

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

**IDENTIFICATION DE MODÈLES DYNAMIQUES
DE LA COULEUR D'UN CARTON MULTICOUCHE**

**ANTOINE MONGRAIN
DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL**

**MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE CHIMIQUE)
DÉCEMBRE 2000**



**National Library
of Canada**

**Acquisitions and
Bibliographic Services**

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

**Bibliothèque nationale
du Canada**

**Acquisitions et
services bibliographiques**

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

Your file Votre référence

Our file Notre référence

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

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

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

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

0-612-60906-5

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

**IDENTIFICATION DE MODÈLES DYNAMIQUES
DE LA COULEUR D'UN CARTON MULTICOUCHE**

présenté par: **MONGRAIN Antoine**

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

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

M. **LAFLEUR Pierre**, Ph.D., président

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

M. **BERRADA Mouhsine**, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. **POMERLEAU Yves**, Ph.D., membre

Puisque personne ne dit cela, je vais le dire, moi, je vais le crier. Je suis tellement certain que M. Manet sera un des maîtres de demain, que je croirais conclure une bonne affaire, si j'avais de la fortune, en achetant toutes ses toiles. Dans dix ans, elles se vendront quinze et vingt fois plus cher, et c'est alors que tableaux de quarante mille francs ne vaudront pas quarante francs.

- Émile Zola, *L'Événement*, 7 mai 1886

Mais nous autres hommes, nous sommes ainsi faits: nous nous révoltons, indignés et furieux, contre les maux médiocres, et nous nous courbons en silence sous les maux extrêmes; nous supportons, non pas résignés, mais stupides, le comble de ce que, dans les commencements, nous avions qualifié d'insupportable.

- Alessandro Manzoni, *Les Fiancés* (1823)

Cette tête de l'homme du peuple, cultivez-la, défrichez-la, arrosez-la, fécondez-la, éclairez-la, moralisez-la, utilisez-la; vous n'aurez pas besoin de la couper.

- Victor Hugo, *Claude Gueux* (1834)

All models are wrong, but some are useful.

- George E.P. Box

REMERCIEMENTS

J'aimerais premièrement remercier Michel Perrier d'avoir accepté de me prendre sous son aile comme étudiant à la maîtrise. Ses conseils, son soutien, sa patience et sa grande gentillesse, pendant comme après le travail, ont été très appréciés. Je tiens aussi à remercier mon codirecteur, Mouhsine Berrada, pour ses encouragements et ses efforts afin de m'assurer un financement tout au long du projet, ainsi que Mohammed Elkadiri, notamment pour ses éclaircissements dans la compréhension du procédé papetier.

Je ne voudrais pas oublier les collaborateurs au projet, notamment Marc Champagne, Isabelle Ivanov et Daniel Monette pour les discussions touchant autant le procédé de fabrication du carton que les statistiques multidimensionnelles, et plus encore. Merci aussi à Conrad Paquette, pour l'envoi des données de procédé. De plus, je voudrais remercier Laurent Cabos, pour son aide en début de projet, Carl Duchesne, de l'Université McMaster, pour son coup de main au début de la recherche bibliographique, ainsi que S. Lakshminarayanan pour l'aide qu'il m'a apportée. Ce projet a bénéficié du financement du CRSNG, Tembec et Automatismes Syst-M inc.

Je tiens ensuite à exprimer ma profonde reconnaissance à deux membres fondateurs de l'UR-CPC. Premièrement, à Stéphane Renou, un *chemical brother*, comme il s'en fait peu, autant devant un clavier que sur une piste de dance! Je tiens particulièrement à le remercier pour son support dans certains moments difficiles et pour toutes les bonnes conversations que j'ai eues avec lui, tant sur le plan travail que social. Merci aussi à Jean-François Hamelin, pour son amitié, et pour avoir partagé une année d'implication avec moi. J'ai aussi eu la chance de faire la connaissance de Maria Serra, un trésor de la Catalogne. Finalement, merci à Nancy Harnois, une *late-bloomer* de l'UR-CPC et une bonne voisine de bureau et de quartier. Comment aurais-je découvert la fruiterie P.A. sans elle?

Au cours de la maîtrise, j'ai aussi eu la chance (ou la mauvaise idée..!) de m'impliquer dans la vie étudiante, à l'AÉCSP. J'aimerais donc remercier mes « compagnons d'arme », qui ont fait que cette implication demeure pour moi inoubliable. Un énorme merci à Marie-Josée Boudreau, que j'ai découverte lors de cette implication, et qui s'est avérée être une très belle surprise. Merci pour son amitié à toute épreuve, et son support. Un sincère merci à Richard Giroux, ainsi qu'à Valérie Patreau (celle par qui tout ça a commencé... Je ne t'en veux pas, Val!). Charles Levert, Lionel Rebouillat et Alain Cournoyer ont été la source de nombreuses discussions et Hélène Lafortune fut une adjointe très appréciée, m'ayant fait bénéficier de son expérience et de sa connaissance de nombreux dossiers.

À mes compagnons de bureaux (j'en ai tout de même eu trois!!!), merci pour l'atmosphère qui y régnait, et qui rendait les journées agréables : Sophie, Valérie, Andréas, Gontran, Laurence, Catherine, Cyril et Nicolas, ainsi qu'à quelques comparses du département de génie chimique, Sylvain Lefebvre, Guillaume Hudon, Frédéric Boisselle et Yan Courbariaux.

Je veux aussi remercier mes parents, pour tout ce qu'ils m'ont donné, ainsi que François et Catherine, pour leur bonne humeur ainsi que l'hébergement sur St-Denis. Mes amis en dehors de l'École, Martin, Frédéric, Olivier, Hugo, Nishan, Philippe, Karine, Marianne, Emmanuelle et Benoît, merci de votre amitié, elle m'est bien chère et fut très appréciée au cours de cette période.

Finalement, le support constant de Karine ne saurait être passé sous silence, ainsi que sa compréhension de l'être que je suis.

RÉSUMÉ

La couleur est une propriété importante d'un carton multicouche. L'uniformité de cette caractéristique est cruciale, une trop grande variabilité résultant en une perte de rentabilité pour un imprimeur. Un bon contrôle de cette caractéristique est donc nécessaire. Cependant, malgré plusieurs études et percées dans ce domaine, certaines compagnies papetières adoptent encore une stratégie de contrôle manuelle, par laquelle un opérateur ajuste lui-même des débits de colorants afin de contrer les variations de couleur de la feuille produite. C'est notamment le cas de Temboard, partenaire industriel du projet.

Le carton fabriqué par Temboard est utilisé dans la fabrication de paquets de cigarettes, de cartes d'affaires et d'emballages divers et est fait de deux types de pâte. La couche médiane est la source principale des fluctuations de couleur, étant fabriquée de pâte chimico-thermomécanique blanchie (PCTMB), possédant ainsi un aspect jaunâtre ne pouvant être complètement masqué par les deux couches extérieures. Ce problème est corrigé à l'aide de colorants rouge et bleu ajoutés à la pâte, afin d'atténuer les fluctuations de couleur et de donner un aspect plus blanc au produit final. Or, ces colorants sont ajoutés de façon manuelle, selon l'expérience des opérateurs de l'usine, occasionnant des variations indésirables dans l'aspect du produit final. L'implantation d'un contrôle automatique est donc souhaitée.

Afin d'implanter une stratégie de contrôle efficace, un modèle est nécessaire. Étant donnée la difficulté de développer un modèle analytique pour la couleur, un modèle statistique a été développé, basé sur la variation de données de procédé. La régression PLS a été utilisée afin de développer ce modèle. Des données provenant notamment des débits de pâte des trois couches, des consistances et des débits de couleur ont été utilisées dans le développement de ce modèle. Le modèle ainsi obtenu représente bien les données utilisées pour la modélisation, mais est cependant moins performant pour la

prédiction. De plus, la contribution de certaines variables au modèle sont difficiles à expliquer. Diverses stratégies visant l'amélioration des performances du modèle en prédiction ont été explorées. Les performances sont cependant restées similaires.

ABSTRACT

Colour is an important property of a multiply paperboard. Uniformity is critical, too much variability resulting in profit losses for printers. Good colour control is therefore necessary. However, although many studies have been conducted on the subject, some manufacturing companies still use open loop strategies to control colour fluctuations. It is notably the case of Temboard, the project's industrial partner.

Temboard's cardboard is used in the manufacturing of various packaging and commodities (cigarette packs, business cards) and is made of two types of pulp. The middle ply is made of bleached chemithermomechanical pulp (BCTMP) and is the main source of colour fluctuations, having a yellowish hue. This variability cannot be reduced by the top and back plies. Therefore, red and blue dyes are added to the furnish pulp in order to maintain colour specifications within acceptable operating limits. However, these dyes are added empirically, based on the operator's knowledge of the process and significant variability still prevails. Automatic control is thus desired.

In order to implement a good control strategy, a model must be available. Since developing a model base on first principles is not an easy task when dealing with colour, a statistical model was obtained, based on industrial data, using PLS regression. Data available from pulp flows, consistencies and dyes flows, among others, were used in this model. This model is able to accurately represent the data used for modeling, but shown problems in predicting new data. Modifications were made to improved prediction, but performances remained unchanged.

TABLE DES MATIÈRES

CITATIONS.....	IV
REMERCIEMENTS.....	V
RÉSUMÉ.....	VII
ABSTRACT.....	IX
TABLE DES MATIÈRES.....	X
LISTE DES TABLEAUX.....	XII
LISTE DES FIGURES.....	XIII
LISTE DES ANNEXES.....	XV
LISTE DES SIGLES ET DES ABRÉVIATIONS.....	XVI
I - INTRODUCTION	1
1.1 - PROBLÉMATIQUE	1
1.2 - OBJECTIFS.....	2
1.3 - PROCÉDÉ TEMBOARD.....	2
1.4 - LA COULEUR	3
1.4.1 - Facteur de réflectance spectrale	4
1.4.2 - Courbe spectrale d'un illuminant ou d'une source.....	5
1.4.3 - Colorimétrie.....	6
1.4.4 - Espaces couleur.....	7
1.4.5 - Appareils commerciaux	11
1.5 - VARIABLES INFLUENTES SUR LA COULEUR.....	11
II - REVUE DE LITTÉRATURE ET THÉORIE.....	15
2.1 - REVUE DE LITTÉRATURE	15
2.2 - ANALYSE EN COMPOSANTES PRINCIPALES (PCA).....	17
2.2.1 - Interprétation géométrique	19

2.2.2 - Algorithme NIPALS.....	20
2.3 - PROJECTION SUR STRUCTURES LATENTES (PLS).....	20
2.3.1 - Contexte.....	20
2.3.2 - Algorithme NIPALS.....	22
2.3.3 - Coefficient de détermination multiple R^2	24
2.3.4 - Validation croisée.....	25
2.3.5 - Interprétation du modèle.....	26
2.3.6 - Statistiques T^2 et SPE.....	27
2.4 - PROJECTION SUR STRUCTURES LATENTES - MÉTHODE DYNAMIQUE.....	28
2.4.1 - Exemple d'application.....	30
III - RÉSULTATS.....	36
3.1 - MÉTHODOLOGIE.....	36
3.2 - TRAITEMENT DE DONNÉES.....	37
3.3 - CONNAISSANCE DYNAMIQUE DU PROCÉDÉ.....	39
3.2.1 - Autocorrélation.....	39
3.3.2 - Intercorrélation.....	45
3.3.3 - Fonctions de transfert.....	48
3.4 - MODÉLISATION ET IDENTIFICATION PLS.....	51
3.4.1 - Modélisation statique.....	52
3.4.2 - Modélisation PLS auto-régressive.....	63
3.4.3 - Régression PLS dynamique.....	68
IV - CONCLUSION.....	75
RÉFÉRENCES.....	78
ANNEXES.....	83

LISTE DES TABLEAUX

TABLEAU 2.1	SOMME DES CARRÉS EXPLIQUÉE - MODÈLE PLS DYNAMIQUE, COLONNE WOOD & BERRY	32
TABLEAU 3.1	VARIABLES DE PROCÉDÉ DISPONIBLES	38
TABLEAU 3.2	GAINS DE PROCÉDÉS, AUTRES GRADES	51
TABLEAU 3.2	RÉSULTATS DE MODÉLISATION, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES, RÉGRESSION PLS STATIQUE	53
TABLEAU 3.3	RÉSULTATS DE MODÉLISATION, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES, RÉGRESSION PLS AUTO- RÉGRESSIVE	64

LISTE DES FIGURES

FIGURE 1.1 PROCÉDÉ DE FABRICATION DE CARTON DE TEMBOARD (IVANOV, 2000B)	3
FIGURE 1.2 SPECTRE DE RÉFLECTANCE D'UN CITRON (MINOLTA, 1994)	4
FIGURE 1.3 ÉNERGIE SPECTRALE RELATIVE DE CERTAINS ILLUMINANTS (D'APRÈS JUDD ET WYSZECKI, 1975)	6
FIGURE 1.4 FONCTIONS COLORIMÉTRIQUES (D'APRÈS JUDD ET WYSZECKI 1975)	7
FIGURE 1.5 ESPACE COULEUR MUNSELL (X-RITE, 1990)	8
FIGURE 1.6 ESPACE CIE 1931 x,y (MINOLTA, 1994)	9
FIGURE 1.7 ESPACE HUNTER L,A,B (POPSON <i>ET AL.</i> , 1996)	10
FIGURE 2.1 REPRÉSENTATION GÉOMÉTRIQUE DE L'ANALYSE EN COMPOSANTES PRINCIPALES	19
FIGURE 2.2 PRÉDICTION À L'AIDE DE LA RÉGRESSION PLS DYNAMIQUE	30
FIGURE 2.3 SIGNAUX D'ENTRÉE ET RÉPONSES, COLONNE WOOD & BERRY	31
FIGURE 2.4 RÉPONSE DYNAMIQUE ET MODÉLISATION PLS DYNAMIQUE, COLONNE WOOD & BERRY (2 VARIABLES LATENTES)	32
FIGURE 2.5 SCORES DE LA PREMIÈRE DIMENSION, COLONNE WOOD & BERRY	33
FIGURE 2.6 SCORES DE LA DEUXIÈME DIMENSION, COLONNE WOOD & BERRY	33
FIGURE 2.7 RÉPONSE DYNAMIQUE ET MODÉLISATION PLS DYNAMIQUE, COLONNE WOOD & BERRY (1 VARIABLE LATENTE)	34
FIGURE 2.8 SIGNAUX D'ENTRÉE ET RECONSTITUTION A L'AIDE DU MODÈLE PLS (1 VARIABLE LATENTE)	35
FIGURE 3.1 FONCTION D'AUTOCORRÉLATION DE LA LUMINANCE ET DU PARAMÈTRE A, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES	40
FIGURE 3.2 FONCTION D'AUTOCORRÉLATION DU PARAMÈTRE B ET DE LA BLANCHEUR, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES	41
FIGURE 3.3 FONCTION D'AUTOCORRÉLATION DE ∇L ET ∇A , PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES	42
FIGURE 3.4 FONCTION D'AUTOCORRÉLATION DE ∇B ET $\nabla \text{BLANCHEUR}$, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES	42
FIGURE 3.5 FONCTION D'AUTOCORRÉLATION DE LA LUMINANCE ET DU PARAMÈTRE A, DEUXIÈME SÉRIE DE DONNÉES	43
FIGURE 3.6 FONCTION D'AUTOCORRÉLATION DE LA LUMINANCE ET DU PARAMÈTRE A, DEUXIÈME SÉRIE DE DONNÉES	43
FIGURE 3.7 FONCTION D'AUTOCORRÉLATION DE ∇L ET ∇A , DEUXIÈME SÉRIE DE DONNÉES	44
FIGURE 3.8 FONCTION D'AUTOCORRÉLATION DE ∇B ET $\nabla \text{BLANCHEUR}$, DEUXIÈME SÉRIE DE DONNÉES	44
FIGURE 3.9 INTERCORRÉLATIONS ENTRE LE DÉBIT DE ROUGE ET LES PARAMÈTRES A ET B, GRADE 212 ...	46
FIGURE 3.10 INTERCORRÉLATIONS ENTRE LE DÉBIT DE BLEU ET LES PARAMÈTRES A ET B, GRADE 212	47

FIGURE 3.11 RÉPONSE DES PARAMÈTRES A ET B À UN ÉCHELON DU DÉBIT DE COLORANT BLEU	48
FIGURE 3.12 RÉPONSE DES PARAMÈTRES A ET B À UN ÉCHELON DU DÉBIT DE COLORANT ROUGE	49
FIGURE 3.13 SCORES DES 4 PREMIÈRES DIMENSIONS, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES	53
FIGURE 3.14 INDICES SPE_x ET SPE_y , PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES	54
FIGURE 3.15 CHARTE DE CORRÉLATION DES VARIABLES LATENTES 1 ET 2, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES	57
FIGURE 3.16 CHARTE DE CORRÉLATION DES VARIABLES LATENTES 3 ET 4, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES	57
FIGURE 3.17 VARIANCE DE X EXPLIQUÉE PAR 4 VARIABLES LATENTES, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES	58
FIGURE 3.18 VARIANCE DE Y EXPLIQUÉE PAR 4 VARIABLES LATENTES, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES	58
FIGURE 3.19 INDICES VIP, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES	59
FIGURE 3.20 PRÉDICTION DES DONNÉES D'ÉTALONNAGE, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES	60
FIGURE 3.21 PRÉDICTION DE LA DEUXIÈME SÉRIE DE DONNÉES AVEC PARAMÈTRES DU PREMIER MODÈLE	61
FIGURE 3.22 INDICES SPE_x ET T^2 EN PRÉDICTION, DEUXIÈME SÉRIE DE DONNÉES	62
FIGURE 3.23 PRÉDICTION DE LA PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES, AVEC PARAMÈTRES DU DEUXIÈME MODÈLE (GRIS : DONNÉES, NOIR : MODÈLE)	63
FIGURE 3.24 CHARTE DE CORRÉLATION DES VARIABLES LATENTES 1 ET 2, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES	65
FIGURE 3.25 CHARTE DE CORRÉLATION DES VARIABLES LATENTES 3 ET 4, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES	65
FIGURE 3.26 INDICES VIP, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES, RÉGRESSION PLS AUTO-RÉGRESSIVE	66
FIGURE 3.27 PRÉDICTION DES DONNÉES D'ÉTALONNAGE, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES, RÉGRESSION PLS AUTO-RÉGRESSIVE (GRIS : DONNÉES, NOIR : MODÈLE)	67
FIGURE 3.28 PRÉDICTION DES DONNÉES DE LA DEUXIÈME SÉRIE AVEC PARAMÈTRES DU PREMIER MODÈLE, RÉGRESSION PLS AUTO-RÉGRESSIVE (GRIS : DONNÉES, NOIR : MODÈLE)	67
FIGURE 3.29 DIFFÉRENCE ENTRE LES SCORES U BRUTS ET LES SCORES U OBTENUS DE LA FONCTION DE TRANSFERT INTERNE, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES, PREMIÈRE VARIABLE LATENTE	73
FIGURE 3.30 CHARTE DE CORRÉLATION, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES, RÉGRESSION PLS DYNAMIQUE	73
FIGURE 3.31 CHARTE DE CORRÉLATION, PREMIÈRE SÉRIE DE DONNÉES, RÉGRESSION PLS DYNAMIQUE	74

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE I - RÉSULTATS COMPLÉMENTAIRES.....83

ANNEXE II - PUBLICATION.....92

LISTE DES SIGLES ET DES ABRÉVIATIONS

a	= paramètre de couleur vert-rouge
b	= paramètre de couleur bleu-jaune
	= coefficient de régression interne entre les scores t et u
b	= matrice de coefficients de régression interne entre les scores t et u
B	= matrice diagonale, composée des coefficients de b
d	= longueur des axes de l'ellipse de Hotelling
E	= écart de couleur
E	= matrice des résidus de la matrice X
F	= matrice des résidus de la matrice Y
G(z)	= matrice diagonale de fonctions de transfert internes
k	= période de décalage des données
L	= luminance
n	= nombre de données
p	= nombre de variables de X
p	= vecteur de loadings de X
P	= matrice de loadings de X
q	= nombre de variables de Y
q	= vecteur des loadings de Y
Q	= matrice des loadings de Y
Q²	= coefficient de validation croisée
r_{xx}(k)	= autocorrélation
r_{xy}(k)	= intercorrélacion
R(λ)	= réflectance spectrale d'un objet
R²	= coefficient de détermination multiple
s	= écart-type
s²	= variance
S(λ)	= distribution spectrale d'une source lumineuse

t	= vecteur de scores de la matrice X
T	= matrice de scores de la matrice X
T²	= statistique de Hotelling
u	= vecteur de scores de Y
U	= matrice de scores de Y
v	= nombre de décalages significatifs de l'intercorrélation
w	= vecteur de loadings de prédiction de X et de ses résidus
W	= matrice de loadings de prédiction de X et de ses résidus
w*	= vecteur de loadings de prédiction de X
W*	= matrice de loadings de prédiction de X
x	= variable de procédé de la matrice X
$\bar{x}$	= fonction colorimétrique
X	= mesure de couleur
X	= matrice de données des variables de procédé ($n \times p$)
$\bar{y}$	= fonction colorimétrique
Y	= mesure de couleur
Y	= matrice de variables de qualité ($n \times q$)
$\bar{z}$	= fonction colorimétrique
Z	= mesure de couleur

Lettres grecques

α	= niveau de confiance pour test d'hypothèse
β	= matrice de coefficients de régression
Δ	= différence
λ	= longueur d'onde
θ	= coefficient de régression pseudo-orthogonalisée

Exposants

T = opérateur de transposition d'une matrice

Indices

a = nombre de variable latentes significatives

h = numéro ou nombre de variable latente (inférieur à a)

x = variable d'entrée

y = variable de sortie

Abréviations

AKD = Alkyl Ketene Dimer

CIE = Commission Internationale de l'Éclairage

NIR = Near Infrared

PCA = Analyse en composantes principales

PCR = Régression sur composantes principales

PCTMB = Pâte chimico-thermomécanique blanchie

PLS = Projection sur structures latentes

Rd = Redondance

RSS = Somme des carrés des résidus

SPE = Carré de l'erreur de prédiction

SS = Somme des carrés

VIP = Influence de la variable dans la projection sur Y

I - INTRODUCTION

1.1 - PROBLÉMATIQUE

La couleur est une propriété importante d'un carton multicouche. L'uniformité de cette caractéristique a un effet sur la perception de la qualité globale du carton produit. En effet, la couleur est la première chose sur laquelle nous sommes renseignés et on imagine difficilement comment un carton peut avoir des propriétés physiques uniformes si la variation de couleur est trop grande. De plus, une grande variabilité de la couleur oblige un imprimeur à réajuster fréquemment son procédé d'impression, résultant en une perte de temps et de rentabilité, incitant ainsi ce dernier à changer de fournisseur. Un bon contrôle est donc crucial afin de réduire la variabilité de cette caractéristique.

Le contrôle de la couleur a déjà été étudié dans le passé, notamment par Bélanger (1969), Chao et Wickstrom (1970) et Vincent *et al.* (1974). Cette problématique est toujours présente, comme en font foi de récentes études (Vincent *et al.*, 1992; Shakespeare et Shakespeare, 1998; Masmoudi, 1999). Malgré ces études et les percées dans ce domaine, certaines compagnies adoptent encore une stratégie de contrôle manuelle, par laquelle un opérateur ajuste lui-même le débit des colorants afin de contrer les variations de couleur. C'est notamment le cas de Temboard, partenaire industriel du projet.

Le carton fabriqué par Temboard est utilisé dans la fabrication de paquets de cigarettes, de cartes d'affaires et d'emballages divers. Ce carton est fait à partir de deux types de pâte. Les couches inférieure et supérieure sont fabriquées de pâte kraft, aux propriétés bien contrôlées. La couche médiane, source principale des fluctuations de couleur, est quant à elle fabriquée de pâte chimico-thermomécanique blanchie (PCTMB). Ce type de pâte contient une part appréciable de lignine résiduelle, d'où la couleur jaunâtre de

la couche médiane. De plus, les couches inférieures et supérieures ne masquent pas complètement les variations de couleur de la couche médiane. Afin de contrer ce problème, des colorants rouge et bleu sont ajoutés, afin de corriger les fluctuations de couleur et de donner un aspect plus blanc au produit final. Or, ces colorants sont ajoutés de façon manuelle, selon l'expérience des opérateurs de l'usine, occasionnant des variations indésirables dans l'aspect du produit final. L'implantation d'un contrôle automatique est donc souhaitée.

1.2 - OBJECTIFS

Afin de réduire la variabilité dans la couleur du produit, une stratégie de contrôle doit être implantée. Cette stratégie se basera sur un modèle. Or, dans le cas de la couleur, il est difficile d'obtenir un modèle théorique, basé sur des phénomènes physiques. Le modèle développé sera donc basé sur des méthodes statistiques multidimensionnelles, à l'aide de données provenant d'un procédé de fabrication de carton multicouche. Plus particulièrement, la régression PLS dynamique sera utilisée. L'objectif de ce projet est donc :

- obtenir un modèle dynamique de la couleur

Suite au développement de ce modèle, un contrôleur sera développé par une firme externe (Automatismes Syt-M inc.).

