European Journal on Control* **9**, ??

van de VUSSE, J. G. (1964), 'Plug-Plow Type Reactor versus Tank Reactor', *Chemical Engineering Science* **19**, 994–997.

VARMA, A. and ARIS, R. (1977), *Stirred Pots and Empty Tubes*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., chapter 2, pp. 79–155.

VILLERMAUX, J. (1993), *Génie de la réaction chimique*, 2e edn, TEC et DOC - Lavoisier.

WANG, H.-H., KRSTĆ, M. and BASTIN, G. (1999), 'Optimizing Bioreactors by Extremum Seeking', *International Journal of Adaptive Control and Signal Processing* **13**(8), 651–669.

WANG, P. (1964), 'Optimum Control of Distributed Parameter Systems with Time Delays', *IEEE Transactions on Automatic Control* **AC-9**, 13–22.

WANG, P. (1966), 'Asymptoptic Stability of Distributed Parameter Systems with Feedback Controls', *IEEE Transactions on Automatic Control* **AC-11**, 46–54.

WELLSTEAD, P. E. and SCOTSON, P. G. (1990), 'Self-Tuning Extremum Control', *IEE Proceedings D* **137**, 165–175.

WILLIAMS, T. J. and OTTO, R. E. (1960), 'A Generalized Chemical Processing Model for the Investigation of Computer Control', *Transactions of the AIEE Part I : Communications and Electronics* **79**(5), 458–473.

WINKIN, J. J., DOCHAIN, D. and LIGARIUS, P. (2000), 'Dynamical Analysis of Distributed Parameter Tubular Reactors', *Automatica* **36**(3), 349–361.

WITTENMARK, B. and URQUHART, A. (1995), Adaptive Extremal Control, *in* 'Proceedings of the 34th Conference on Decision and Control', New-Orleans, LA, pp. 1639–1644.

WU, H., MORBIDELLI, M. and VARMA, A. (1998), 'Pseudo-Adiabatic Operation and Runaway in Tubular Reactors', *AIChE Journal* **44**(5), 1157–1169.

ZARROP, M. (1994), Self-Tuning Extremum Control with Constraints, *in* 'International Conference on Control', pp. 789–794.

ZARROP, M. and ROMMENS, M. (1993), 'Convergence of a Multi-Input Adaptive Extremum Controller', *IEE Proceedings D* **149**, 65–69.

ZHANG, T. and GUAY, M. (2001), Adaptive Nonlinear Control of Continuously Stirred Tank Reactor Systems, *in* 'Proceedings of the American Control Conference', AACC, AACC, Arlington, VA, USA, pp. 1274–1279.

ZHANG, T. and GUAY, M. (2002), 'Adaptive Parameter Estimation for Microbial Growth Kinetics', *AIChE Journal* **48**(3), 607–616.

ZHANG, T., GUAY, M. and DOCHAIN, D. (2003), 'Adaptive Extremum Seeking Control of Continuous Stirred-Tank Bioreactors', *AIChE Journal* **49**(1), 113–123.

ZUBOV, V. (1964), *Methods of A. M. Lyapunov and their Application*, Groningen.