1.3 - PROCÉDÉ TEMBOARD

Le procédé de fabrication du carton Temboard (Cabos, 1998; Ivanov, 2000b) est illustré à la figure 1.1. La pâte CTMB est produite sur le site de Tembec, à l'usine Temcell. La pâte kraft est quant à elle présente en forme de balle et diluée à consistance désirée. De plus, divers produits chimiques sont ajoutés à la pâte, afin de

lui conférer les propriétés désirées. Ces deux types de pâte sont acheminés à la machine à papier de Temboard, de type fourdrinier triple. La pâte de la couche inférieure est premièrement distribuée sur la table plate, suivi de la couche médiane et supérieure. Le carton passe dans une section de presses afin d'enlever une partie de l'eau et est ensuite acheminé à une section de séchage. Finalement, le carton est calandré et est ensuite enduit de sauce de couchage, à l'aide de trois coucheuses, répondant ainsi aux besoins spécifiques des imprimeurs. Deux coucheuses peuvent traiter la couche supérieure et une traite la couche inférieure du carton.

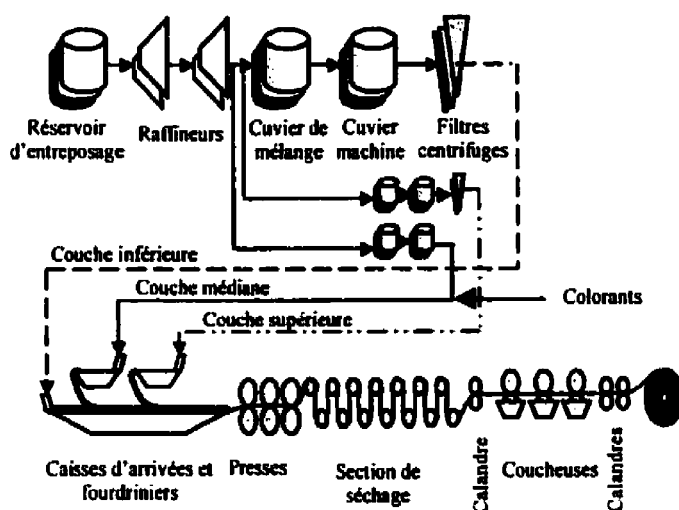


Figure 1.1 Procédé de fabrication de carton de Temboard (Ivanov, 2000b)

1.4 - LA COULEUR

La couleur est le résultat d'une perception sensorielle de ce qui nous entoure, constituée de trois éléments : un objet, une source lumineuse et un observateur. Certains de ces éléments peuvent influencer la couleur perçue, en plus de facteurs psychologiques (Popson *et al.*, 1996). Premièrement, la source d'éclairage influencera la couleur, selon sa distribution spectrale. Ensuite, la condition de l'œil de l'observateur, ainsi que son âge, ont un rôle sur la perception. En effet, de 7% à 10% des hommes et 0,5% des femmes sont daltoniens, alors que l'âge a pour effet de jaunir les couleurs. De plus,

l'entourage d'un objet, sa taille, la proximité avec un autre objet du même type ainsi que le temps d'observation (occasionnant la persistance rétinienne) sont autant de facteurs influençant la couleur. Finalement, au niveau des écarts de couleur, l'humeur a un rôle sur le seuil d'acceptabilité. Il est donc nécessaire de mesurer la couleur à l'aide d'un système objectif, de façon à pouvoir s'assurer que le carton produit est de couleur uniforme ou, dans le cas contraire, d'y remédier ou de remettre en pâte le carton plutôt que de le vendre à un client.

1.4.1 - Facteur de réflectance spectrale

Le premier élément du triplet de la couleur est un objet à observer. La lumière incidente sera absorbée ou réfléchiée par ce objet, ce qui peut être caractérisé par une courbe spectrophotométrique. Cette courbe est le tracé de la fraction réfléchiée de l'énergie incidente en fonction de la longueur d'onde, dans le domaine visible (380 à 780 nm). Cette caractéristique des objets peut être mesurée par un spectrophotomètre, qui compare la réflectance de l'objet en question à celle d'un diffuseur parfait. L'interprétation de cette courbe n'est cependant pas chose facile, comme on peut le montre la figure 1.2, présentant la courbe de réflectance spectrale d'un citron. Il est en effet surprenant de voir qu'une quantité importante de rouge soit réfléchiée.

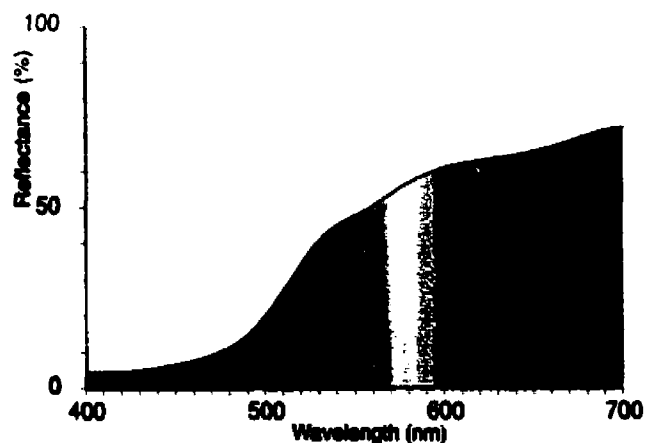


Figure 1.2 Spectre de réflectance d'un citron (Minolta, 1994)

1.4.2 - Courbe spectrale d'un illuminant ou d'une source

Le second élément du triplet de la couleur est une source de lumière. Une source lumineuse est un émetteur physique de lumière, par exemple, une ampoule à filament de tungstène, un néon ou le soleil. Un objet observé à l'aide de l'une ou l'autre ces sources peut avoir une couleur différente, étant donnée une distribution spectrale caractéristique à chacune. C'est pourquoi l'utilisation d'illuminants est nécessaire, afin d'avoir des sources « normalisées ». Un illuminant n'est pas une source physique, mais une distribution spectrale se rapprochant d'une source connue et est utile dans la formulation des couleurs, dépendant des lieux et des conditions d'utilisation d'un produit. Il existe plusieurs illuminants, les plus communs étant ceux de type A, C, D et F (Figure 1.3). L'illuminant A représente une ampoule incandescente, ayant une température corrélée de 2855.6 °K. Les illuminant C et D représentent la lumière du jour, déterminée à l'aide de plusieurs mesures prise de par le monde, à différentes périodes de l'année. L'illuminant F se rapproche quant à lui de la lumière émise par une lampe fluorescente. On peut donc voir qu'une feuille de papier éclairée à partir d'une ampoule de tungstène pourra avoir une teinte rosée, alors qu'elle aura une teinte bleutée si regardée à la lumière du jour (Popson *et al.*, 1996).

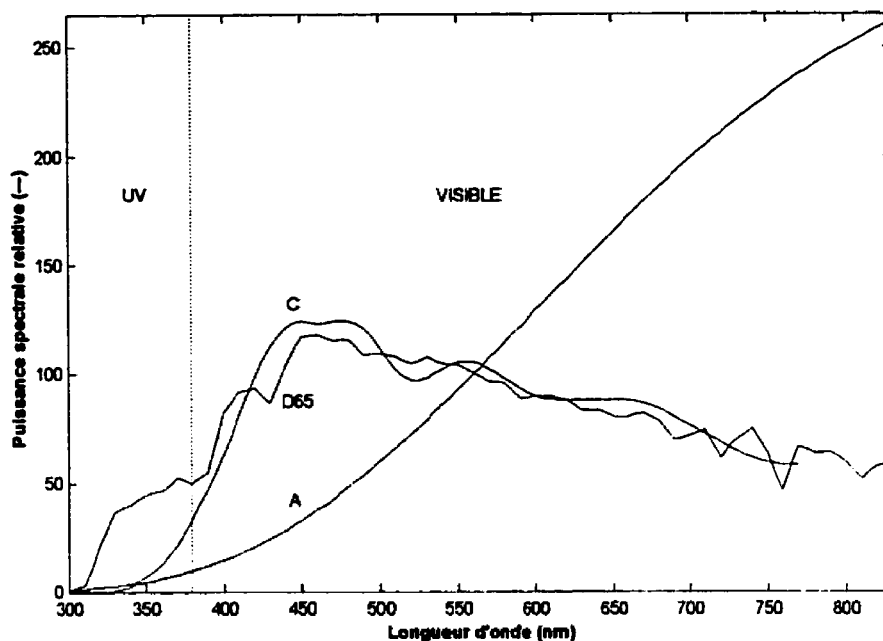


Figure 1.3 Énergie spectrale relative de certains illuminants (d'après Judd et Wyszecki, 1975)

1.4.3 - Colorimétrie

Le dernier élément du triplet de la couleur est l'observateur, l'œil, modélisé à l'aide de la colorimétrie. Celle-ci est basée sur la théorie des trois composantes, stipulant que l'œil possède des récepteurs percevant trois couleurs primaires (rouge, vert et bleu) et que les couleurs perçues sont un mélange de ces trois couleurs (Minolta, 1994). Cette science est à la base de la représentation de la couleur à l'aide d'espaces. Les sensibilités des récepteurs de l'œil ont été reproduites en déterminant expérimentalement des courbes de sensibilité appelées fonctions colorimétriques. Ces fonctions colorimétriques ont été déterminées en utilisant un faisceau monochrome et en essayant de le reproduire en ajustant l'intensité relative de trois faisceaux, rouge (595 nm), vert (557 nm) et bleu (455 nm). Elles représentent, après transformation linéaire, l'intensité de chaque faisceau nécessaire à l'obtention du faisceau témoin (Popson *et al.*, 1996) et reproduisent la perception qu'a l'œil des couleurs qu'il voit.

Ces fonctions $\bar{x}$, $\bar{y}$, et $\bar{z}$, représentent respectivement le rouge, le vert et le bleu (Figure 1.4).

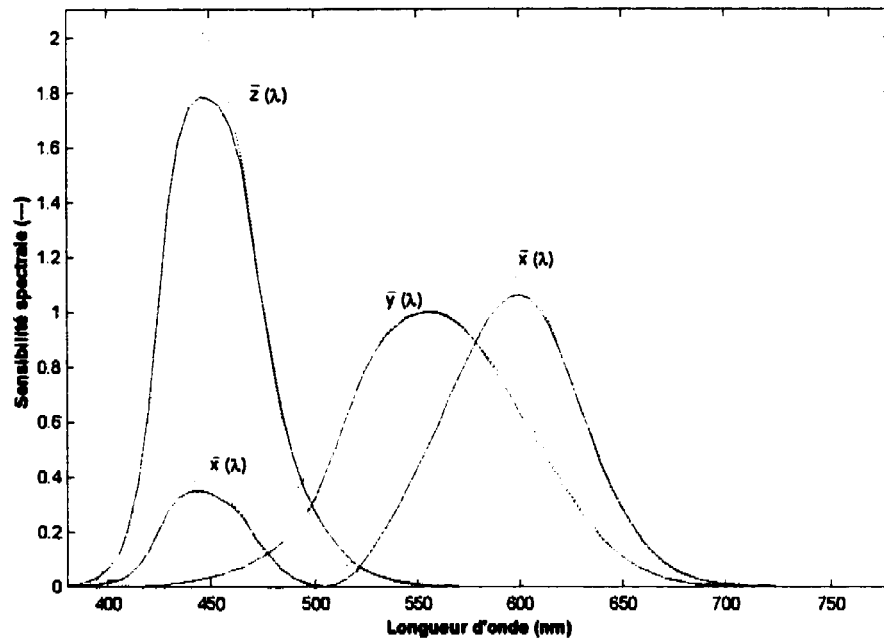


Figure 1.4 Fonctions colorimétriques (d'après Judd et Wyszecki 1975)

1.4.4 - Espaces couleur

La couleur étant une perception influencée par plusieurs facteurs, l'établissement de systèmes de coordonnées est nécessaire afin de la quantifier. Le premier effort en ce sens a été effectué par l'artiste A.H. Munsell en 1905. Dans cet espace, les couleurs sont caractérisées par leur teinte, luminance et saturation (Figure 1.5) et sont exprimées selon la nomenclature H V/C (H = *hue* (teinte), V = *Munsell value* (luminance), C = *chroma* (saturation)).



Figure 1.5 Espace couleur Munsell (X-Rite, 1990)

Plus tard, le besoin d'avoir des espaces de couleurs numériques est apparu, notamment pour le contrôle de la qualité. Les mesures suivantes ont donc été proposées :

$$X = K \int_{380}^{780} S(\lambda) \bar{x}(\lambda) R(\lambda) d\lambda$$

$$Y = K \int_{380}^{780} S(\lambda) \bar{y}(\lambda) R(\lambda) d\lambda$$

$$Z = K \int_{380}^{780} S(\lambda) \bar{z}(\lambda) R(\lambda) d\lambda$$

$$K = \frac{100}{\int_{380}^{780} S(\lambda) \bar{y}(\lambda) d\lambda}$$

Ces équations représentent la sommation du produit des éléments du triplet de la couleur, soit la distribution spectrale d'une source lumineuse $S(\lambda)$, les fonctions colorimétriques ($\bar{x}$, $\bar{y}$ et $\bar{z}$) et la réflectance spectrale $R(\lambda)$ d'un objet. L'interprétation des mesures X, Y, Z n'étant cependant pas très intuitive, la Commission Internationale de l'Éclairage (CIE) a conçu le premier espace couleur numérique

en 1931, soit le diagramme de chromaticité CIE 1931 x, y (Figure 1.6). Les couleurs sont exprimées selon le triplet Y, x, y . Y représente la réflectance spectrale (%) et

$$x = \frac{X}{X+Y+Z} \quad \text{et} \quad y = \frac{Y}{X+Y+Z}$$

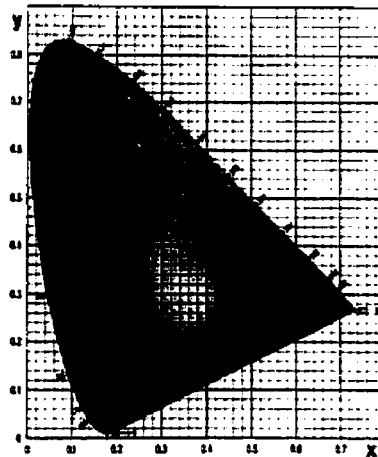


Figure 1.6 Espace CIE 1931 x, y (Minolta, 1994)

Cependant, plusieurs industries ont besoin d'espaces permettant de mesurer les écarts de couleur en combinant une différence de luminance et de saturation (Wyszecki et Stiles, 1967). De plus, les écarts numériques du diagramme CIE 1931 x, y ne correspondent aux mêmes écarts de perception. Ceci a mené à la création de l'espace Hunter L, a, b en 1948 (Figure 1.7). Cet espace tridimensionnel, basé sur le principe des couleurs antagonistes, est utilisé par Temboard. Le paramètre L est celui de la luminance, le paramètre a indique la teinte rouge-verte et le paramètre b indique la teinte bleu-jaune, exprimés comme suit (Popson *et al.*, 1996) :

$$L = 100 \sqrt{Y/Y_0}$$

$$a = \frac{K a (X/X_0 - Y/Y_0)}{\sqrt{Y/Y_0}}$$

$$b = \frac{K_b(X/X_o - Z/Z_o)}{\sqrt{Y/Y_o}}$$

ou X_o , Y_o , Z_o , K_a et K_b sont des constantes dépendant de la source lumineuse et de la façon qu'est observé l'objet.

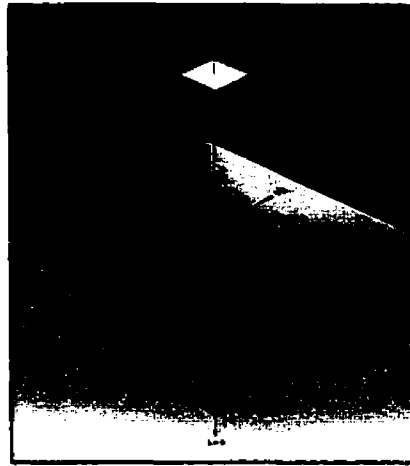


Figure 1.7 Espace Hunter L,a,b (Popson *et al.*, 1996)

À noter que d'autres espaces couleur existent, propres à certaines industries (CIE $L^*a^*b^*$, CIE L^*C^*h et CIE $L^*u^*v^*$). Les écarts de tolérance dans l'espace Hunter L,a,b sont donnés comme suit :

$$\Delta E = \sqrt{\Delta L^2 + \Delta a^2 + \Delta b^2}$$

Il est à souligner que la motivation principale de cet espace couleur est d'avoir un ΔE unitaire identique dans chaque région de l'espace. Or, cet objectif est rarement atteignable, rendant ainsi l'utilisation d'écarts de tolérance basés sur ΔE peu recommandable. Des écarts de tolérance sur chaque mesure individuelle sont dans ce cas souhaitable (Popson *et al.*, 1996), tel qu'en vigueur chez Temboard. D'autres méthodes sont aussi en vigueur, notamment l'utilisation d'ellipses tridimensionnelles définies par la saturation, la teinte et la luminance. Ces ellipses sont ajustées à l'aide

d'un ratio luminance/saturation et d'un facteur commercial d'acceptabilité, et sont très utilisées dans le milieu du textile.

1.4.5 - Appareils commerciaux

Deux appareils sont disponibles commercialement pour la mesure de la couleur. Le premier est le colorimètre, un appareil de mesure surtout utilisé en contrôle de qualité, afin de s'assurer que les écarts de tolérance sont respectés. La source utilisée est une source de quartz-tungstène, représentant assez fidèlement l'illuminant C. Les récepteurs filtrent la couleur selon les fonctions de sensibilités spectrales rendant impossible la prédiction du métamérisme (variation de la couleur due à la source lumineuse). On peut choisir l'espace dans lequel sera exprimée la couleur.

Le second est le spectrophotomètre avec lequel est obtenue une courbe de réflectance spectrale. C'est ce type d'appareil qui est utilisé par Temboard. La source de lumière utilisée est une source de xénon, filtrée adéquatement pour représenter les illuminants C ou D₆₅. À l'aide de cet appareil, on peut obtenir des mesures de couleur selon plusieurs espaces. De plus, il est possible de calculer des paramètres de couleur selon plusieurs illuminants à l'aide de transformations mathématiques, permettant ainsi de prédire le métamérisme. Le spectrophotomètre est normalement utilisé dans la formulation de couleurs, notamment pour des encres ou teintures.

1.5 - VARIABLES INFLUENTES SUR LA COULEUR

Plusieurs variables de procédé peuvent influencer la couleur d'un carton. Dans une étude antérieure, les variables influençant la couleur de la couche médiane du carton trois couches produit par Temboard ont été identifiées (Cabos, 1998). Cette étude a été menée à l'aide d'un plan statistique factoriel de niveau IV, comprenant huit facteurs et deux modalités. Les facteurs ont été déterminés à l'aide des ingénieurs de procédés de

l'usine Temboard, en considérant ce qui varie significativement d'un grade à l'autre, ou pouvant potentiellement avoir une influence sur la couleur. Ce plan permettait de distinguer tous les effets principaux. Les huit facteurs considérés étaient :

1. **Qualité des fibres (pâte en balle vs pâte fraîche) :** La PCTMB est disponible sous forme fraîche, ou en balle, lorsque la première ne possède pas les caractéristiques désirables.
2. **Degré de raffinage :** Les cartons produits par Temboard peuvent être classés en deux grandes catégories, soit les cartons couchés et les cartons de couverture (*linerboard*). La principale différence entre ces deux catégories de carton est le degré de raffinage, la carton couché étant raffiné davantage que le carton de couverture.
3. **Composition de la pâte :** La composition de la pâte est partagée par la PCTMB, de la pâte recirculée et de la pâte multifibre (mélange de pâte CTMB et recirculée).
4. **Amidon cationique :** Agent de liaison permettant de renforcer les liaisons entre les fibres, augmentant ainsi les propriétés mécaniques du carton (éclatement, longueur de rupture, cohésion interne, rigidité).
5. **AKD :** L'AKD (*Alkyl Ketene Dimer*) est un agent d'encollage, permettant d'améliorer les qualités hydrophobes du carton.
6. **Percol :** Polymère neutralisant les charges anioniques à la surface des fibres et des additifs. Il facilite le rapprochement des fibres entre elles et des fibres avec les additifs. Ce polymère entraîne la formation d'amas de fibres et d'additifs.

7. **Bentonite** : Polymère amphotère, possédant deux charges à sa surface. Il permet de structurer les floccs entre eux, améliorant ainsi la rétention des fibres.
8. **Alcofix** : Agent coagulant cationique, neutralisant les colloïdes anioniques, améliorant ainsi l'efficacité des autres agents de rétention.

Les modalités des facteurs étaient comprises à l'intérieur des plages d'opération du procédé. Les résultats de ce plan fractionnaire ont permis d'isoler quatre facteurs influençant significativement la couleur et le blancheur, soient la concentration en amidon cationique, en Alcofix, en AKD et la composition de la pâte (fraction de PCTMB). L'influence de ces facteurs sur les paramètres de couleur et la blancheur étaient la suivante :

- **Blancheur** : Les quatre facteurs avaient une influence sur la blancheur, la composition de la pâte ayant le plus grand impact. Une augmentation de 20% du contenu de la PCTMB résulte en un gain de deux points de la blancheur. Les trois autres variables ont une influence négative, la plus grande des trois étant celle de l'Alcofix.
- **Luminance** : L'effet des quatre variables sur la luminance est semblable à celui de la blancheur, mais moins prononcé. Le facteur dominant est toujours la composition de la pâte.
- **Paramètre a** : Dans le cas du paramètre de couleur *a*, le seul facteur influençant significativement ce facteur est la composition de la pâte, une augmentation du contenu de PCTMB donnant une teinte plus verte à la couche médiane.
- **Paramètre b** : Dans le cas du paramètre *b*, une augmentation de l'un ou l'autre des quatre facteurs accentue la teinte jaune de la couche médiane.

Ce travail a finalement permis de démontrer que l'addition d'un colorant bleu était un moyen efficace de corriger les variations de couleur. Une corrélation a aussi été développée afin d'estimer la rétention du colorant bleu. Le développement de cette corrélation a mené à la conclusion que la rétention du colorant augmentait de paire avec la concentration de ce dernier ainsi qu'avec la rétention des fibres.

II - REVUE DE LITTÉRATURE ET THÉORIE

2.1 - REVUE DE LITTÉRATURE

De nos jours, les usines sont équipées d'ordinateurs et de systèmes d'archivage de données recueillant à intervalles réguliers une foule d'information relatives aux diverses variables de procédé. Il est cependant difficile de s'y retrouver parmi toute cette information et de l'analyser convenablement. Traditionnellement, les données de qualité sont affichées sur des chartes de contrôle, en considérant que les variables ne sont pas corrélées, ce qui est rarement le cas. En effet, plusieurs des variables de qualité d'un produit peuvent être corrélées, corrélations pouvant être issues de relations physiques connues ou non. Traiter ces variables comme si elles étaient indépendantes peut dans ce cas mener à de mauvais diagnostics sur le produit final (Kourti et MacGregor, 1995). Cette pratique est malheureusement courante dans plusieurs industries, bien que de puissantes méthodes d'analyse existent, notamment les statistiques multidimensionnelles. De plus, en ne tenant compte que des variables de qualité, l'information contenue dans les variables de procédé est mise de côté. Or cette information peut être très utile afin d'obtenir un modèle prédictif des propriétés d'un produit. En effet, comme certaines variables de qualité ne peuvent pas être obtenues immédiatement, mais sont plutôt obtenues à partir de longues manipulations ou d'appareils peu rapides, un certain laps de temps est requis pour obtenir une propriété et agir, si nécessaire, pour corriger le procédé. C'est dans cette optique que les méthodes statistiques multidimensionnelles (*multivariate statistical methods*) trouvent leur utilité. De ces méthodes, l'analyse en composantes principales (PCA) et la projection sur structures latentes (PLS) ont fait l'objet de nombreuses recherches au cours des dernières décennies. Elles ont notamment été utilisées dans le domaine de la chimie analytique (Wold *et al.*, 1983).

L'utilisation de ces méthodes dans le domaine du génie chimique est cependant plus récente. Ainsi, au cours des dernières années, plusieurs études à l'aide de ces méthodes ont été effectuées, autant en simulation que sur des données de procédés industriels. Ainsi, Skagerberg *et al.* (1992) ont appliqué les techniques PLS sur un modèle de réacteur de polyéthylène basse densité (LDPE). Kresta *et al.* (1991) ont appliqué ces techniques sur des modèles de réacteur à lit fluidisé et d'une colonne à distiller extractive. Wise et Gallagher (1996) ont appliqué la technique PCA et PLS à une unité industrielle de vitrification, alors que Hodouin *et al.* (1993) ont appliqué ces mêmes techniques à des données provenant de différentes unités d'une usine de traitement du minerai et ont ainsi pu approfondir les relations entre ces différentes unités.

Les méthodes statistiques multidimensionnelles sont aussi de plus en plus utilisées dans le domaine des pâtes et papiers. Dayal *et al.* (1994) ont effectué l'analyse PLS de données d'un digesteur Kamyr et ont pu améliorer l'efficacité du procédé. Tessier et Broderick (2000) présentent des exemples de l'utilisation de ces techniques, notamment dans le cadre de l'étude de l'influence de la distribution de la taille des copeaux de bois sur diverses propriétés d'une pâte sulfite à haut rendement. L'étude des données a permis de mettre en lumière des effets saisonniers et l'effet des conditions d'opérations, résultats en accord avec des études plus fondamentales. Ce même auteur a aussi développé un modèle reliant diverses variables de qualité de formettes aux conditions d'opérations de l'étape de raffinage. Finalement, une étude reliant 27 propriétés des fibres provenant de 30 compagnies différentes a été réalisée.

Certaines compagnies sont très actives dans l'utilisation de ces méthodes d'analyse et de contrôle. En effet, la compagnie Tembec inc. utilise présentement ces techniques sur le procédé de production de carton de son usine Temboard, dans un contexte de surveillance et de compréhension du procédé et de prédiction de certaines propriétés du produit fini (Ivanov, 2000b). Certains modèles PLS sont présentement utilisés pour prédire l'imprimabilité et la résistance au pliage du carton, les résultats de ces tests

étant normalement très longs à obtenir. En obtenant de l'information sur la tendance des propriétés du produit fini, des actions correctrices peuvent être entreprises avant l'obtention des analyses de laboratoire, aidant ainsi à minimiser la quantité de carton à remettre en pâte. À l'usine de pâte cellulosique pour usage spéciaux, les techniques PCA et PLS ont été utilisées afin de résoudre des problèmes de variabilité de la viscosité de la pâte (Ivanov, 2000a). L'analyse statistique a permis d'améliorer la connaissance du procédé et d'établir des relations entre certaines variables (effets saisonniers, âge des copeaux et contenu en résine, notamment), permettant ainsi d'éviter trop d'écarts spontanés. Un modèle prédictif de la viscosité de la pâte cellulosique a de plus été développé. La technique PCA est quant à elle utilisée pour le procédé de traitement des eaux usées. Cette exercice a permis d'identifier certaines variables responsables de la variation du procédé, notamment certains débits, la température et la quantité de boue activée dans le bassin d'aération. De plus, le modèle développé permet de surveiller le procédé et de diagnostiquer les causes de certaines variations (Bendwell, 2000). Champagne *et al.* (2000) ont quant à eux utilisé la régression PLS, combinée à la correction orthogonale du signal (*Orthogonal Signal Correction - OSC*) et aux ondelettes pour l'obtention de propriétés basées sur des lectures spectroscopiques NIR. Finalement, Lupien *et al.* (2000) ont réalisé une étude afin d'identifier les variables d'un procédé de production de papier journal ayant un rôle important dans la résistance au déchirement, la résistance à la rupture par traction et l'opacité du papier. Dans le cadre de ce projet, la régression PLS a été utilisée. Les bases de cette méthode sont maintenant présentées.

2.2 - ANALYSE EN COMPOSANTES PRINCIPALES (PCA)

L'analyse en composantes principales est utile pour analyser un bloc de données du même type (variables de procédés ou de qualité). Les données peuvent être analysées telles quelles, ou être préalablement centrées ou centrées-réduites. Cette dernière façon est surtout utilisée lorsque les variables de procédé ont différentes unités de mesure

(L/min, °C, RPM, A, etc.), accordant ainsi la même importance à chaque variable. La méthode PCA est notamment utilisée pour la surveillance de procédé, pour les deux types de variables. Mathématiquement, l'analyse en composantes principales permet d'exprimer une matrice de données sous la forme d'un produit matriciel :

$$\mathbf{X} = \mathbf{TP}^T + \mathbf{E} = \sum_{i=1}^a \mathbf{t}_i \mathbf{p}_i^T + \mathbf{E}$$

où $\mathbf{T}$ est une matrice de *scores* orthogonaux et $\mathbf{P}$ est une matrice orthonormale représentant les poids (*loadings*) de chaque variable, pour chaque composante. $\mathbf{X}$ peut aussi être vu comme une somme de matrices de rang unitaire (Geladi et Kowalski, 1986). Généralement, seulement quelques composantes sont requises afin de bien approximer une matrice de données $\mathbf{X}$. Les composantes restantes sont généralement composées de bruit de mesure ou d'erreurs expérimentales. Une méthode fréquemment utilisée dans la détermination du nombre de composantes significatives est la validation croisée (Wold, 1978), discutée plus loin. Une fois le modèle obtenu, de nouvelles données sont prédites par :

$$\mathbf{T} = \mathbf{XP}$$

On peut aussi voir le problème d'analyse en composantes principales comme étant un problème de détermination de valeurs propres et de vecteurs propres (Wise *et al.*, 1990). Les *loadings* représentent les vecteurs propres de la matrice de corrélation et les valeurs propres, égales à la variance de chaque score $\mathbf{t}$, sont quant à elles une mesure du pourcentage de la variance captée par chaque composante. Le problème a aussi une équivalence dans le cadre de la décomposition en valeurs singulières (Mandel, 1982) et peut aussi être exprimé comme un problème d'optimisation (Lakshminarayanan, 1997).

2.2.1 - Interprétation géométrique

L'interprétation géométrique des composantes principales est présentée à la figure 2.1. La première composante principale est la ligne allant dans la direction de la plus grande variance (ou minimisant la somme des distances orthogonales de chaque point). Les nouvelles coordonnées (scores) sont la distance entre la projection orthogonale de chaque point et le centre de la première composante. Les loadings sont quant à eux le cosinus de l'angle entre les axes des variables et la composante. La deuxième composante est la droite orthogonale à la première allant dans la direction de la plus grande variance des résidus, et ainsi de suite. On voit donc que si l'on affiche les scores t_1 en fonction de t_2 , on peut avoir une charte très intéressante, permettant de résumer les variables de la matrice X . L'affichage des loadings permet quant à lui de visualiser les relations entre les variables.

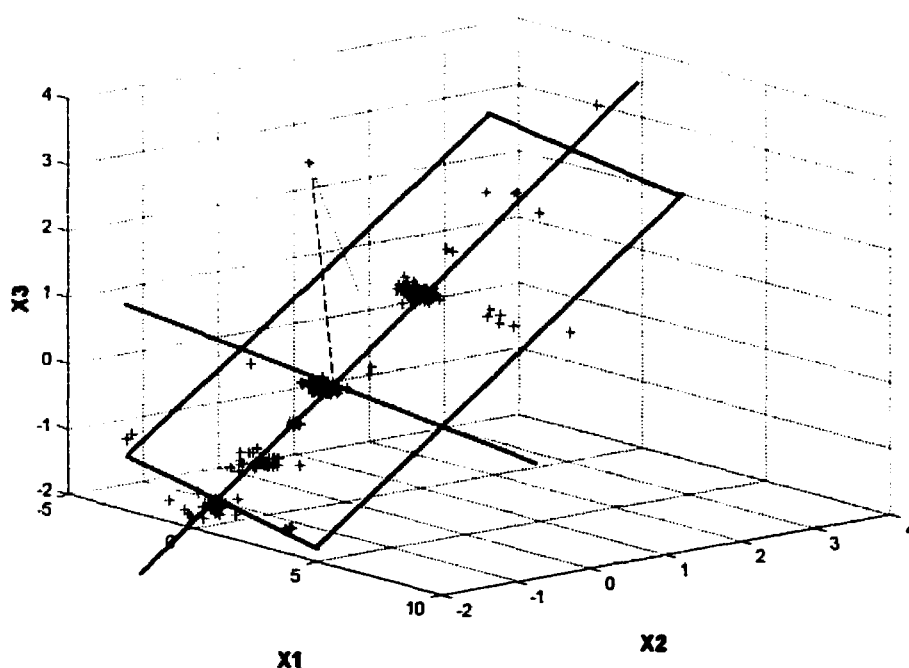


Figure 2.1 Représentation géométrique de l'analyse en composantes principales

2.2.2 - Algorithme NIPALS

L'analyse en composantes principales s'effectue souvent à l'aide de l'algorithme NIPALS (*Nonlinear Iterative Partial Least Squares*). Cet algorithme va comme suit (Geladi et Kowalski, 1986) :

$X_i = X$

- 1- Prendre t comme étant une colonne de X ;
- 2- $p^T = t^T X / t^T t$; (régression des colonnes de X sur t)
- 3- Normaliser p à une longueur unitaire;
- 4- $t = X p / p^T p$; (calcul des scores)
- 5- Test de convergence sur t : si oui, étape 6, sinon, étape 2;
- 6- $E = X - t p^T$ (Calcul des résidus)
- 7- $X = E$ et retour à l'étape 1, pour une autre composante principale

L'algorithme NIPALS est souvent utilisé, étant donné qu'il peut prendre en compte les données manquantes, dues notamment à un capteur défectueux.

2.3 - PROJECTION SUR STRUCTURES LATENTES (PLS)

2.3.1 - Contexte

Alors que l'analyse en composantes principales permet de résumer un ensemble de données, la méthode PLS s'efforce de résumer deux ensembles de données, en plus de maximiser la covariance entre deux blocs de données X et Y . Cette méthode trouve son utilité dans la détermination de coefficients de régression entre deux matrices de données. Le modèle désiré est du type

$$Y = X\beta$$

pour lequel les paramètres de la matrice β sont normalement obtenus par :

$$\beta = (X^T X)^{-1} X^T Y$$

Or, comme c'est souvent le cas avec les données industrielles, les colonnes de la matrice X sont souvent colinéaires, ce qui rend difficile l'inversion de la matrice $X^T X$. Les paramètres issus de cette opération auront ainsi une grande variance et donneront de mauvaises prédictions. Il existe d'autres manières d'obtenir les paramètres de régression, notamment en utilisant la régression pseudo-orthogonalisée (Hoerl et Kennard, 1970) :

$$\beta = (X^T X + \theta I)^{-1} X^T Y$$

Le fait d'ajouter un paramètre θ sur la diagonale de la matrice à inverser lui donne un meilleur conditionnement. Les résultats de la régression pseudo-orthogonalisée sont cependant peu utiles en terme de prédiction, la valeur optimale optimale de θ n'étant pas facile à déterminer (Wise et Gallagher, 1996). Une autre façon d'obtenir β est d'utiliser la régression sur les composantes principales (PCR). Après l'obtention des composantes principales de X , on effectue ensuite une régression de Y sur T :

$$\beta = (T^T T)^{-1} T^T Y$$

Cette méthode a cependant le désavantage de ne pas prendre en considération la corrélation possible à l'intérieur de Y , traitant les variables individuellement. De plus, l'espace défini par les composantes principales de X n'est pas nécessairement l'espace le plus prédictif de Y . Finalement, une dernière façon d'obtenir des paramètres de

régression réside dans le choix judicieux des variables X , ce qui peut se traduire en perte d'information.

La méthode PLS propose ainsi un compromis en ayant les objectifs suivants : bien expliquer la matrice X tout en maximisant la covariance entre la matrice X et Y . De plus, la structure interne de la régression PLS est très utile afin d'obtenir des informations sur le procédé étudié. On peut voir la méthode PLS comme deux analyses en composantes principales des matrices X et Y (n'étant cependant pas faite de manière indépendante), en plus d'une relation linéaire statique. Les matrices X et Y sont ainsi exprimées comme suit :

$$X = TP^T + E$$

$$Y = UQ^T + F$$

Les scores t sont orthogonaux, mais pas les scores u , ceci afin de respecter les deux critères de la régression PLS. De plus, une relation linéaire unit les deux nouvelles matrices T et U , soit

$$U = TB$$

2.3.2 - Algorithme NIPALS

La projection sur structures latente peut être réalisé à l'aide de l'algorithme NIPALS (Geladi et Kowalski, 1986) :

$$X_i = X \text{ et } Y_i = Y$$

1. Prendre u_i comme étant une colonne de Y ;
2. $w^T = u^T X / u^T u$ (régression des colonnes de X sur u);
3. Normaliser w à une longueur unitaire;

4. $\mathbf{t} = \mathbf{X}\mathbf{w} / \mathbf{w}^T \mathbf{w}$ (calcul des scores);
5. $\mathbf{q}^T = \mathbf{t}^T \mathbf{Y} / \mathbf{t}^T \mathbf{t}$ (régression des colonnes de $\mathbf{Y}$ sur $\mathbf{t}$);
6. Normaliser $\mathbf{q}$ à une longueur unitaire;
7. $\mathbf{u} = \mathbf{Y}\mathbf{q} / \mathbf{q}^T \mathbf{q}$ (calcul de nouveaux scores);
8. Test de convergence : si oui, étape 9; sinon, étape 2;
9. $\mathbf{p} = \mathbf{X}^T \mathbf{t} / \mathbf{t}^T \mathbf{t}$ (calcul des loadings de $\mathbf{X}$);
10. $\mathbf{t} = \mathbf{t} / \|\mathbf{p}\|$;
11. $\mathbf{w}^T = \mathbf{w}^T / \|\mathbf{p}\|$;
12. $\mathbf{p} = \mathbf{p} / \|\mathbf{p}\|$;
13. $\mathbf{b} = \mathbf{u}^T \mathbf{t} / \mathbf{t}^T \mathbf{t}$ (régression $\hat{\mathbf{u}} = \mathbf{b}\mathbf{t}$);
14. $\mathbf{E} = \mathbf{X} - \mathbf{t}\mathbf{p}^T$ et $\mathbf{F} = \mathbf{Y} - \mathbf{b}\mathbf{t}\mathbf{q}^T$ (calcul des matrices de résidus);
15. $\mathbf{X} = \mathbf{E}$ et $\mathbf{Y} = \mathbf{F}$ et retour à l'étape 1, pour une autre variable latente

L'algorithme utilisé dans le cadre de ce projet est une variante de celui présenté ci-haut. En effet, les étapes 6, 10, 11 et 12 ont été omises, afin de pouvoir comparer les résultats avec ceux obtenus à l'aide de Simca-P (Tenenhaus, 1998). Dans le cas d'une omission de l'étape 6, la matrice de régression entre les scores $\mathbf{T}$ et $\mathbf{U}$ est $\mathbf{B} = \mathbf{I}$ et $\mathbf{F} = \mathbf{Y} - \mathbf{t}\mathbf{q}^T$. Plusieurs autres variantes de cet algorithme existent (voir par exemple, Lindgren *et al.*, 1993; Rännar *et al.*, 1994; Dayal et MacGregor, 1997). La projection sur structures latentes peut aussi être présentée dans le cadre de la décomposition en valeurs singulières (Kaspar et Ray, 1993) ou comme un problème de détermination de vecteurs et de valeurs propres (Höskuldsson, 1988).

On remarque dans l'algorithme plus haut la présence d'une matrice $\mathbf{W}$, représentant la covariance entre les résidus de $\mathbf{X}$ et les scores $\mathbf{U}$ ($\mathbf{Y}$, indirectement). L'interprétation étant cependant difficile, on peut convertir cette matrice $\mathbf{W}$ en terme des variables originales de $\mathbf{X}$ comme étant $\mathbf{W}^* = \mathbf{W}(\mathbf{P}^T \mathbf{W})^{-1}$ et $\mathbf{X}$ est ainsi relié à $\mathbf{T}$ par $\mathbf{T} = \mathbf{X}\mathbf{W}^*$. On obtient finalement les coefficients de régression entre $\mathbf{X}$ et $\mathbf{Y}$ comme étant (Skagerberg *et al.*, 1992) :

$$\beta = W(P^T W)^{-1} B Q^T$$

avec

$$B = \text{diag}(b)$$

2.3.3 - Coefficient de détermination multiple R^2

Le coefficient de détermination représente la somme des carrés de l'erreur expliquée, et mesure à quel point le modèle représente bien les données. Il se calcule comme suit (Umetrics, 1998) :

Par variable x_k ou y_k , pour chaque variable latente h :

$$R_{k,h}^2 = 1 - \frac{RSS_{k,h}}{RSS_{k,h-1}}$$

Par variable x_k ou y_k , cumulativement :

$$(R_{k,h}^2)_{cum} = 1 - \frac{RSS_{k,h}}{SS_k}$$

Ces deux coefficients sont donnés sous forme graphique, lors de la présentation des résultats. Pour l'ensemble de X ou de Y , pour chaque variable latente h , on obtient :

$$R_h^2 = 1 - \frac{\sum_{k=1}^q RSS_{k,h}}{\sum_{k=1}^q RSS_{k,h-1}}$$

et de façon cumulative :

$$(R_h^2)_{cum} = 1 - \frac{\sum_{k=1}^q RSS_{k,h}}{\sum_{k=1}^q SS_k}$$

Ces deux dernier coefficients sont donnés sous forme tabulée lors de la présentation des résultats. Le terme SS_k est la somme des carrés des données initiales, centrées-réduites, et RSS désigne la somme des carrés des résidus.

2.3.4 - Validation croisée

La régression PLS est utilisée pour le développement de modèles prédictifs. Un nombre approprié de variables latentes doit ainsi être sélectionné, afin d'obtenir de bonnes prédictions. Plusieurs façons sont possibles (Jackson, 1991). La méthode utilisée dans le cadre de cette étude est la validation croisée (Wold, 1978). Sommairement, cette méthode est la suivante :

Pour chaque variable latente :

1. Séparer les données en quelques sous-ensembles (5 à 7);
2. Enlever un sous-ensemble;
3. Faire une régression PLS sur les données restantes;
4. Calculer la sommes des carrés des erreurs de prédiction (PRESS)
5. Recommencer cette procédure à l'aide d'un autre sous-ensemble et en remettant le précédent, jusqu'à ce que chaque donnée ait été enlevée une et une seule fois;
6. Calculer un PRESS global, pour chaque variable latente.

Une fois le PRESS global obtenu, on peut afficher ce coefficient en fonction du nombre de variables latentes, et prendre le minimum de la courbe ainsi obtenue comme étant le nombre de variables latentes significatives. Cependant, Simca-P utilise plutôt cette donnée pour calculer le coefficient Q^2 , similaire à un R^2 validé de façon croisée (Umetrics, 1998; Tenenhaus, 1998). Pour chaque variable y_k , mesurant respectivement l'apport marginal de chaque variable latente et l'apport cumulatif des h premières variables latentes à la capacité prédictive du modèle :

$$Q_{k,h}^2 = 1 - \frac{\text{PRESS}_{k,h}}{\text{RSS}_{k,h-1}}$$

$$(Q_{k,h}^2)_{\text{cum}} = 1 - \prod_{j=1}^h \frac{\text{PRESS}_{k,j}}{\text{RSS}_{k,j-1}}$$

On peut aussi mesurer respectivement l'apport global pour chaque variable latente et cumulatif pour h variables latentes, pour l'ensemble des variables de Y :

$$Q_h^2 = 1 - \frac{\sum_{k=1}^q \text{PRESS}_{k,h}}{\sum_{k=1}^q \text{RSS}_{k,h-1}}$$

$$(Q_h^2)_{\text{cum}} = 1 - \prod_{j=1}^h \frac{\sum_{k=1}^q \text{PRESS}_{k,j}}{\sum_{k=1}^q \text{RSS}_{k,j-1}}$$

Ces deux derniers coefficients sont présentés sous forme tabulée dans le chapitre des résultats. Une variable latente sera significative si $Q_h^2 \geq (1 - 0,95^2) \approx 0,1$ ou s'il existe au moins un $Q_{hk}^2 \geq 0,1$. On considère par ailleurs qu'une réponse y_k est bien modélisée lorsque $(Q_{k,h}^2)_{\text{cum}} \geq 0,5$.

2.3.5 - Interprétation du modèle

Le pouvoir explicatif d'une variable x_j sur l'ensemble de Y est exprimé par l'indice VIP (*Variable Importance in the Projection*) (Tenenhaus, 1998):

$$\text{VIP}_{h,k} = \sqrt{\frac{p}{\text{Rd}(Y; t_1, \dots, t_h)} \sum_{l=1}^h \text{Rd}(Y; t_l) w_{l,k}^2}$$

où p est le nombre de variables de X , $w_{1,k}$ est le poids représentant la contribution d'une variable x_k à la composante t_1 et $Rd(Y;t_1)$ est la redondance entre Y et t_1 . On considère qu'un pouvoir explicatif supérieur à 1 indique une variable importante dans la représentation de Y .

2.3.6 - Statistiques T^2 et SPE

Les scores t peuvent être présentés graphiquement, en PCA comme en PLS. On peut aussi mesurer la variation à l'intérieur du modèle PLS à l'aide de la statistique T^2 de Hotelling :

$$T_i^2 = \sum_{h=1}^a \frac{t_{i,h}^2}{s_{t_h}^2}$$

où $s_{t_h}^2$ est la variance de la composante t_h du modèle PLS et a est le nombre de variables latentes du modèle. Géométriquement, cette statistique représente une distance par rapport l'intersection des composantes (Figure 2.1, ligne tiretée). Un intervalle de confiance peut-être calculé comme suit, la statistique T^2 étant reliée à la statistique de Fisher :

$$T^2 = \frac{(n-1)(n+1)a}{n(n-a)} F_{a, a, n-a}$$

où n est le nombre d'observations et a le nombre de variables latentes dans le modèle. La limite de confiance, sur un graphique de scores t_1 en fonction de t_2 , par exemple, est de forme ellipsoïdale avec des axes de longueur

$$d = \sqrt{\frac{2(n^2-1)s_{t_i}^2 F_{a,2,a-2}}{n(n-2)}}$$

où i est le numéro de la variable latente (Wikström *et al.*, 1998a). La figure 3.13 présente une telle ellipse de Hotelling. En ce qui a trait aux résidus, divers moyens de contrôle existent, notamment l'erreur de prédiction au carré (*Squared Prediction Error*, SPE) pour chaque variable x_k ou y_k (Kresta *et al.*, 1991) :

$$SPE_x = \sum_{k=1}^p (x_k - \hat{x}_k)^2$$

Géométriquement, cette erreur représente la distance entre un point dans l'espace et le plan formé (ou hyperplan) formé par les variables latentes (Figure 2.1, ligne pointillée). Une limite de confiance peut être déterminée (Jackson et Mudholkar, 1979).

Ces deux moyens de contrôle permettent donc d'examiner les causes d'une observation suspecte. Si un changement se produit dans une ou plusieurs variables de procédé, tout en conservant une structure de corrélation semblable, ce changement se reflétera sur un graphique des scores, alors qu'un point sera en dehors de l'ellipse. Si par contre un changement est dû à un événement qui n'a pas été modélisé par l'ensemble de données ayant servi à la construction du modèle, l'erreur de prédiction SPE sera anormalement grande. Cette statistique permet de repérer l'occurrence de nouveaux événements, ce qui se traduit en un changement dans la structure de corrélation entre X et Y (Kresta *et al.*, 1991).

2.4 - PROJECTION SUR STRUCTURES LATENTES - MÉTHODE DYNAMIQUE

L'application de la régression PLS sur des données dynamiques a été réalisée par quelques auteurs. Ainsi, Ricker (1988) a utilisé la régression PLS afin de déterminer les coefficients d'une réponse à une impulsion (FIR) et a aussi déterminé les coefficients de la réponse à un échelon d'un procédé de traitement anaérobie de l'eau.

Kaspar et Ray (1992, 1993) ont pour leur part utilisé la régression PLS afin de construire des modèles de procédé, en utilisant un filtre (statique ou dynamique) basé sur la dynamique moyenne du procédé en question. Ils ont ainsi écarté l'utilisation d'une relation dynamique reliant les t et les u et remplaçant le coefficient de régression b . Selon ces derniers, dans certains cas, l'utilisation de l'algorithme PLS peut s'avérer fructueuse, résultant en un modèle tenant compte des dynamiques rapides à l'aide des premières variables latentes et les dynamiques lentes à l'aide des variables latentes moins significatives. Dans d'autres cas cependant, la modélisation pourrait s'avérer fautive, un mauvais choix de relations entrées-sorties étant obtenu en se basant sur de mauvaises relations internes. On obtiendrait ainsi un mauvais modèle, n'expliquant qu'une faible partie de la variance de la matrice de sortie Y . Lakshminarayanan *et al.* (1997) répondent à cette argumentation en disant qu'il est possible d'obtenir des modèles adéquats en utilisant des signaux d'entrée comportant une portion suffisante de basses fréquences (par exemple, des échelons). L'approche utilisée par ces derniers auteurs est tout de même intéressante, car elle est utile pour le développement de modèles de contrôle avancé. En effet, l'utilisation de modèles prédictifs est appropriée pour l'utilisation de schémas de contrôle avancé (DMC, par exemple). Une approche utilisée est de contrôler les scores (Kaspar et Ray, 1992; Lakshminarayanan *et al.*, 1997). Cette approche a l'avantage de découpler d'une certaine façon le contrôle étant donné l'utilisation de variables orthogonales. Dans ce cas, Q , W^* et les matrices de variance sont utilisées comme pré- et post-compensateurs. De plus, Lakshminarayanan (1997) a pour sa part utilisé les modèles PLS dans un cadre de contrôle par anticipation et de contrôle DMC.

D'un point de vue algorithmique, la modélisation PLS dynamique est basée sur le remplacement de l'étape 11 de l'algorithme par la détermination, pour chaque variable latente k , d'une relation dynamique linéaire $g_k(z)$. Cette relation linéaire intervient ensuite dans le calcul des résidus F de Y . Une fois le modèle obtenu, la prédiction peut

être effectuée, en utilisant les fonctions de transfert comme les composantes d'une matrice diagonale $G(z)$ (Figure 2.2).

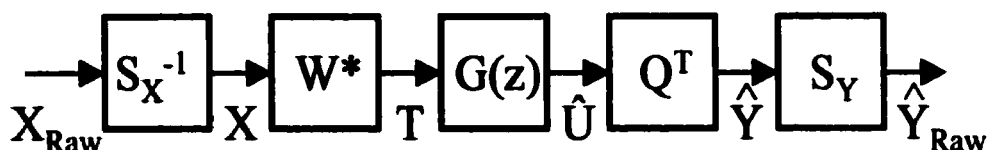


Figure 2.2 Prédiction à l'aide de la régression PLS dynamique

Les matrices S_x et S_y sont des matrices diagonales de mise à l'échelle, représentant les variances. On peut donc voir, selon la figure 2.2, que les différentes relations dynamiques internes obtenues contribuent selon l'amplitude des coefficients de Q et de W^* . Les fonctions de transfert reliant les variables x_j et y_i sont données par :

$$\frac{\Delta y_i(z)}{\Delta x_j(z)} = \frac{sy_i}{sx_j} \left(\sum_{k=1}^i q_{i,k} G_k(z) w_{j,k}^* \right)$$

Finalement, il est à noter que cette méthode de modélisation ne fait pas appel à l'utilisation de variables décalées, les dynamiques étant contenues dans la matrice $G(z)$.

2.4.1 - Exemple d'application

La régression PLS dynamique a été testée sur les données provenant d'une simulation d'un système bien connu, la colonne à distiller Wood & Berry, un exemple étudié par Lakshminarayanan *et al.* (1997). Cette colonne de séparation d'un mélange méthanol-eau est représentée par les fonctions de transfert suivantes :

$$\begin{bmatrix} y_1(s) \\ y_2(s) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{12.8e^{-s}}{16.7s+1} & \frac{-18.9e^{-3s}}{21s+1} \\ \frac{6.6e^{-7s}}{10.9s+1} & \frac{-19.4e^{-3s}}{14.4s+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(s) \\ x_2(s) \end{bmatrix}$$

Les variables y_1 et y_2 représentent respectivement les compositions en méthanol des produits de haut et bas de colonne, alors que les variables manipulées x_1 et x_2 représentent le reflux et le débit de vapeur au rebouilleur. Les entrées ont été changées à l'aide d'une séquence binaire pseudo-aléatoire (PRBS). Les signaux d'entrée et de sortie ont ensuite été bruités, afin d'obtenir un ratio signal/bruit de 10. Ceci a permis de reproduire les résultats obtenus par Lakshminarayanan (Figures 2.3 et 2.4). Comme on peut le voir, le modèle PLS dynamique représente très bien les données de la colonne à distiller. De plus, les gains statiques obtenus sont pratiquement égaux aux gains statiques théoriques.

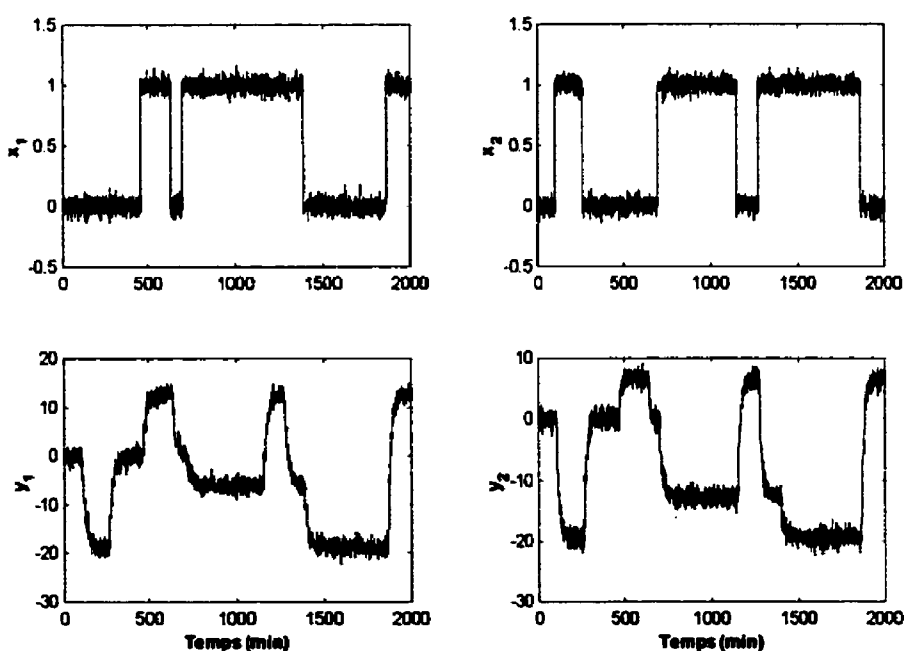


Figure 2.3 Signaux d'entrée et réponses, colonne Wood & Berry

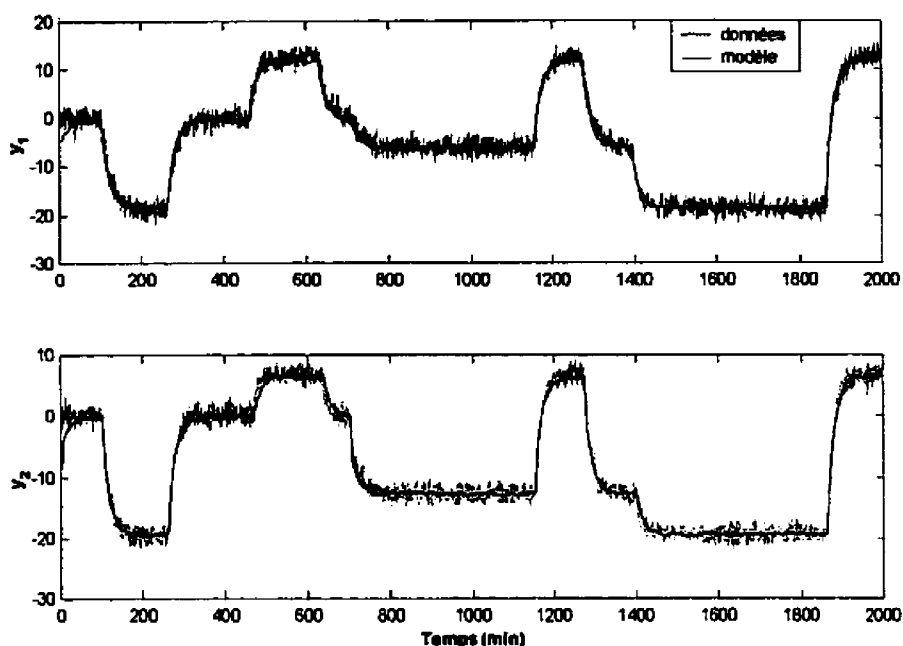


Figure 2.4 Réponse dynamique et modélisation PLS dynamique, colonne Wood & Berry (2 variables latentes)

Tableau 2.1 Somme des carrés expliquée - modèle PLS dynamique, colonne Wood & Berry

Var. lat.	R_x^2	$(R_x^2)_{cum}$	R_y^2	$(R_y^2)_{cum}$
1	52.73	53.73	96.35	96.35
2	47.27	100.00	2.14	98.49

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 12,49 & -18,04 \\ 6,68 & -19,29 \end{bmatrix}$$

À noter que ces résultats ont été obtenus à l'aide de fonctions de transfert internes d'ordre maximal 2, un modèle d'ordre maximal 1 donnant quelques écarts tout juste avant le changement en échelon de x_1 ou x_2 . Un approfondissement de la méthode de régression PLS dynamique a permis de faire certains constats. Premièrement, les scores $\mathbf{u}$ sont bien approximés par les scores dynamiques (Figures 2.5 et 2.6), notamment les scores $\mathbf{u}$ de la première dimension, ce qui est compréhensible, $\mathbf{Y}$ étant expliquée à plus de 96%.

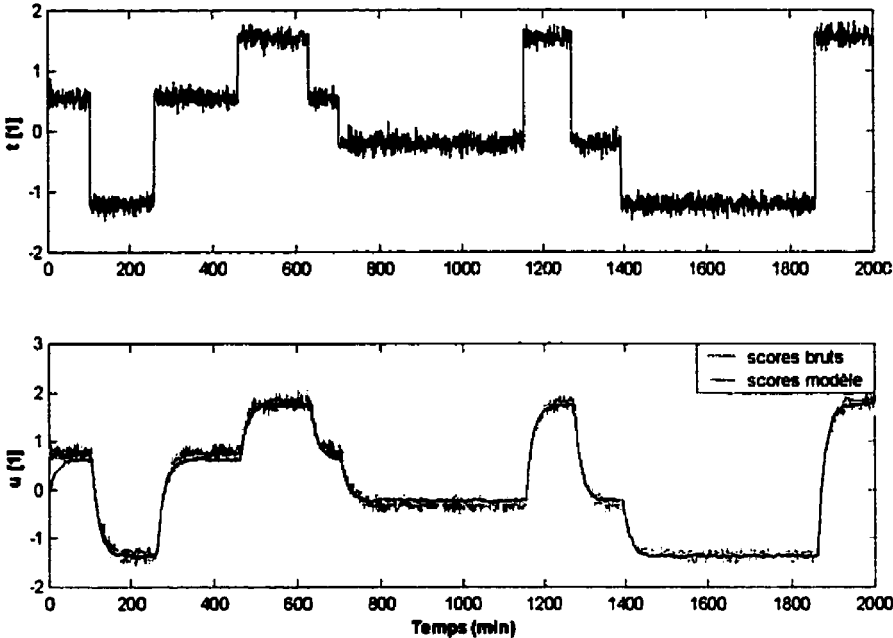


Figure 2.5 Scores de la première dimension, colonne Wood & Berry

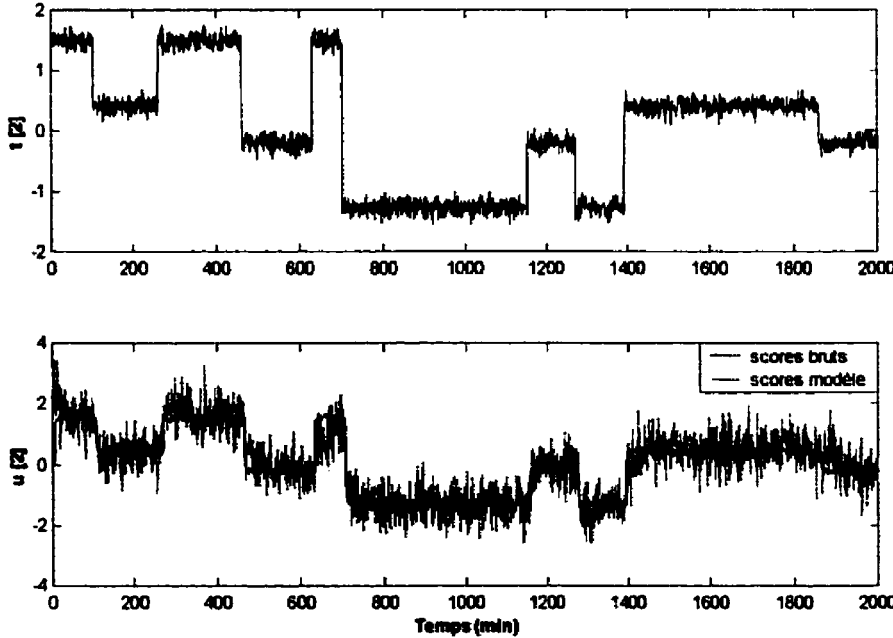


Figure 2.6 Scores de la deuxième dimension, colonne Wood & Berry

On a de plus besoin de toutes les variables latentes afin d'identifier avec succès les divers gains. En effet, avec une variable latente, on obtient les gains ci-dessous, alors que les deux variables de sortie sont tout de même très bien expliquées (Figure 2.7).

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 10,95 & -19,02 \\ 9,92 & -17,23 \end{bmatrix}$$

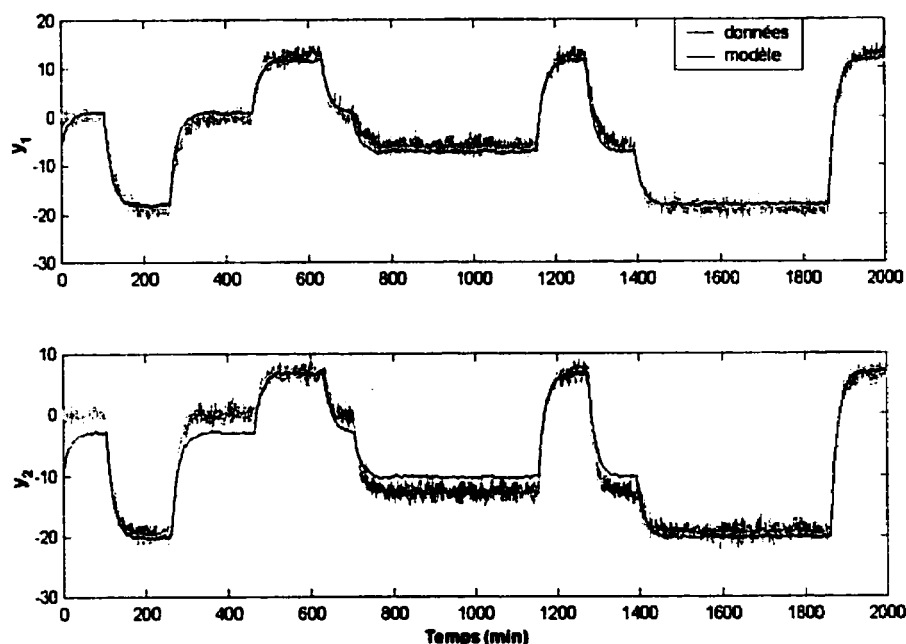


Figure 2.7 Réponse dynamique et modélisation PLS dynamique, colonne Wood & Berry (1 variable latente)

Ces gains sont relativement acceptables, bien que l'on constate une certaine erreur. Ceci est compréhensible, étant donné que pour une identification, on a généralement besoin de toute l'information que les entrées peuvent apporter. Pour ce modèle, la première variable latente n'expliquant que 52,73% de la variabilité de $\mathbf{X}$, une partie significative de l'information est alors perdue et n'est pas utilisée pour l'identification (Figure 2.8). Des essais successifs ont permis de constater que les performances

d'identification se dégradent quelque peu à partir d'un ratio signal/bruit de 3, lorsque les deux variables latentes sont utilisées. Les gains pour un tel ratio sont

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 11,73 & -16,19 \\ 6,19 & -17,64 \end{bmatrix}$$

Dans le cas d'une seule variable latente, ce ratio est le même et les gains sont

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 9,97 & -17,31 \\ 9,10 & -15,80 \end{bmatrix}$$

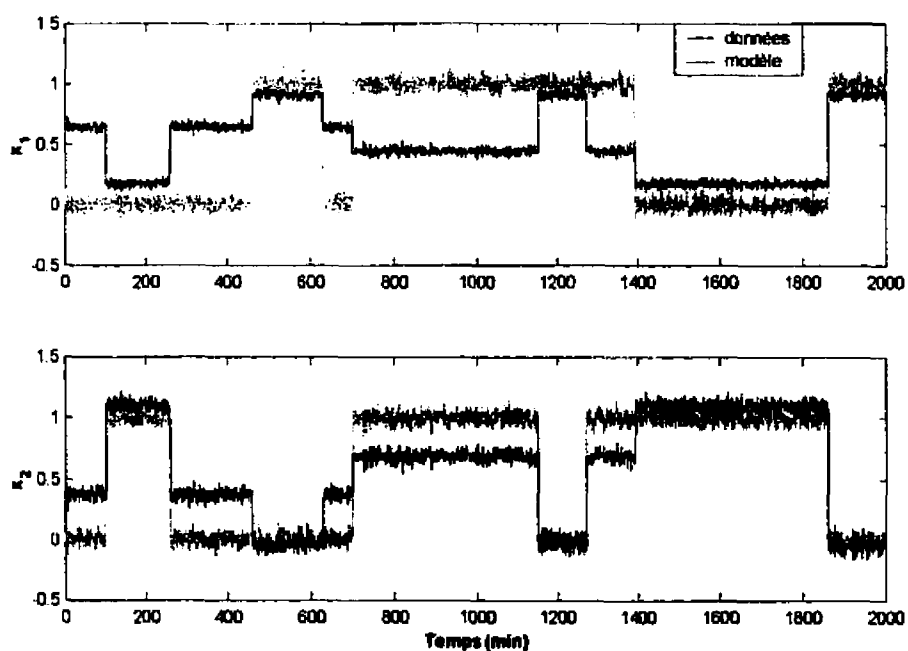


Figure 2.8 Signaux d'entrée et reconstitution à l'aide du modèle PLS (1 variable latente)

III - RÉSULTATS

3.1 - MÉTHODOLOGIE

Le but de cette étude est d'identifier des fonctions de transfert à l'aide de la régression PLS dynamique pour un grade important. Ce choix s'est arrêté sur le grade 212, suite à des discussions avec le personnel de Temboard. Une fois ce grade choisi, des informations sur la dynamique du procédé ont été obtenues à l'aide de données provenant de ce grade. Des fonctions de transfert ont été obtenues, les conditions d'opérations contenant des échelons *individuels et non simultanés* alors que les autres variables étaient stables pour chacun des deux débits de colorants. Cependant, dans l'optique d'une généralisation du modèle du grade 212 aux autres grades et afin de pouvoir comparer les présents travaux à ceux réalisés antérieurement, le besoin d'exprimer les débits de colorants en kg/adt s'est imposé. Mais, les débits de pâte n'étant pas disponibles, il était difficile d'obtenir ces concentrations. De nouveaux fichiers ont donc été reçus, contenant cette fois-ci les débits de pâte et les débits de sauce de couchage.

Plus tard, la nouvelle est venue que les fichiers comportaient un problème d'acquisition de données. En effet, une des variables, le débit de colorant bleu, n'était que du bruit. Donc, de nouveaux fichiers ont été envoyés. Cependant, pour des contraintes de temps, ne pouvant attendre qu'une production de grade 212 ait lieu, l'analyse PLS a été effectuée à l'aide de données provenant d'un autre grade. Suite à de vaines tentatives pour identifier un système 2x2 de façon conventionnelle parmi les autres grades, étant donné le manque de plages appropriées, le choix du grade 607 s'est imposé. Ce choix s'est imposé principalement parce que suffisamment de données étaient disponibles, permettant l'utilisation d'une partie pour la prédiction. La comparaison des gains identifiés à l'aide de la méthode PLS dynamique s'est faite à l'aide des gains obtenus pour le grade 212.

Le chapitre des résultats va donc comme suit. Premièrement, les propriétés dynamiques des données de couleur ont été déterminées et des fonctions de transfert ont été identifiées à partir du grade 212. Une autocorrélation des données de couleur du grade 607 a été réalisée, afin de connaître la nature de ces dernières. Les données ont été analysées à l'aide de la régression PLS en négligeant la dynamique contenue dans les données, afin d'avoir une idée du comportement des variables. Comme un modèle dynamique repose en partie sur les coefficients de W^* et Q , cet examen des données aiderait à comprendre le modèle et à déterminer des variables importantes. Des prédictions ont aussi été réalisées à l'aide de ce modèle statique, afin de vérifier sa performance. Suite à cette analyse, une comparaison avec la régression PLS auto-régressive a été effectuée, étant donnée la nature dynamique des variables de couleur. Des prédictions ont aussi été réalisées à l'aide de cette méthode. Finalement, la régression PLS dynamique a été appliquée aux données du grade 607, afin de voir s'il était possible d'identifier fonctions de transfert en dépit des interactions présentes entre les variables. Divers gains ont été obtenus, mais étant donnée notamment la nature non-stationnaire des données utilisées, l'identification n'a pas fonctionné aussi bien que prévu.

3.2 - TRAITEMENT DE DONNÉES

Les données utilisées dans le cadre de cette recherche proviennent du procédé de fabrication de carton de Temboard. Les variables utilisées pour l'analyse sont présentées au tableau 3.1. Les premiers fichiers, contenant des données relatives au grade 212 et notamment utilisés pour la détermination des fonctions de transfert reliant les débits de colorants aux paramètres de couleur a et b , ne contenaient pas les variables 17 à 22. De plus, aucune variable de produits chimiques ajoutés à la pâte n'était disponible, ces dernières n'étant pas disponibles sur une base assez rapide, étant acquis

par une autre système d'acquisition de données. Les données du tableau 3.1 étaient recueillies à chaque 20 secondes.

Tableau 3.1 Variables de procédé disponibles

Noms des variables	Signification	Unités
1- speed	vitesse machine	m/min
2- coating	grammage sauce de couchage	g/m ²
3- redpv	colorant rouge	kg/adt
4- bluepv	colorant bleu	kg/adt
5- topcons	consistance couche supérieure, caisse d'arrivée	%
6- topwwcons	consistance eau blanche, couche supérieure	%
7- topret	rétenion des fibres, couche supérieure	%
8- fillcons	consistance couche médiane, caisse d'arrivée	%
9- fillwwcons	consistance eau blanche, couche médiane	%
10- fillret	rétenion des fibres, couche médiane	%
11- backcons	consistance couche inférieure, caisse d'arrivée	%
12- backwwcons	consistance eau blanche, couche inférieure	%
13- backret	rétenion des fibres, couche inférieure	%
14- plywtact1	grammage, matière fibreuse, couche supérieure	g/m ²
15- plywtact2	grammage, matière fibreuse, couche médiane	g/m ²
16- plywtact3	grammage, matière fibreuse, couche inférieure	g/m ²
17- tplyflow	débit de pâte, stock chest, couche supérieure	L/min
18- fplyflow	débit de pâte, stock chest, couche médiane	L/min
19- bplyflow	débit de pâte, stock chest, couche inférieure	L/min
20- precoatflow	débit de sauce de pré-couchage, couche supérieure	L/min
21- topcoatflow	débit de sauce de couchage, couche supérieure	L/min
22- bakcoatflow	débit de sauce de couchage, couche inférieure	L/min
23- luminance (Y)	luminance	---
24- colora (Y)	paramètre de couleur a	---
25- colorb (Y)	paramètre de couleur b	---
26- blancheur (Y)	blancheur	% ISO

Ensuite, les données n'ont pas été filtrées, afin de ne pas perdre d'information. De plus, les données contenant des casses n'ont pas été utilisées, le procédé étant trop perturbé par ce type d'événement. Le traitement des données s'est donc résumé à éliminer la présence de sauts provenant des coucheuses. En effet, les coucheuses sont périodiquement nettoyées de l'excès de pigment s'accumulant à la surface. Or, ces courtes séances de nettoyage ont pour effet de causer de fortes perturbations dans le

poids total de sauce de couchage, ce qui se reflète sur la luminance et sur la brillance. Ainsi, ces points ont été enlevés, en s'assurant que les variables revenaient à leur valeur d'avant perturbation.

3.3 - CONNAISSANCE DYNAMIQUE DU PROCÉDÉ

Avant de procéder à une méthode d'identification, il est bon de connaître le procédé le mieux possible. Cette connaissance du procédé peut être acquise à l'aide de l'expérience des opérateurs, ou à l'aide de l'analyse des séries chronologiques. À l'aide de ces techniques, on peut obtenir plusieurs informations, notamment savoir si le procédé est stationnaire, de connaître la « mémoire » du procédé, s'il est possible d'améliorer le contrôle déjà en place (Harris, 1989; Stanfelj *et al.*, 1993) et le retard du procédé (Box et Jenkins, 1976). Ces informations, plus particulièrement l'obtention de fonctions de transfert, allaient être les références pour les autres résultats.

3.2.1 - Autocorrélation

L'autocorrélation permet d'atteindre les trois premiers objectifs mentionnés plus haut. Cette fonction est décrite comme suit, pour une série de N données :

$$r_{xx}(k) = \frac{1}{(n-1)s_x^2} \sum_{j=0}^{n-|k|-1} \left(x_j - \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} x_i \right) \left(x_{j+k} - \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} x_i \right), \quad k \geq 0$$

On voit d'après cette formule que les données sont premièrement centrées par rapport à la moyenne. Ensuite, pour chaque indice k , on décale d'un pas de temps la série de données par rapport à elle-même et on obtient la fonction d'autocorrélation. Finalement, comme cette fonction est symétrique, on ne prend que les résultats pour $k \geq 0$. Il est possible de définir un intervalle de confiance, permettant de dire que la

fonction d'autocorrélation et n'est plus significative après un certain nombre de périodes v :

$$\text{var}[r_x(k)] \approx \frac{1}{n} \left\{ 1 + 2 \sum_{i=1}^v r_x^2(i) \right\}, \quad k > v$$

Une limite approximative de l'intervalle de confiance à 95% est de deux écarts-types :

$$\pm 2\sqrt{\text{var}(r_x(k))}$$

L'autocorrélation a été calculée pour les paramètres L , a , b et la blancheur, à l'aide des données brutes du grade 607 centrées-réduites pour des décalages allant de 0 à 30 (Figures 3.1 et 3.2). Ces données ont été utilisées pour l'autocorrélation, étant donné que ce sont ces dernières qui ont été utilisées pour la régression PLS.

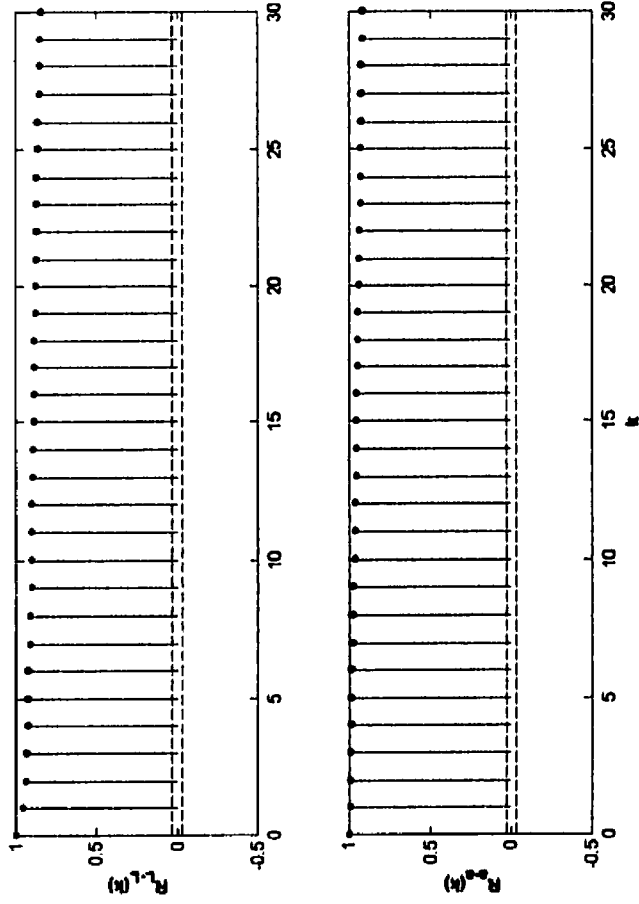


Figure 3.1 Fonction d'autocorrélation de la luminance et du paramètre a , première série de données

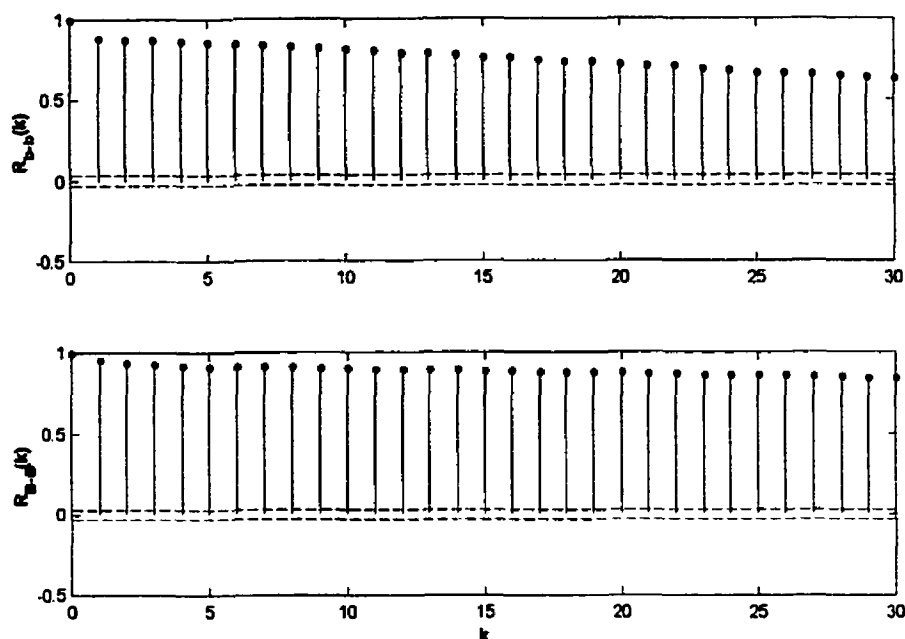


Figure 3.2 Fonction d'autocorrélation du paramètre b et de la blancheur, première série de données

Les fonctions d'autocorrélation ne s'atténuant pas après le trentième décalage, on peut conclure que les données ne sont pas stationnaires. L'expérience a été répétée à l'aide des données sous forme de différences. Dans ce cas-ci, les fonctions d'autocorrélation s'atténuent après quelques décalages (Figures 3.3 et 3.4). De ceci, il est aussi possible de conclure que les méthodes utilisées afin de contrôler les variations de ces variables ne sont pas au meilleur de leur efficacité. Des conclusions similaires ont été tirées des données provenant d'une seconde série de données provenant aussi du grade 607 (Figures 3.5 et 3.6). Cependant, les fonctions d'autocorrélation des premières différences de la luminance et de la blancheur montrent un comportement oscillatoire s'étendant toujours au-delà de la limite de confiance (Figures 3.7 et 3.8).

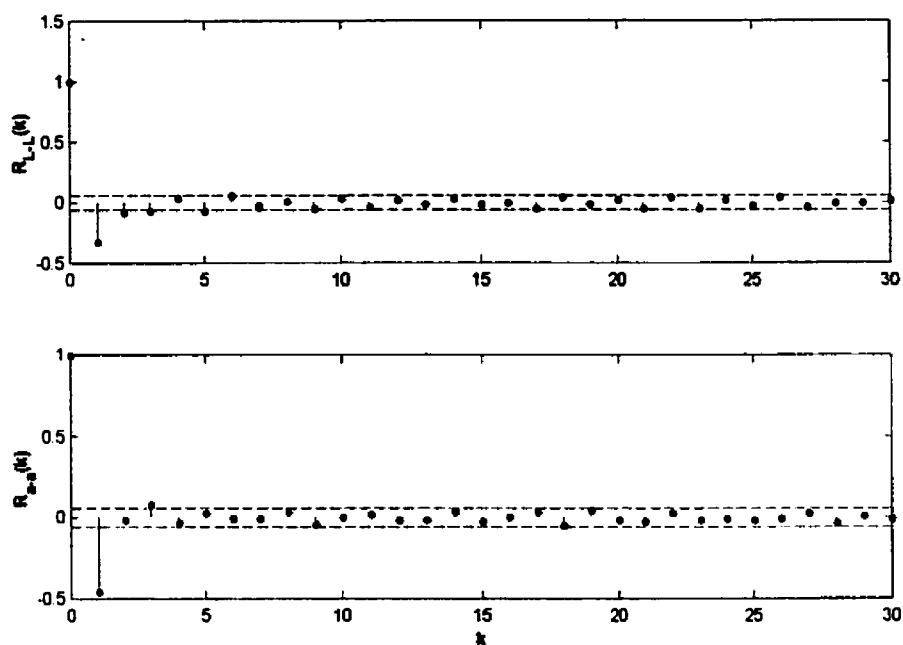


Figure 3.3 Fonction d'autocorrélation de ∇L et ∇a , première série de données

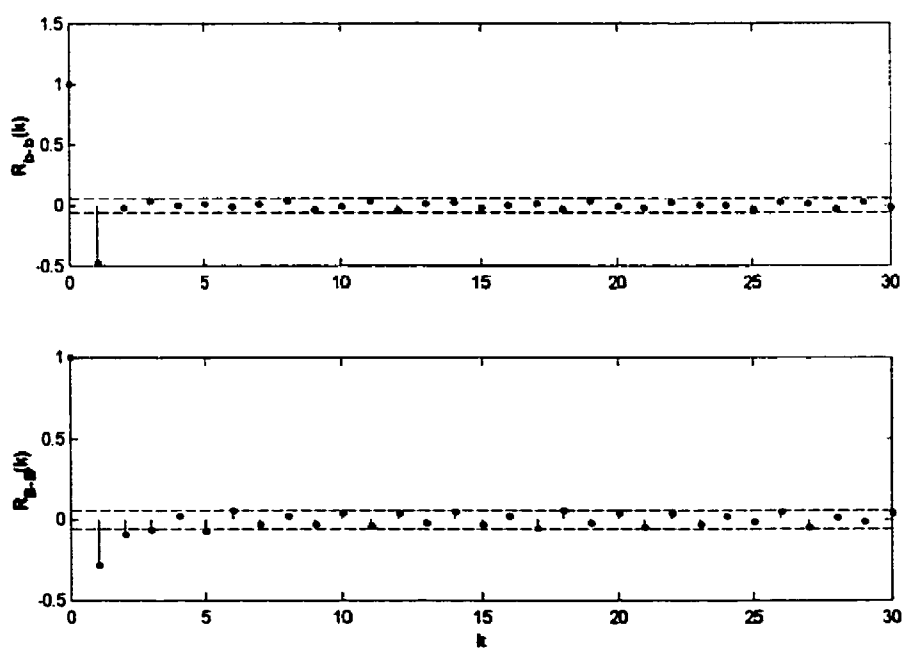


Figure 3.4 Fonction d'autocorrélation de ∇b et $\nabla \text{blancheur}$, première série de données

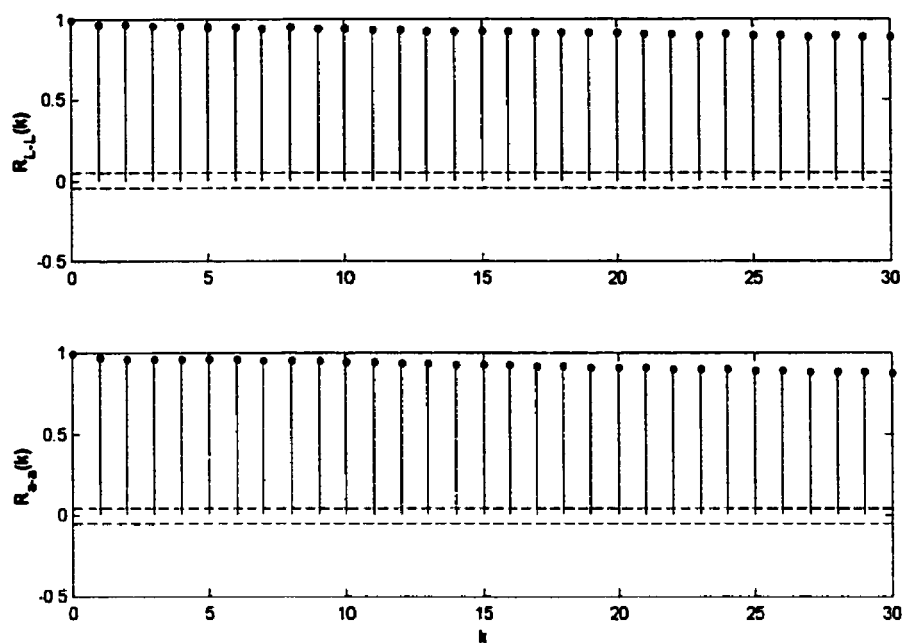


Figure 3.5 Fonction d'autocorrélation de la luminance et du paramètre a , deuxième série de données

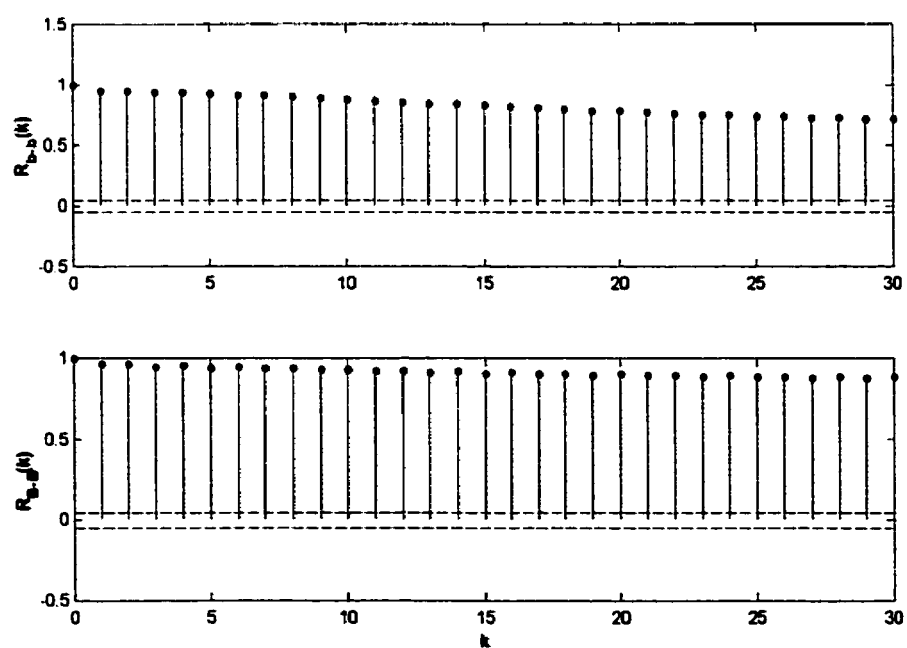


Figure 3.6 Fonction d'autocorrélation de la luminance et du paramètre a , deuxième série de données

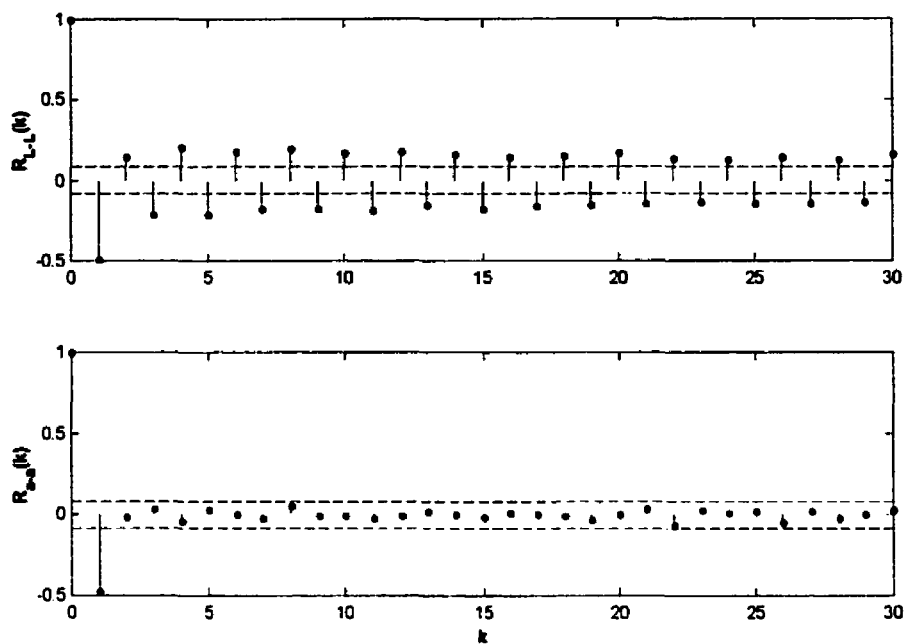


Figure 3.7 Fonction d'autocorrélation de ∇L et ∇a , deuxième série de données

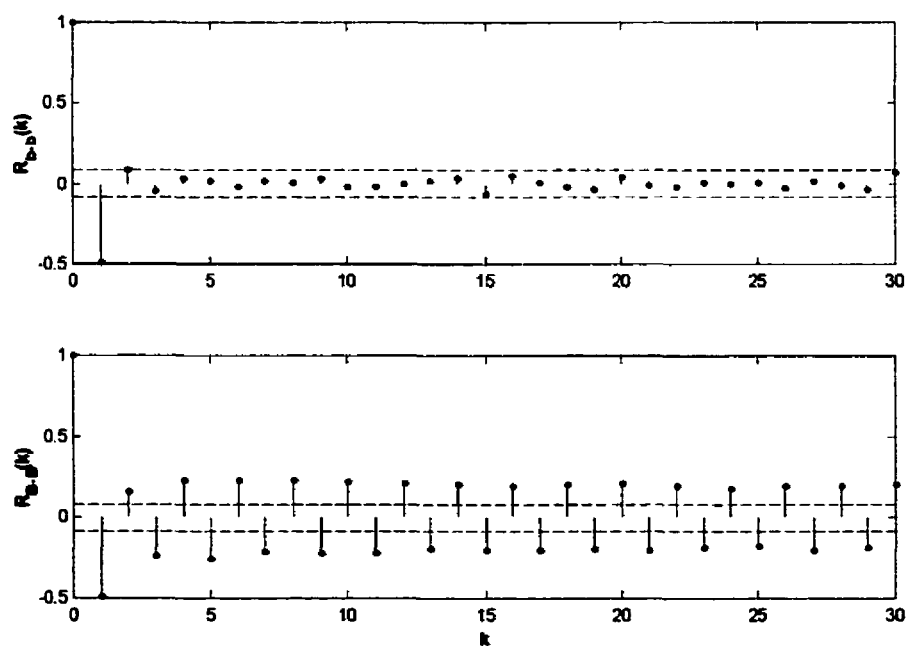


Figure 3.8 Fonction d'autocorrélation de ∇b et $\nabla b_{\text{blancheur}}$, deuxième série de données

Les conclusions sont aussi restées identiques, qu'importe si les données étaient centrées-réduites ou non, et qu'elles contenaient des points artéfacts ou non.

3.3.2 - Intercorrélation

Le prochain objectif est l'identification du retard. À cette fin, des données provenant d'une production de grade 212 ont été utilisées, contenant des perturbations déterministes alors que les autres variables étaient à peu près constantes. Pour le présent système, le retard peut en partie être expliqué par la longueur de la feuille, le scrutateur étant situé après la section des coucheuses. L'autre partie de ce retard est due au transport de la pâte dans la tuyauterie reliant le cuvier de mélange à la caisse d'arrivée, lorsqu'un changement de débit d'encre est effectué. Le retard inhérent au procédé est cependant variable, changeant selon la vitesse machine et le débit de pâte. Or, pour un grade donné, la vitesse machine change rarement, ce sont habituellement les débits de pâte qui varient, bien que rarement là encore. Il existe plusieurs façons d'estimer le retard total. Connaissant la vitesse machine et la longueur de la feuille entre la caisse d'arrivée de la couche médiane et le scrutateur, on possède par le fait même une borne inférieure pour le retard. Cette borne est de plus ou moins une minute, dépendant du grade produit. L'intercorrélation peut donc être une bonne façon d'estimer la portion inconnue du retard. Cette fonction est décrite par :

$$r_{xy}(k) = \frac{1}{(n-1)s_x s_y} \sum_{j=0}^{n-|k|-1} \left(x_j - \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} x_i \right) \left(y_{j+k} - \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} y_i \right), \quad k \geq 0$$

Elle représente un décalage entre deux séries de n données. L'une des deux séries est décalée d'une période d'échantillonnage, et ainsi de suite. Il importe de dire que cette fonction n'est pas symétrique, c'est pourquoi les résultats sont pertinents pour le cas $k \geq 0$. Dans ce cas, on utilise toujours les premiers éléments de la variable manipulée

(x , le débit de colorant) et on essaie de corréler les éléments de la variable contrôlée (y , une variable de l'espace couleur).

Afin de connaître le retard du procédé, des données provenant d'une plage contenant une perturbation déterministe ont été utilisées, alors que les autres variables étaient relativement stables. Premièrement, des plages de données contenant des changements de débits des colorants bleu et rouge ont été repérées. Le nombre de points sélectionnés a été choisi en fonction du temps de réponse des paramètres de couleur. Une plage de 100 points a donc été sélectionnée pour le colorant bleu, et une de 40 points pour le colorant rouge.

Les fonctions d'inter-corrélation ont été obtenues entre les débits de colorant rouge et bleu et les paramètres de couleur a et b (Figures 3.9 et 3.10)

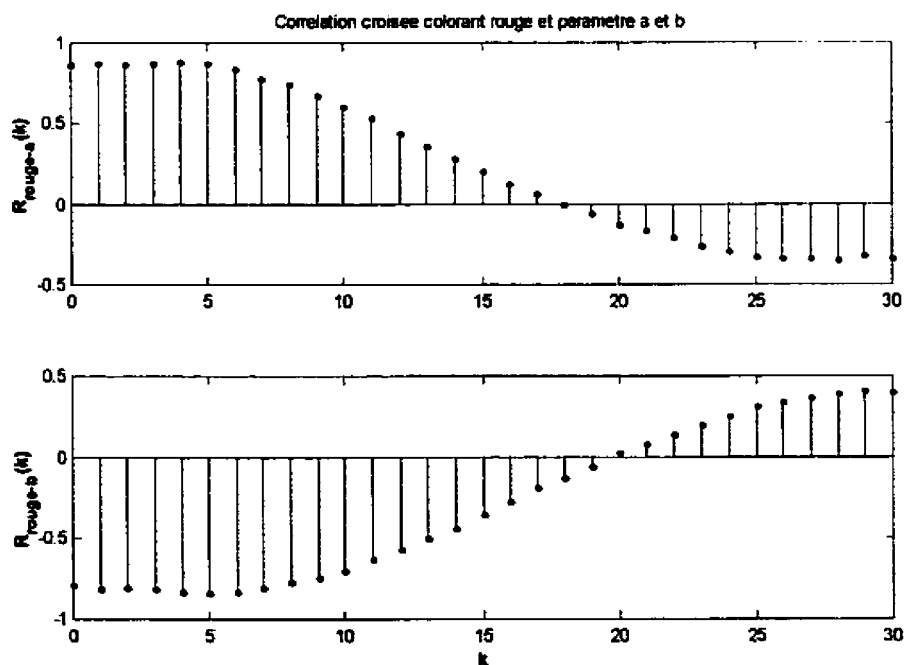


Figure 3.9 Intercorrélations entre le débit de rouge et les paramètres a et b , grade 212

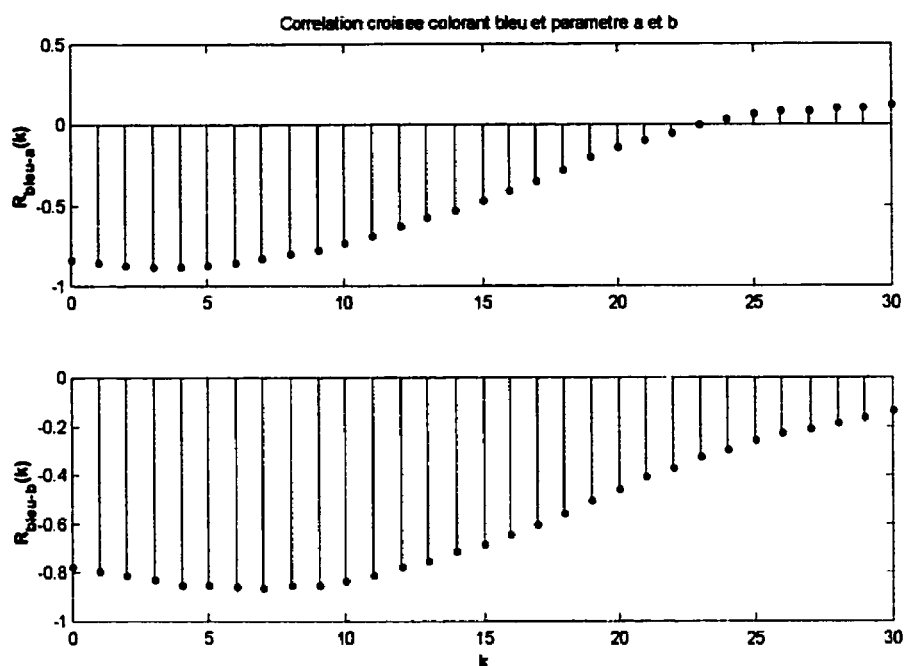


Figure 3.10 Intercorrélations entre le débit de bleu et les paramètres a et b, grade 212

Le colorant rouge est corrélé positivement avec le paramètre a et négativement avec le paramètre b, avec un retard total de 4 et 5 périodes respectivement (Figure 3.9). Les retards identifiés ont du sens, n'étant pas inférieurs au retard dû à la distance entre la caisse d'arrivée et le scrutateur en fin de machine. En ce qui a trait au signe de la corrélation, une augmentation du débit de colorant rouge se traduit par une augmentation du paramètre a et une diminution du paramètre b, et vice versa.

Il y a aussi corrélation négative entre le débit de colorant bleu et les paramètres a et b (Figure 3.10). En effet, le colorant bleu a tendance à « verdir » le paramètre a (qui est au départ négatif et qui va encore plus vers le négatif). De plus, une augmentation du débit de bleu occasionnant une accentuation de la teinte bleue, se traduisant par une augmentation dans le sens négatif de l'axe b. On voit aussi apparaître le retard total pour les paramètres a et b, respectivement 4 et 5 périodes après l'échelon (80 et 100 secondes). Donc, d'après ces résultats, le retard dû à la tuyauterie est du même ordre de grandeur que le retard dû à la toile de la machine.

En ce qui a trait à l'influence du colorant bleu sur la luminance et sur la blancheur, l'examen des données ne permet pas de déceler une relation entre les débits de colorants et ces deux paramètres. S'il y a un effet, sa dynamique est peut-être trop lente et voilée par le bruit de mesure. Elle ne se manifeste peut-être pas non plus dans la plage normal des variations des débits. L'analyse multidimensionnelle permettra peut-être de jeter un nouvel éclairage sur la relation entre ces variables.

3.3.3 - Fonctions de transfert

Des fonctions de transfert ont ensuite été identifiées. Les résultats sont présentés graphiquement aux figure 3.11 et 3.12.

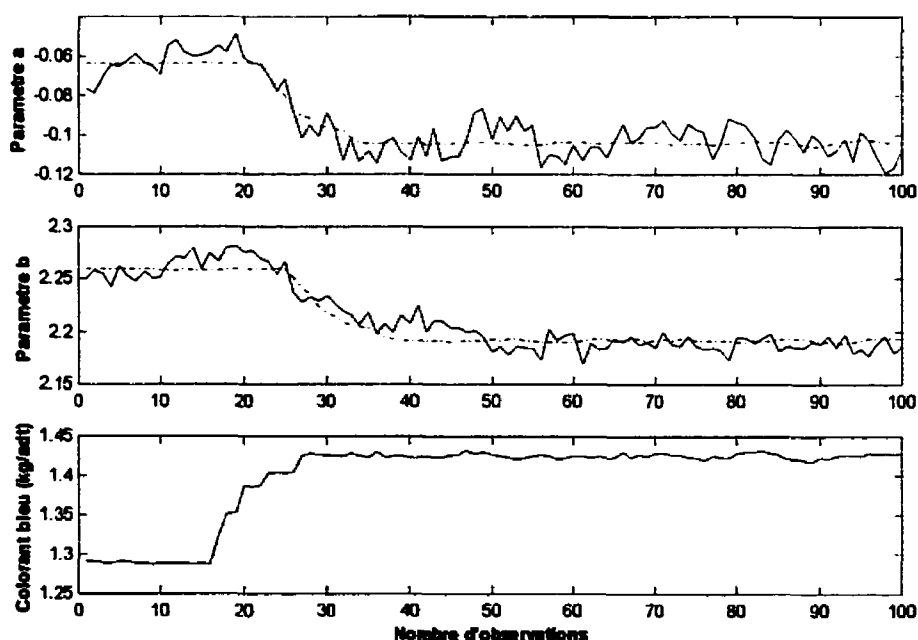


Figure 3.11 Réponse des paramètres a et b à un échelon du débit de colorant bleu

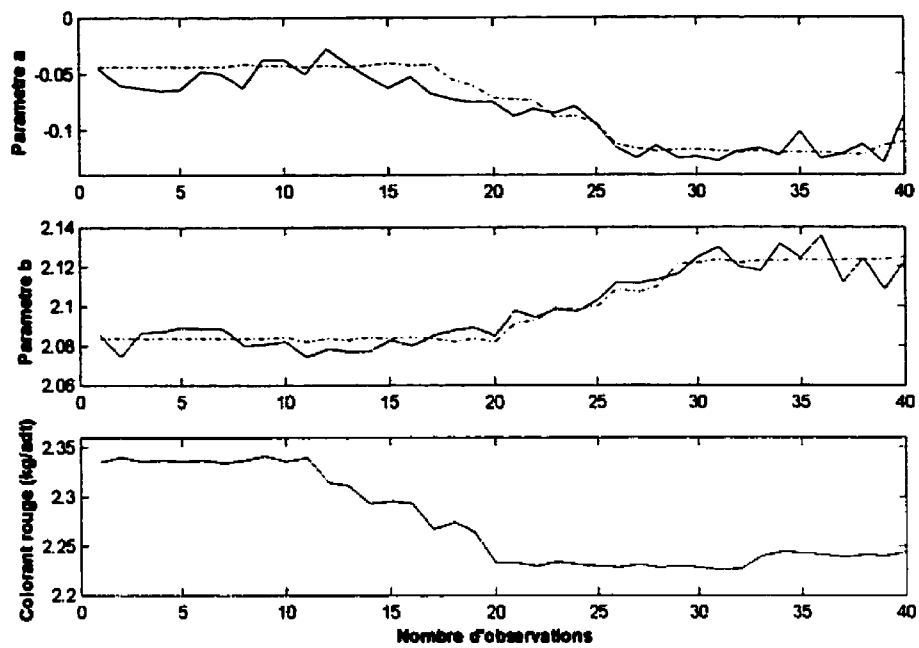


Figure 3.12 Réponse des paramètres a et b à un échelon du débit de colorant rouge

Les fonctions de transfert suivantes ont été identifiées :

$$\begin{bmatrix} \Delta a(z) \\ \Delta b(z) \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{0,56z^{-6}}{1-0,22z^{-1}} & \frac{-0,18z^{-6}}{1-0,41z^{-1}} \\ \frac{-0,35z^{-9}}{1-0,05z^{-1}} & \frac{-0,22z^{-9}}{1-0,55z^{-1}} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \text{rouge}(z) \\ \Delta \text{bleu}(z) \end{bmatrix}$$

ou, dans le domaine de Laplace,

$$\begin{bmatrix} \Delta a(s) \\ \Delta b(s) \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{0,72e^{-1,75s}}{0,23s+1} & \frac{-0,30e^{-1,75s}}{0,39s+1} \\ \frac{-0,37e^{-2,8s}}{0,12s+1} & \frac{-0,50e^{-2,8s}}{0,58s+1} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \text{rouge}(s) \\ \Delta \text{bleu}(s) \end{bmatrix}$$

Les gains sont exprimés en $\Delta a/\text{kg/adt}$ ou $\Delta b/\text{kg/adt}$ et, dans le domaine de Laplace, les constantes de temps et les retards sont en minutes. Si l'on regarde les fonctions de transfert trouvées dans le domaine discret, on réalise en regardant les termes en z^{-1} au dénominateur ne sont pas ceux auquel on s'attendrait. En effet, on devrait avoir un terme de valeur égale à environ 0,90. Ceci démontre que la période d'échantillonnage est trop longue pour le procédé en question. On peut aussi le constater en regardant les résultats graphiques. Afin d'avoir un échantillonnage adéquat, le temps de montée devrait comporter au moins 25 points. On peut voir que les plages de temps de montée comptent tout au plus une quinzaine de points. Ce fait, couplé à un faible rapport signal/bruit (variant entre 2 et 3) est probablement la cause de ces termes. De plus, en utilisant des séries comportant plus de points après la variation déterministe, on obtient un terme plus réaliste. Dans ce cas, cependant, l'exercice d'identification revient un peu à faire un modèle du bruit du procédé. Si l'on regarde les constantes de temps dans l'espace de Laplace, on voit que ces constantes de temps sont très courtes, alors que graphiquement, elles semblent plus longues. De plus, le fait de prendre une série de points plus ou moins longue fait en sorte que la constante de temps varie à l'intérieur d'un facteur 5. Il faut souligner que le calcul des constantes de temps dans le domaine continu à partir du domaine discret est le résultat d'un logarithme d'un paramètre compris entre 0 et 1. Ceci couplé avec le fait que les paramètres en z^{-1} sont imprécis, on obtient ainsi une très grande incertitude sur la constante de temps. Finalement, on remarque que les retards varient selon que l'on regarde la variation de a ou de b . Ceci peut-être dû à deux choses, soit le faible rapport signal/bruit et le fait que le phénomène est approximé par un système de premier ordre avec retard. De meilleures conditions d'expériences auraient permis d'obtenir de meilleurs paramètres, notamment le retard et la constante de temps (période d'échantillonnage plus courte, rapport signal/bruit plus grand, excitation persistante).

Les gains trouvés ont été comparés à d'autres gains provenant d'autres grades. Ces gains sont du même ordre de grandeur que ceux identifiés à l'aide du grade 212 (Tableau 3.2).

Tableau 3.2 Gains de procédés, autres grades

Grade	K_{11} ($\Delta a/\text{kg/adt}$)	K_{12} ($\Delta a/\text{kg/adt}$)	K_{21} ($\Delta b/\text{kg/adt}$)	K_{22} ($\Delta b/\text{kg/adt}$)
207	-----	-0,42 (-0,30)	-----	-0,42 (0,50)
207 (2)	-----	-0,46 (-0,30)	-----	-0,66 (-0,50)
6209	0,55 (0,72)	-----	-----	-----

Cependant, les gains identifiés dans cette recherche ne concordent pas avec ceux identifiés dans les travaux effectués précédemment par Cabos (1998). En effet, les gains quantifiant l'effet du colorant bleu sur le paramètre b sont de l'ordre de $-21.7 \Delta b/\text{kg/adt}$. Il faut cependant préciser que les concentrations de colorant bleu utilisées dans le présent travail ne sont pas les mêmes que celles utilisées par l'usine. Un facteur de conversion est probablement à l'origine de cette incompatibilité, mais cela n'a pu être confirmé par le personnel de l'usine. Un facteur de compatibilité ne devrait pas influencer les gains. De plus, Cabos (1998) n'a pas conclu à une influence significative du colorant rouge sur le paramètre b , alors que les gains du paramètre b identifiés à l'aide des données d'usine sont comparables. Sachant que les expériences de Cabos ont été effectuées dans des conditions contrôlées, l'identification à l'aide de données industrielles devrait être reprise à l'aide d'une perturbation déterministe permettant d'obtenir un rapport signal/bruit supérieur à celui prévalent dans les données utilisées.

3.4 - MODÉLISATION ET IDENTIFICATION PLS

La majorité des calculs a été effectuée à l'aide de Matlab, version 5.3 (The Mathworks) et du PLS *toolbox*, version 2.01f (Eigenvector Research, Inc.). Le logiciel Simca-P 3.0

(Umetrics) a quant à lui été utilisé pour la validation de certains programmes écrits en Matlab et pour la validation du nombre de variables latentes significatives. Les programmes ont aussi été validés à l'aide des données de Linnerud (voir, par exemple, Jackson, 1991), d'après le résultats présentés dans Tenenhaus (1998).

3.4.1 - Modélisation statique

La première partie de l'étude a été effectuée de façon statique, en ne considérant pas le fait que les données étaient dynamiques. Ceci a permis d'avoir un aperçu des relations entre les variables. Deux séries de données ont été analysées, pour le grade 607, provenant de la même production, mais de deux fichiers différents. Ces données ont été scindées en deux, pour fins de prédiction. Le grade 212 n'a pas été analysé, le fichier utilisé pour l'identification des fonctions de transfert (section 3.2.3) ne comprenant pas les variables 17 à 23. Pour les données étudiées, la vitesse n'a pas été utilisée, étant constante. De plus, la sauce de pré-couchage n'étant pas utilisée pour ce grade, elle ne figure pas dans l'analyse.

La première série de données analysée contenait 3639 points, après avoir retranché de données considérées comme des artéfacts, provenant de perturbations dans le procédé de couchage. Pour cette première série de données, 4 variables latentes étaient nécessaires afin de bien décrire les données (Tableau 3.2). Ce modèle explique 62,9% de la variation de X et 71,8% de la variation de Y . Selon ces résultats, le modèle devrait avoir une bonne capacité de prédiction, ayant un Q^2 supérieur à 0.70. On peut clairement voir, sur le graphique des scores t_1 vs t_2 (Figure 3.13), la façon dont les variables de procédé de la matrice X se déplacent dans les deux premières dimensions, ce qui est un des avantages de la méthodes PLS pour la surveillance d'un procédé. Un intervalle de confiance à 95%, représenté sous forme d'ellipse de Hotelling, permet de voir un point significativement en dehors d'une opération normale. Ce type de

graphique résume donc plus facilement l'information qu'apporteraient plusieurs graphiques affichant une seule variable.

Tableau 3.2 Résultats de modélisation, première série de données, régression PLS statique

Var. lat.	R_x^2	$(R_x^2)_{cum}$	R_y^2	$(R_y^2)_{cum}$	Q^2	$(Q^2)_{cum}$
1	0,314	0,314	0,467	0,467	0,453	0,453
2	0,170	0,484	0,136	0,604	0,261	0,595
3	0,066	0,550	0,085	0,689	0,202	0,677
4	0,079	0,629	0,029	0,718	0,073	0,701

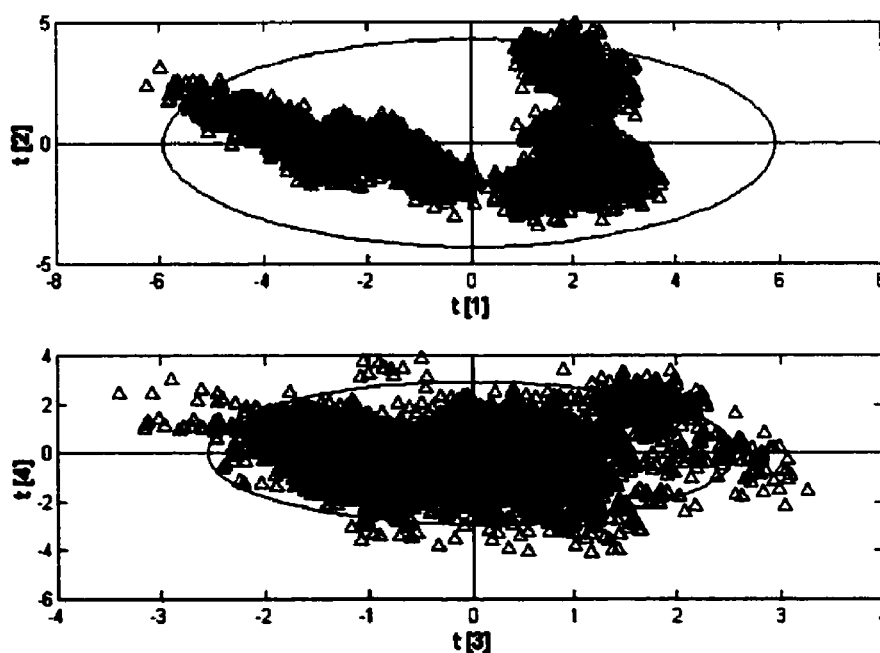


Figure 3.13 Scores des 4 premières dimensions, première série de données

On peut aussi voir aussi les écarts par rapport au modèle en suivant l'erreur de prédiction au carré. (Figure 3.14). Une grande valeur de SPE_x ou SPE_y indique qu'une des données dévie significativement de l'hyperplan du modèle. On peut voir sur cette figure que les déviations sont acceptables. Le présent modèle ne montre pas de déviations soutenues dans les indices SPE_x . Dans le cas de SPE_y , certaines déviations

sont soutenues, mais l'indice retourne toujours à une valeur inférieure ensuite. Cependant, la limite de confiance n'a pu être calculée. On peut aussi analyser les contributions de chaque variable pour un point possédant une grande distance au modèle, approche développée par Miller *et al.* (1993).

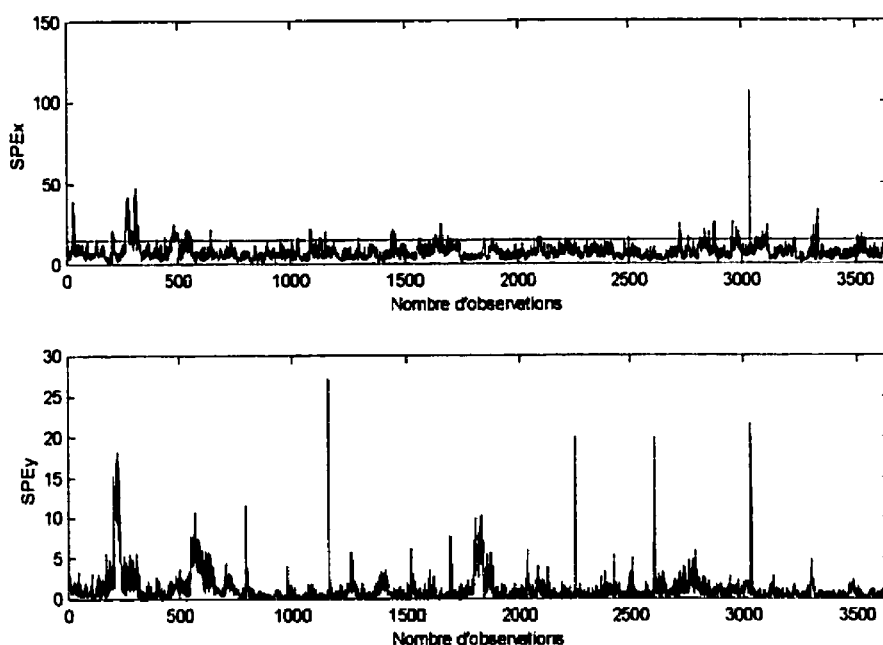


Figure 3.14 Indices SPE_x et SPE_y , première série de données, première série de données

Une fois le modèle obtenu, son interprétation est une étape importante et la régression PLS permet l'examen de la structure interne du modèle. Ainsi, l'affichage des coefficients de W^* et de Q est très utile pour voir l'influence des variables X sur Y , en regardant les w^* , représentant la corrélation entre les X et les scores U (Y , indirectement) (Figures 3.15 et 3.16). On peut ainsi essayer d'identifier une ou plusieurs variables expliquant chaque dimension.

Certaines relations physiques sont bien démontrées à l'aide de ces figures. Ainsi, on voit que les grammages et les débits de pâte des trois couches se superposent respectivement, ce qui respecte la physique du système. Les rétentions et les

consistances des eaux blanches sont normalement opposées, ce qui respecte encore la physique du système. Ces relations sont d'autant plus respectées lorsque les variations sont grandes; le modèle peut ainsi mieux en tenir compte. Pour la première dimension, de grands w^* sont donnés aux débits de colorant bleu et rouge (bluepv et redpv), au débit, au grammage et à la consistance de la couche médiane (fplyflow, plywtact2 et fillcons2) ainsi qu'à la rétention et à la consistance de l'eau blanche de la couche inférieure (backret et backwwcons). En ce qui concerne les débits de colorants (redpv et bluepv), ils peuvent en effet expliquer des effets de variation de couleur. De plus, les débits de colorants sont bien expliqués par la première dimension PLS (figure 3.17). Or, seulement 17% du paramètre b est expliqué par la première dimension, laissant croire que d'autres variables, peut-être absentes de l'analyse, influencent ce dernier (Figure 3.18).

Les débits de colorant ne devraient pas cependant expliquer une variation de luminance et de blancheur. Ces dernières peuvent peut-être mieux être expliquées par une variation dans le débit de la couche médiane (fillplyflow), qui est dans le même voisinage sur les chartes de corrélation. En effet, lors de l'examen des données, des variations des débits de pâte semblaient avoir une influence sur la luminance et la blancheur. Ceci est peut-être confirmé par le fait que la variable plywtact2 possède un w^* moyennement élevé dans la première dimension, mais cela ne peut être confirmé. Les variations dans ces deux caractéristiques optiques semblent provenir d'autres variables n'étant pas disponibles pour la présente analyse, notamment le contenu en lignine résiduelle, par exemple. Les variations dans ces deux mêmes variables pourraient aussi être dues à des fluctuations dans l'application de la sauce de couchage. Cependant, cette variable a un poids négligeable dans la première dimension et un poids moyen dans la deuxième. Finalement, on constate que la consistance de l'eau blanche de la couche médiane (fillwwcons) semble avoir une bonne influence sur la première dimension, mais cette variable ne devrait pas avoir une influence importante sur la couleur. En effet, le scrutateur n'examinant que la couche supérieure, il serait

surprenant que la couche inférieure influence l'apparence du carton si significativement, considérant que ces effets doivent « traverser » la couche médiane. C'est plutôt le contraire qui se produit, les variations de la couche médiane étant visibles au travers des couches inférieures et supérieures. Enfin, les deux dernières dimensions du modèle montrent que les variables expliquant le reste de la variance pour les paramètres de couleur a et b sont encore le colorant bleu et les débits de pâte des couches médianes et supérieures

La figure 3.15 montre aussi une étrange corrélation négative entre le débit de rouge et le paramètre a. En effet, selon le signe du gain de la fonction de transfert reliant ces deux variables (voir section 3.3.3), on devrait s'attendre à ce que la corrélation soit positive, ce qui n'est pas le cas. En examinant les deux autres variables latentes, la relation entre le colorant rouge et le paramètre a est mieux respectée. L'examen des données utilisées pour la modélisation a montré que lors d'une grande variation du paramètre a, les deux colorants ont été changés en même temps (comme c'est souvent le cas lors de l'opération du procédé). Or, le débit de bleu qui a été varié le plus, alors que le débit de rouge a été augmenté mais ensuite ramené à sa valeur initiale.. C'est peut-être pour cela que le modèle se rattache plutôt à la variation de bleu afin d'établir sa structure.

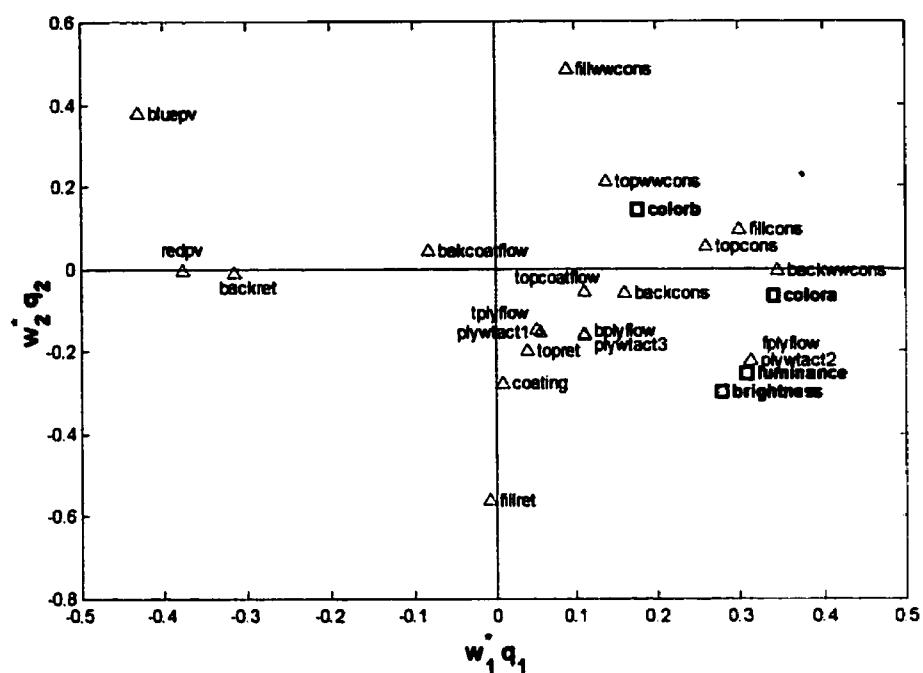


Figure 3.15 Charte de corrélation des variables latentes 1 et 2, première série de données

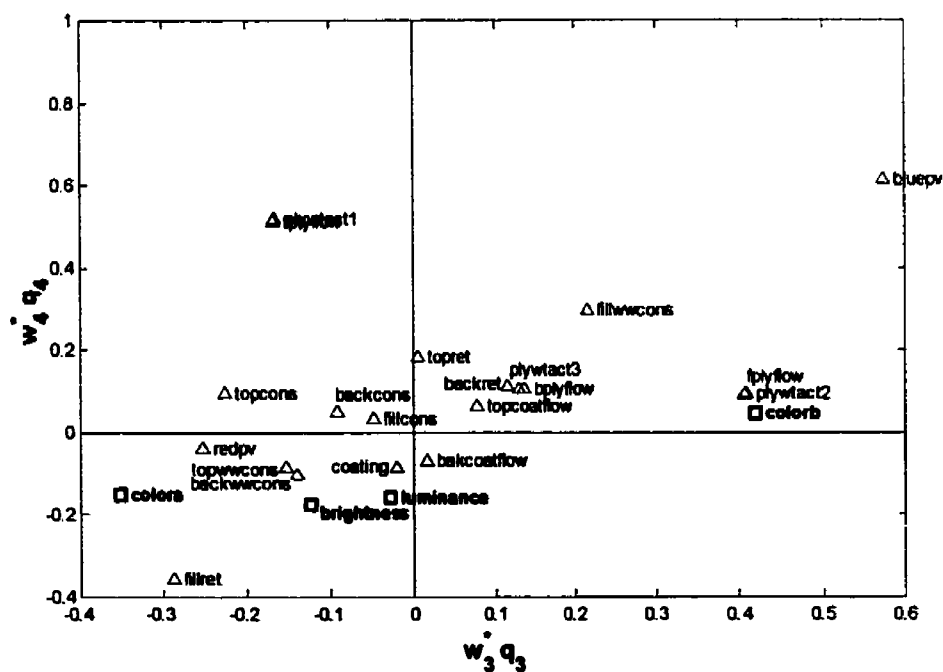


Figure 3.16 Charte de corrélation des variables latentes 3 et 4, première série de données

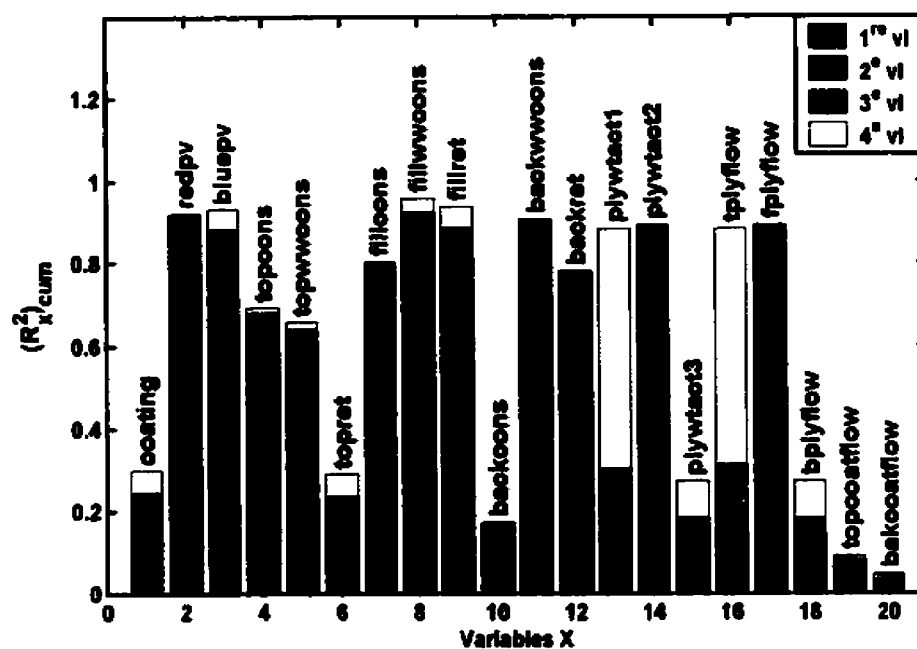


Figure 3.17 Variance de X expliquée par 4 variables latentes, première série de données

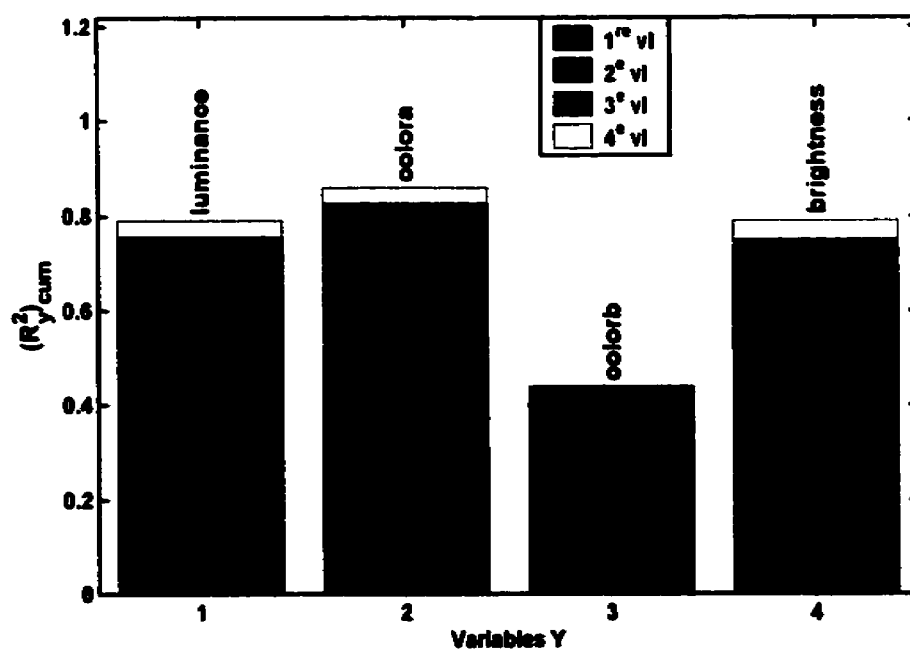


Figure 3.18 Variance de Y expliquée par 4 variables latentes, première série de données

Finalement, on voit à l'aide des indices VIP quelles sont les variables **X** importantes dans la projection sur **Y** (Figure 3.19), soit le débit des colorants bleu (bluepv) et rouge (redpv), le débit de pâte de la couche médiane (fpvflow), la consistance de l'eau blanche de la couche inférieure et médiane (backwwcons et fillwwcons), la rétention de la couche inférieure et médiane (backret et fillret) et la consistance de la couche supérieure (topcons).

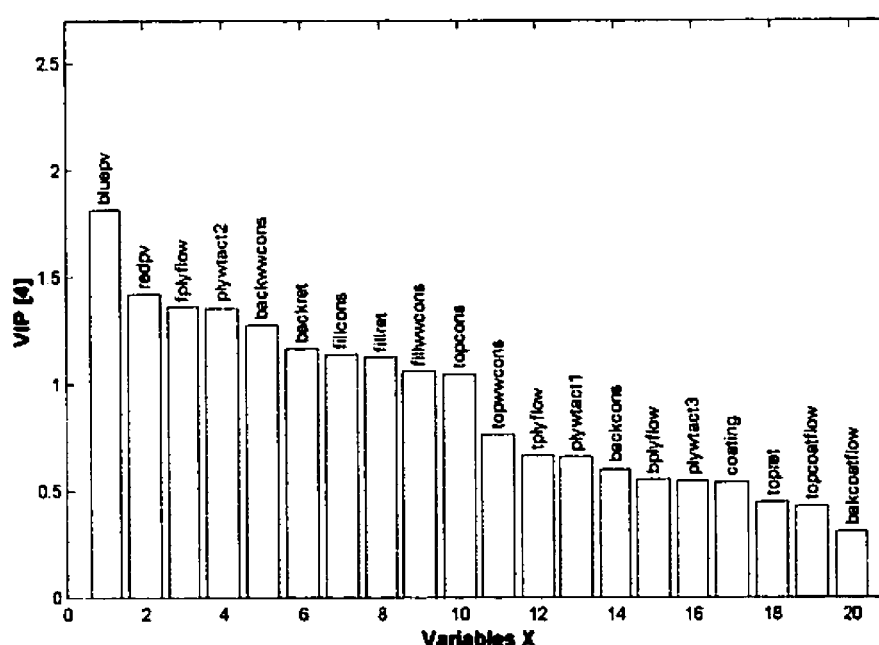


Figure 3.19 Indices VIP, première série de données

La figure 3.20 présente la prédiction des données d'étalonnage. On peut voir que les paramètres *L*, *a* et *b* ainsi que la blancheur sont bien modélisés à l'aide de 4 variables latentes et que les tendances sont respectées. En ce qui a trait à la prédiction à l'aide d'autres données, il est surtout important de s'attarder à la tendance. En effet, ce qui nous intéresse surtout, c'est de connaître la variation entre un moment présent et un moment futur. Malgré cela, les résultats sont moins convaincants en prédiction qu'en modélisation (Figure 3.21). En effet, bien que certaines tendances soient bien respectées, le modèle s'égare parfois. La luminance et la blancheur sont bien prédites,

sauf vers la fin des données. Les tendances du paramètre b sont respectées dans certains cas, mais le modèle ne rend pas les soubresauts présents dans les données, inversant même les tendances quelquefois. Finalement, dans le cas du paramètre a , le modèle tient la tendance au début, mais inverse ensuite celle-ci pour le restant de la série de données.

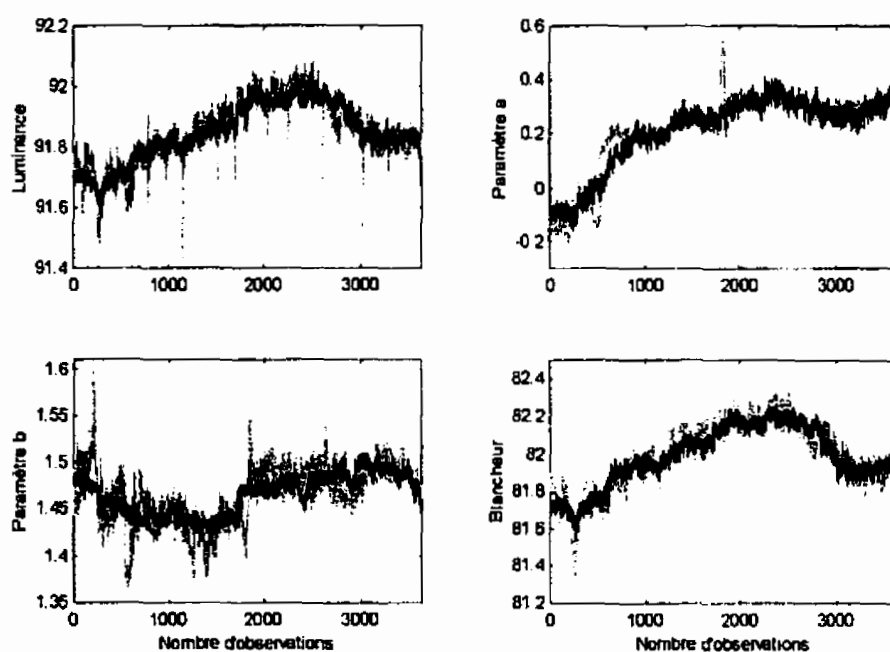


Figure 3.20 Prédiction des données d'étalonnage, première série de données

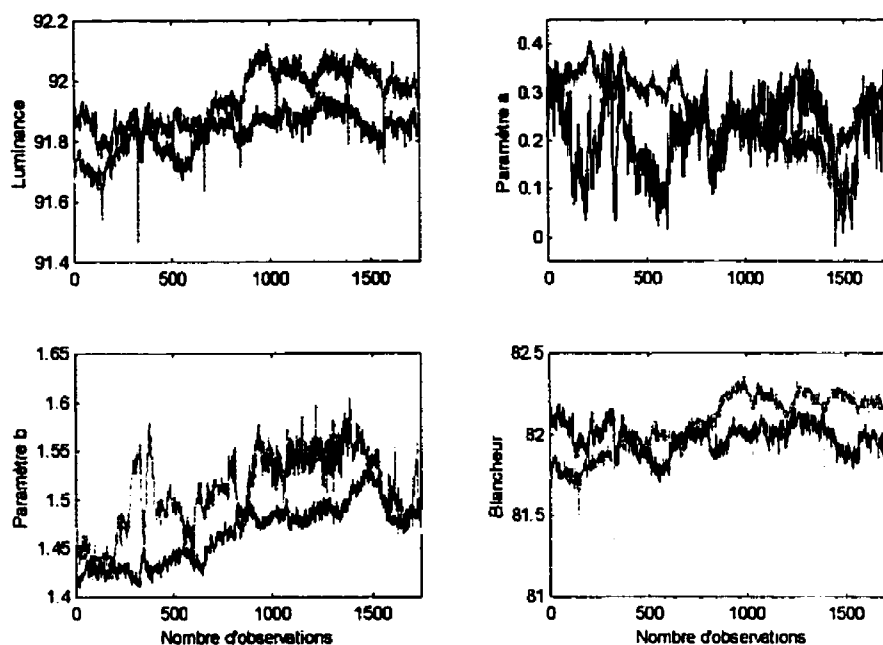


Figure 3.21 Prédiction de la deuxième série de données avec paramètres du premier modèle

Plusieurs raisons peuvent expliquer le pourquoi de la qualité relative des prédictions, notamment une plage d'opération différente d'une série de données à l'autre. Ceci pourrait être montré par une analyse de la statistique T^2 . De plus, en examinant, les indices SPE_x en prédiction, on peut voir si la structure du modèle est respectée (Figure 3.22). L'indice T^2 n'est pas dépassé, ce qui montre que les données de prédiction sont dans les mêmes plages d'opération. Cependant, l'indice SPE_x dépasse significativement, en début d'opération, la limite établie par les données d'étalonnage, ce qui porte à croire que la structure des données utilisées pour la prédiction est différente. Ceci peut en partie expliquer le pourquoi des erreurs de prédiction. Une analyse PLS des données de prédiction a donné un modèle contenant deux variables latentes et présentant des différences au niveau de la structure interne (voir annexe). De plus, si l'on voit les variables latentes comme étant des événements indépendants, il est possible que les données de prédiction n'ont pas été soumises aux mêmes nombre et type de variations, donc, que leur structure de corrélation ne soit pas la même. Dans ce cas, il est normal que les prédictions ne soient pas satisfaisantes (Kresta *et al.*, 1994).

Les données doivent aussi provenir d'une opération normale, afin de bien prédire des événements qui sont anormaux, ce qui n'a peut-être pas été le cas ici. Il se peut aussi que les données aient subies l'influence de d'autres variables qui n'étaient pas considérées dans l'analyse. Finalement, il faut préciser que les prédictions ne sont pas aux mêmes valeurs que les données réelles et que certaines sont plus bruitées que d'autres. Ceci est dû au fait que les moyennes et les écart-types utilisés pour la remise à l'échelle des données de prédiction sont celles des données d'étalonnage. Il y a donc des différences entre les données au niveau de ces deux caractéristiques.

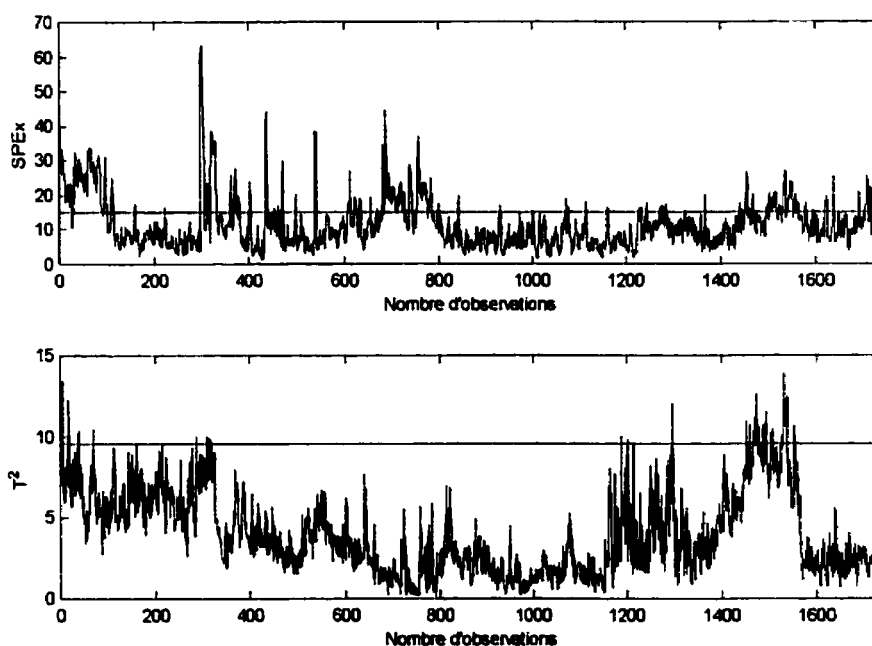


Figure 3.22 Indices SPE_x et T^2 en prédiction, deuxième série de données

Les résultats de modélisation de la seconde série de données sont présentés en annexe. Dans ce second cas, la prédiction d'autres données présente des problèmes similaires aux prédictions précédentes (Figure 3.23). La prédiction de la luminance et de la blancheur est relativement bonne, mais en fin de production, le modèle a de la difficulté à inverser la tendance. Pour ce qui est du paramètre a , c'est encore une fois ce dernier

qui est le moins bien prédit. Les tendances sont en effet inversées. Quant au paramètre b, la tendance ascendante est bien prédite, mais la descente ne l'est pas toujours.

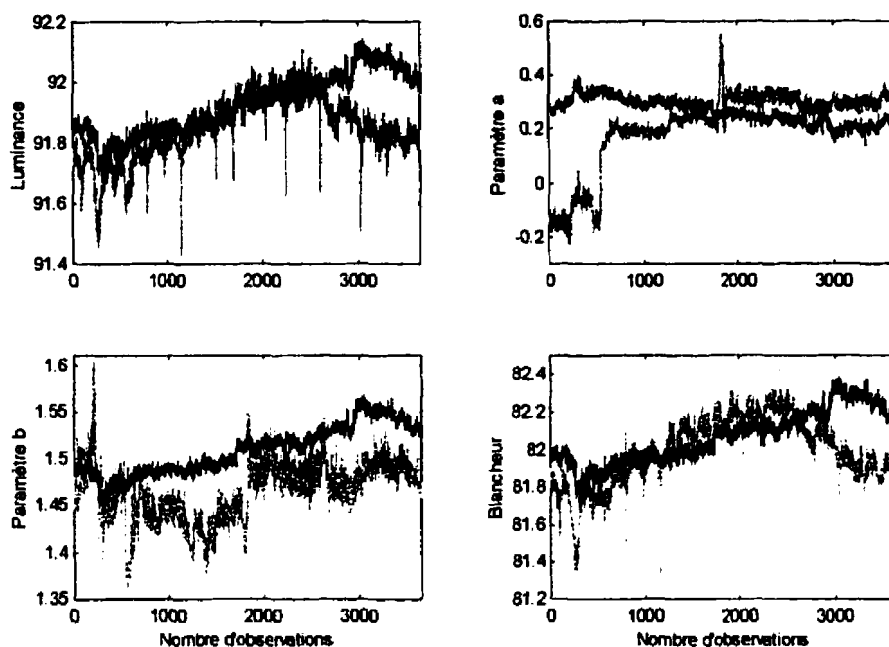


Figure 3.23 Prédiction de la première série de données, avec paramètres du deuxième modèle (gris : données, noir : modèle)

Des modèles ont aussi été générés sans la présence de la couche inférieure. En effet, on peut supposer que les variations de la couche inférieure ne sont pas vues par le scrutateur, donc, qu'elles n'ont pas d'effet sur ce que l'on voit en regardant le carton par le dessus. Une comparaison avec le modèle contenant la couche inférieure démontre que le retrait de ces variables ne change rien au pourcentage de variance expliquée des variables de couleur, pour le même nombre de variables latentes. Les données de X sont cependant mieux expliquées, ce qui est logique, étant donné qu'il y a moins de variables de procédés. Les chartes de corrélation ont la même allure, il n'y a que les coefficients des variables retranchées qui n'y sont plus. Le résultat en prédiction est semblable aux cas dans lesquels la couche arrière est présente.

3.4.2 - Modélisation PLS auto-régressive

Comme base de comparaison, le procédé a aussi été modélisé en profitant de la dynamique (auto-régressive) des données. La matrice des X a été augmentée à l'aide des valeurs au temps $(k-1)$ des données de couleur et de la blancheur (Wikström *et al.*, 1998b). On peut ensuite analyser les données en utilisant les mêmes indices qu'auparavant (R^2 , Q^2 , VIP, etc...). Pour la première série de données, il faut plus de variables latentes pour obtenir le modèle, comparativement à l'approche statique. Ce résultat est quelque peu surprenant, étant donné que les données de X sont aussi bien expliquées avec 4 variables latentes que pour le modèle statique.

Tableau 3.3 Résultats de modélisation, première série de données, régression PLS auto-régressive

Var. lat.	R_x^2	$(R_x^2)_{cum}$	R_y^2	$(R_y^2)_{cum}$	Q^2	$(Q^2)_{cum}$
1	0.335	0.335	0.556	0.556	0.538	0.538
2	0.164	0.499	0.154	0.710	0.339	0.695
3	0.081	0.580	0.122	0.832	0.403	0.818
4	0.069	0.649	0.018	0.850	0.117	0.839
5	0.035	0.684	0.025	0.875	0.094	0.854
6	0.042	0.743	0.013	0.888	0.077	0.865
7	0.024	0.773	0.014	0.902	0.093	0.878

Ce modèle donne une meilleure explication de Y , ce qui se reflète aussi sur les prédictions à l'aide des données d'étalonnage (Figure 3.27). Un examen des chartes w^*q montre que les variables de couleur au temps $k-1$ dominent le modèle dans toutes les dimensions. Le modèle semble aussi avoir subi une légère rotation d'axe par rapport à l'approche statique (Figures 3.24 et 3.25). Cependant, hormis cela, on ne peut tirer plus d'information sur la structure du modèle. De plus, l'importance de ces données permet à d'autres données de moins se démarquer, comme par exemple, le colorant bleu. Les indices VIP indiquent que les variables au temps $k-1$ sont très importantes dans la projection sur Y (Figure 3.26).

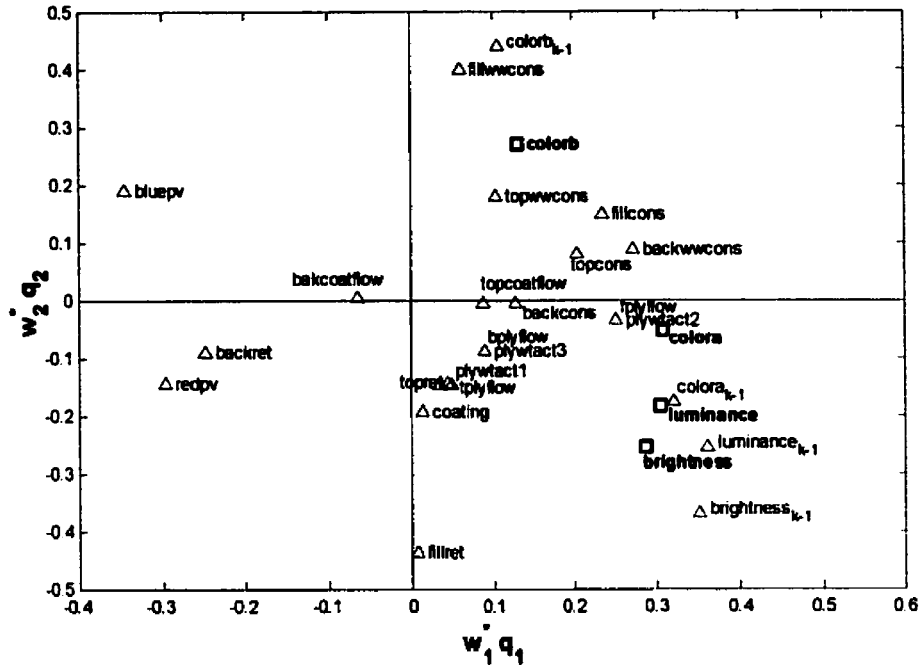


Figure 3.24 Charte de corrélation des variables latentes 1 et 2, première série de données

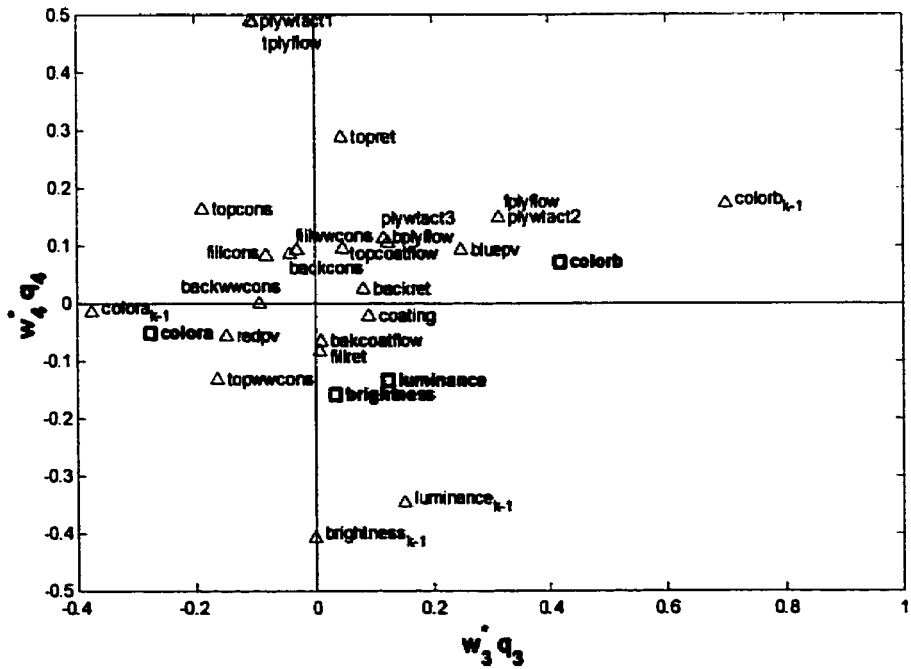


Figure 3.25 Charte de corrélation des variables latentes 3 et 4, première série de données

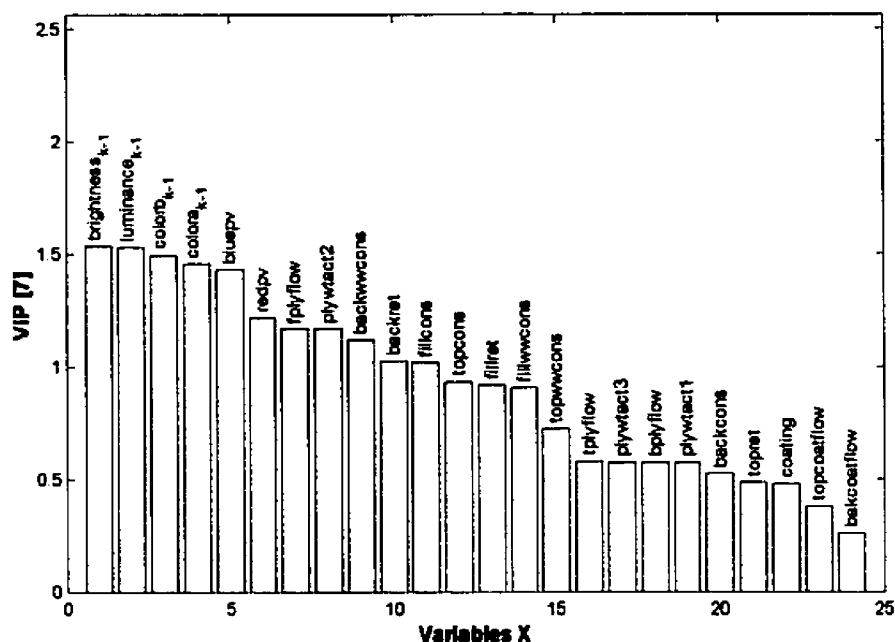


Figure 3.26 Indices VIP, première série de données, régression PLS auto-régressive

En ce qui a trait à la prédiction, les résultats sont bons. En effet, les tendances sont bien suivies et, contrairement à la régression PLS statique, la tendance n'est pas inversée, notamment pour le paramètre b . On peut s'attendre à une bonne performance étant donné, notamment, à la grande importance des variables de couleur et de blancheur au temps $k-1$. De plus, les indices VIP du modèle est sans équivoque quant à l'importance des variables au temps $k-1$. Le modèle possède donc une bonne base de prédiction.

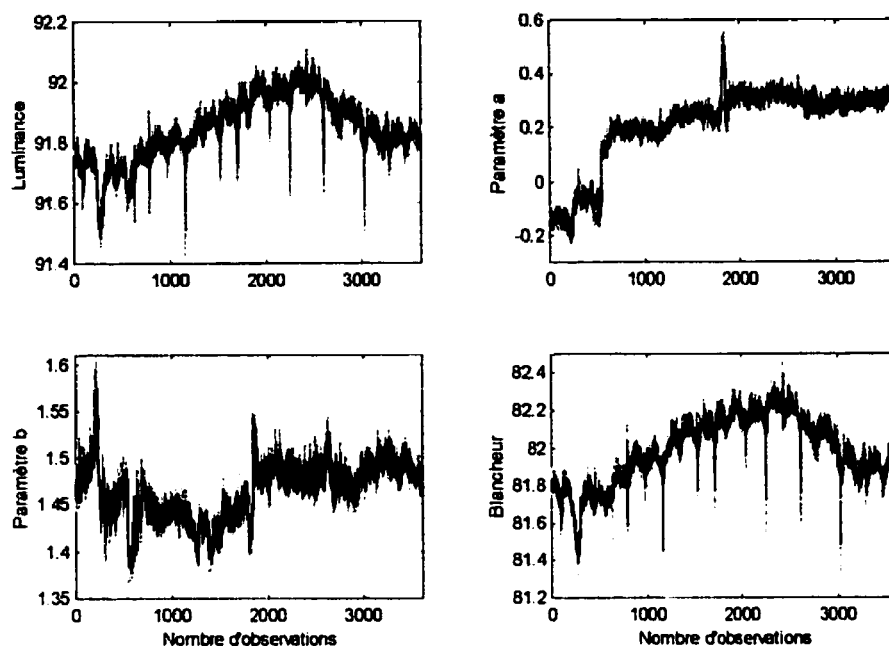


Figure 3.27 Prédiction des données d'étalonnage, première série de données, régression PLS auto-régressive (gris : données, noir : modèle)

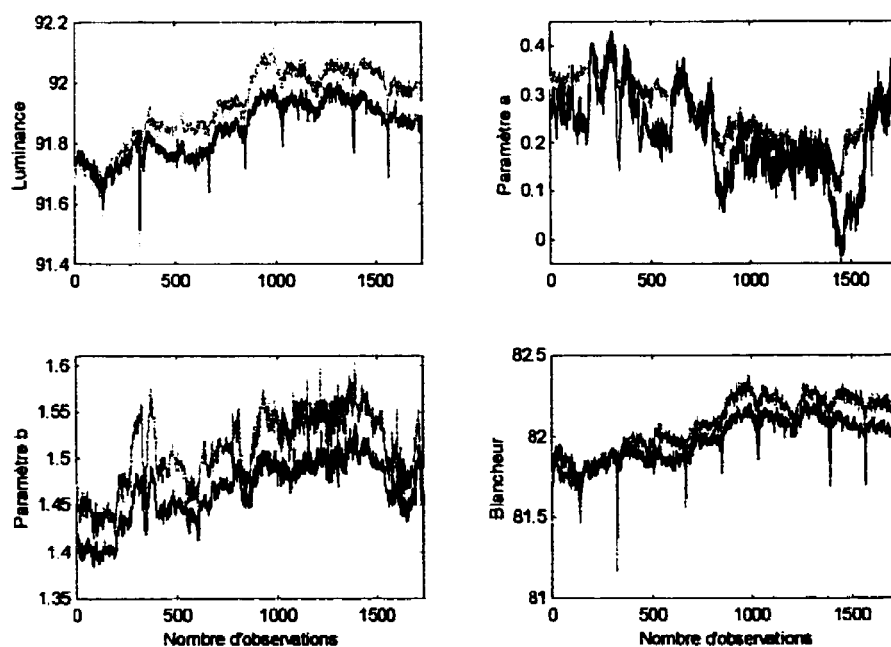


Figure 3.28 Prédiction des données de la deuxième série avec paramètres du premier modèle, régression PLS auto-régressive (gris : données, noir : modèle)

La prédiction a aussi été effectuée à l'aide des paramètres de la deuxième série de données. Les résultats sont présentés en annexe. La prédiction de la luminance et de la blancheur est bonne, sauf un peu moins en fin de la série de données. En ce qui a trait au paramètre b , les résultats sont excellents. Il n'y a que le paramètre a qui est un peu moins bien prédit. L'établissement d'un modèle sans la couche arrière a donné des résultats de prédiction semblables. Encore là, seul la prédiction du paramètre a s'est avéré moins bonne. Donc, globalement, la régression PLS auto-régressive donne de meilleurs prédictions pour les variables de couleur que la régression PLS statique, et ce, malgré que les données ne soient pas stationnaires.

3.4.3 - Régression PLS dynamique

La méthode PLS dynamique, présentée au chapitre précédent, a été utilisée pour l'identification. L'avantage de cette méthode réside dans sa capacité d'identifier des modèles dynamiques, en modifiant la relation interne reliant les t et les u . La présente étude ne comparera que les gains obtenus à l'aide des données du grade 607 à ceux obtenus à l'aide des données provenant du grade 212. Les fonctions de transfert reliant les variables de X aux variables de Y ne seront pas comparées, celles obtenues à l'aide de la méthode de Lakshminarayanan ayant un ordre au moins équivalent au nombre de variables latentes. La comparaison des gains donnera tout de même un bon aperçu de la performance de la méthode d'identification.

La première série de données du grade 607 a été analysée, en utilisant toutes les variables de procédé. Tout comme dans Lakshminarayanan *et al.* (1997), l'ordre maximal des numérateurs et des dénominateurs des fonctions de transfert internes est de 2 et le retard maximal permis est de 20 périodes d'échantillonnage. Toutes les variables latentes ont été utilisées, l'utilisation d'une partie occasionnant des erreurs

lors du passage de l'espace latent aux variables véritables. La validation croisée n'a donc pas été utilisée. Les gains suivants ont été obtenus :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \infty & \infty \\ \infty & \infty \end{bmatrix}$$

Les gains infinis sont certainement dus au fait que les données ne sont pas stationnaires, tel que vu à la section 3.2. L'algorithme essaie donc d'identifier des paramètres qui évoluent dans le temps. Donc, un des pré-requis de cette méthode semble est qu'il faut que les données soient stationnaires. Le résultat est cependant différent lorsque l'ordre maximal des numérateurs et dénominateurs des fonctions de transfert internes est de 1. Dans ce cas, le gain K_{12} est relativement bien identifié, mais pas les autres. Un gain est même de signe inversé (K_{22}) :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 0,03 & -0,23 \\ -0,07 & 0,03 \end{bmatrix}$$

L'identification a aussi été effectuée sur la deuxième série de données. Pour un ordre maximal de 2, un gain infini est obtenu pour K_{12} . Le gain K_{22} est quant à lui deux fois plus petit que le gain identifié avec les données du grade 212 :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 0,11 & \infty \\ -0,03 & -0,23 \end{bmatrix}$$

En restreignant l'ordre maximal à 1 pour les numérateurs et dénominateurs, trois gains infinis sont obtenus. On voit donc que la procédure d'identification, avec les données utilisée, est très sensible à l'ordre maximal des fonctions de transfert internes. En ce qui a trait au nombre de variables latentes, on a vu, dans l'exemple d'application, que les gains identifiés avec une partie des variables latentes, bien que pas exacts, donnent

tout de même une idée des gains véritables. Un coup d'œil au pourcentage de la variance expliquée des colorants bleu et rouge dans l'analyse PLS statique montre que ces deux variables sont tout de même expliquées au dessus de 90%. Donc, en utilisant seulement les 4 premières variables latentes, les résultats sont les suivants, pour la première série de données :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} -0,03 & -0,39 \\ -0,04 & 0,04 \end{bmatrix}$$

L'examen des gains montre que seul le gain K_{12} est dans le bon ordre de grandeur. Le gain K_{22} est même inversé de signe. Les résultats ne sont cependant pas cohérent avec d'autres nombres de variables latentes. Il faudrait donc trouver un critère permettant de dire que l'on a assez de variables latentes et que l'identification est réaliste.

Étant donnés les résultats décevants avec les données du grade 607, des essais d'identification sur des données du grade 212 ont aussi été effectuée. Bien que celles-ci comportaient moins de variables, l'identification a été tentée afin de savoir si la méthode pouvait identifier les gains obtenus par l'identification traditionnelle. Une simulation utilisant toutes les variables de procédé sur la plage complète des données, ainsi que toutes les variables latentes a donné des gains infinis. En utilisant la même plage que celle utilisée lors de l'identification des fonctions de transfert G_{12} et G_{22} (échelon sur le débit de colorant bleu), on obtient les résultats suivants :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \infty & -0,30 \\ -0,14 & -0,56 \end{bmatrix}$$

Donc, en ne regardant que les gains K_{12} et K_{22} , les résultats sont très satisfaisants, K_{12} étant exact et K_{22} ayant une erreur de 12%, ce qui est très acceptable. En utilisant que quatre variables latentes, on obtient :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 0,03 & -0,28 \\ 0,09 & -0,52 \end{bmatrix}$$

Encore une fois, en n'utilisant que quelques variables latentes, on voit que le gain est bien identifié. On profite ainsi du fait que le débit de colorant bleu est expliqué à 96%, alors que les paramètres a et b sont expliqués respectivement à 56% et 66%. Donc, en utilisant les résultats de la simulation de Wood & Berry, on peut voir que dans le cas présent, cette analyse se tient et les présents résultats montrent que la méthode peut fonctionner lorsque les variables de procédé sont suffisamment excitées.

Finalement, en utilisant la plage ayant servi à déterminer les fonctions de transfert G_{11} et G_{21} , suite à un changement de débit de colorant rouge, on obtient les gains suivants en utilisant la régression PLS dynamique, avec toutes les variables latentes :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 0,52 & -4,00 \\ 0,19 & 3,21 \end{bmatrix}$$

Les gains K_{11} et K_{21} ont le bon ordre de grandeur, bien que le gain K_{21} soit deux fois plus petit que celui déterminé de façon conventionnelle. En n'utilisant que 4 variables latentes, expliquant tout de même 87% du débit de rouge et 85% du paramètre de couleur a, on obtient :

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 0,03 & -0,41 \\ 0,06 & -1,37 \end{bmatrix}$$

On voit donc que dans ce cas-ci, le fait de prendre moins de variables latentes donne des résultats moins convaincants que pour l'échelon sur le débit de bleu.

Les simulations et les résultats obtenus ont soulevé quelques questions. Premièrement, on peut se demander si la méthode PLS dynamique est à propos pour identifier des modèles à l'aide d'un grand nombre de variables latentes. En effet, si l'on utilise toutes les variables latentes, on obtient un système d'ordre au minimum égal au nombre de variables latentes. La fonction de transfert reliant une entrée et une sortie réelle sera donc de degré très élevé, pour rien. On peut alors réduire le nombre de variables latentes, mais il faut au moins que les variables d'entrée soient bien décrites individuellement. De plus, lors de l'identification, il faudrait que les variables soient excitées, de façon à avoir des coefficients représentatifs du système. De plus, une variable possédant un faible w^* devrait être retranché de l'analyse, et un nouveau modèle devrait être obtenu. Ceci pourrait éviter que le modèle ne tienne pas la route. Une bonne expérience serait nécessaire afin d'obtenir de bonnes données, et ayant des relations de cause à effet. De plus, des perturbations déterministes amélioreraient encore plus la colinéarité des t et des u , ce qui pourrait réduire l'erreur d'approximation entre les u réels et ceux modélisés à l'aide d'une fonction de transfert. La figure 3.29 illustre l'approximation en question. Comme on a pu le voir avec le système de la colonne à distiller de Wood & Berry, l'erreur entre les scores u_1 réels et approximés n'est pas très grande (Figures 2.5 et 2.6). Donc, des perturbations déterministes amélioreraient peut-être l'obtention des fonctions de transfert internes pour les premières dimensions, à tout le moins. De plus, les coefficients de Q et W^* auraient un meilleur sens physique. Car pour l'instant, les coefficients de Q et W^* sont sensiblement les mêmes que dans la cas statique (Figures 3.30 et 3.31). Donc, la structure du modèle est toujours un peu fautive, et repose sur des coefficients qui semblent inappropriés pour l'établissement d'un modèle causal.

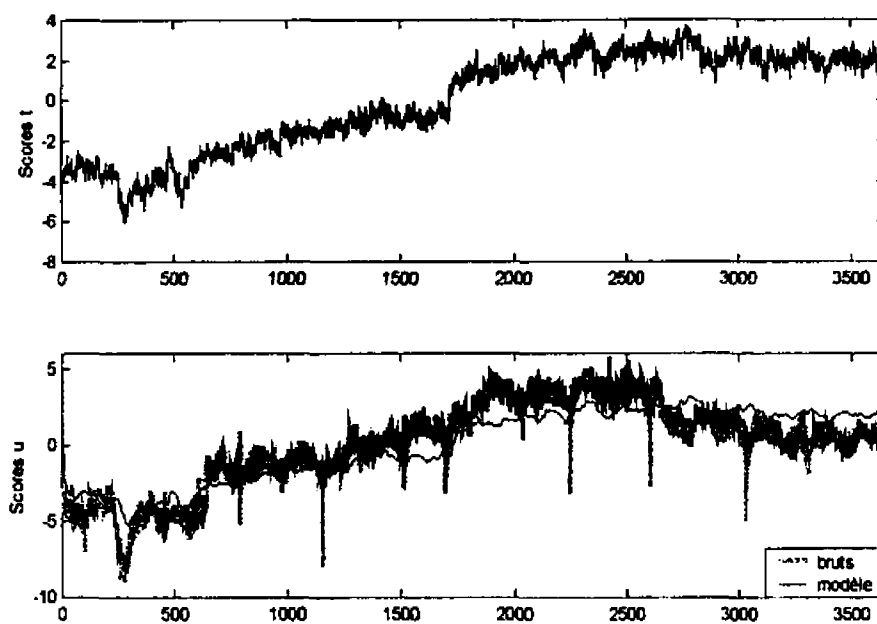


Figure 3.29 Différence entre les scores u bruts et les scores u obtenus de la fonction de transfert interne, première série de données, première variable latente

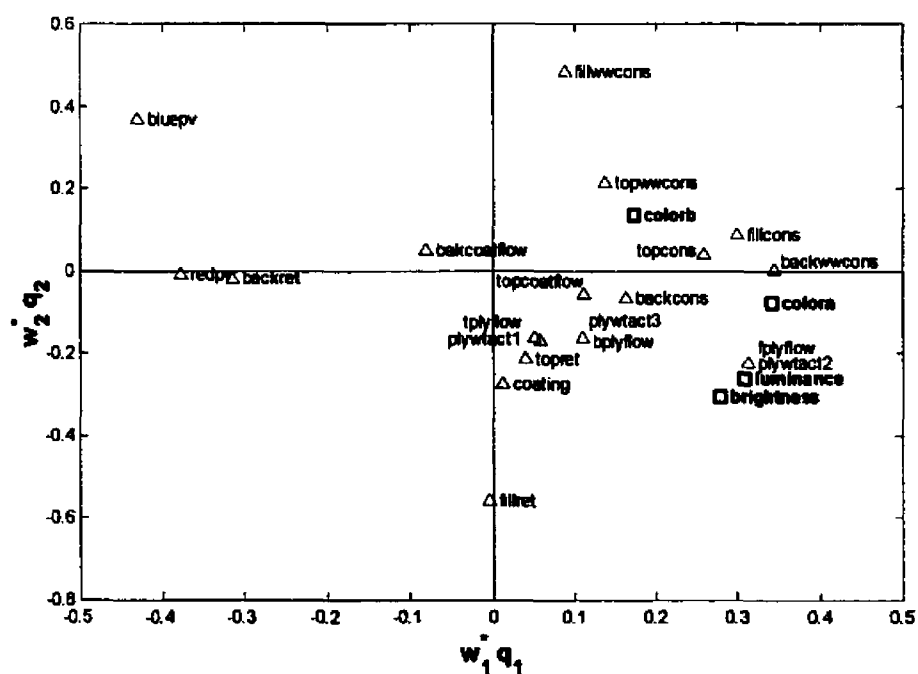


Figure 3.30 Charte de corrélation, première série de données, régression PLS dynamique

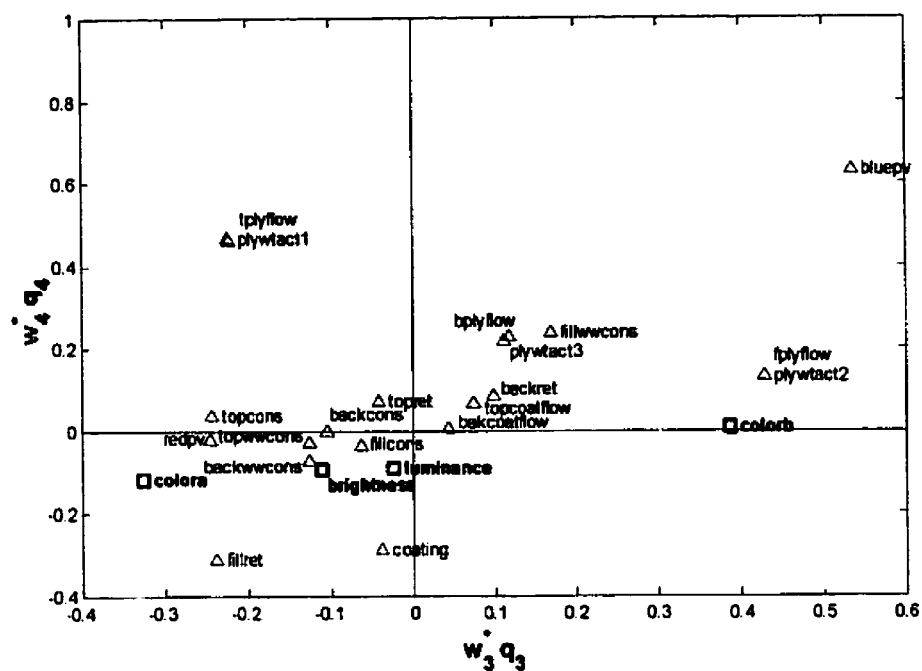


Figure 3.31 Charte de corrélation, première série de données, régression PLS dynamique

IV - CONCLUSION

Ce projet visait à obtenir un modèle pour l'application d'une éventuelle stratégie de contrôle automatique. La méthode PLS dynamique était la méthode choisie pour l'obtention de ce modèle. Les données de procédé ont premièrement été analysées de façon à connaître certaines de leurs caractéristiques dynamiques. Cette analyse a permis d'affirmer que les données de couleur n'étaient pas stationnaires. De plus, des fonctions de transfert ont été identifiées de façon conventionnelle.

Suite à cette identification conventionnelle, les données du procédé de couleur ont été analysées à l'aide de la régression PLS. La première étude s'est faite en utilisant la méthode PLS conventionnelle, afin d'avoir une idée des relations entre les variables de procédé, et de vérifier certaines relations connues. Des prédictions ont été réalisées à l'aide d'autres données, et les résultats se sont révélés décevants. En effet, la tendance est quelquefois inversée. À titre de comparaison, les données ont été analysées à l'aide de la régression PLS auto-régressive, en tenant compte du fait que les données étaient dynamiques. Dans ce cas, les prédictions se sont avérées meilleures qu'avec la méthode conventionnelle. Seul la prédiction du paramètre a n'a pas été améliorée à l'aide de cette méthode. Il semble que le succès de cette méthode en prédiction repose sur des poids élevés accordés par le modèle aux variables de couleur incorporées dans la matrice X .

Finalement, l'identification de modèles dynamiques par la méthode PLS dynamique a été tentée. Cette méthode s'est toutefois avérée peu performante, étant donnée notamment la nature non-stationnaire des données disponible pour l'analyse. Il semble que la méthode nécessite des données stationnaires. De plus, avec les données utilisées, la régression PLS dynamique s'est avérée sensible au choix de l'ordre des numérateurs et dénominateurs des fonctions de transfert internes.

Suite à ce projet, les recommandations suivantes peuvent être faites :

- Il serait intéressant de procéder à une identification conventionnelles de fonctions de transfert dans de meilleures conditions d'acquisition de données et à l'aide d'une expérience planifiée et sur une période assez longue. Des perturbations plus significatives, mais toujours à l'intérieur des plages d'opération du procédé, pourraient être effectuées, de façon à obtenir un meilleur rapport signal/bruit. De plus, une fréquence d'acquisition plus rapide serait nécessaire, afin d'obtenir des constantes de temps réalistes des phénomènes de changement de couleur.
- Toujours dans ces mêmes conditions, une analyse PLS plus approfondie du procédé de la couleur pourrait être effectuée. Des données, obtenues à l'aide d'une planification, permettrait peut-être d'identifier d'autres variables importantes influençant la couleur. De plus, l'information apportée par les produits chimiques serait peut-être intéressante pour un modèle. Une fois un modèle obtenu, les variables qui ne sont pas importantes pourraient être éliminées, afin d'obtenir des fonctions de transfert d'ordre raisonnable pour l'application d'une stratégie de contrôle. De plus, avec une planification d'expérience, peut-être l'utilisation de seulement quelques variables latentes serait plus facile en ce qui a trait au passage du domaine latent au domaine réel.
- Il serait intéressant de déterminer des critères, à l'aide de données simulées, notamment, afin de savoir quand il est possible d'utiliser un nombre restreint de variables latentes sans perdre trop d'information lors du passage du domaine latent au domaine réel. On pourrait ensuite appliquer ces critères à des variables provenant d'une expérience planifiée, et de là, obtenir un modèle plus compact.

- Étant données des contraintes de temps, le contrôle du procédé, à l'aide des modèles identifiés de façon conventionnelle, n'a pu être testé. L'implantation d'une stratégie de contrôle avancée (DMC, par exemple) pourrait aussi être envisagée. Cette stratégie serait intéressante étant donnée la nature multivariable du procédé de la couleur. De plus, une telle stratégie permet l'inclusion de contraintes sur les variables manipulées, étant basée sur un algorithme d'optimisation. On doit souligner qu'une stratégie est maintenant implantée pour le contrôle de la couleur chez Temboard. Cette stratégie, selon les informations disponibles, est basée sur deux contrôleurs PID, chacun contrôlant un paramètre de couleur (a ou b), sans tenir compte des interactions inhérentes au procédé de couleur, interactions qui seraient prises en considération par une stratégie de contrôle prédictif. Le réglage des paramètres s'est fait de façon itérative, sans modèle. Selon les données obtenues en boucle fermée, le procédé est bien contrôlé, mais il serait peut-être possible de faire encore mieux avec une stratégie de contrôle avancée. De plus, la commande doit se faire en boucle ouverte lors de grandes perturbations sur les coucheuses. Une stratégie avancée pourrait peut-être mieux performer dans ce cas.

RÉFÉRENCES

- BÉLANGER, P.R. (1969), "A paper machine color control system design using modern techniques", *IEEE transactions on automatic control*, **AC-14**(6), 610-616.
- BENDWELL, N. (2000), "Monitoring of a wastewater treatment plant with a multivariate model", *Control Systems 2000*, Victoria, B.C. (Canada).
- BOX, G.E.P. et JENKINS, G.M. (1976), *Time series analysis - forecasting and control*, édition révisée, San Francisco, Holden-Day.
- CABOS, L. (1998), *Influence des variables de la composition sur la couleur d'un carton trois couches*, Mémoire M.Sc.A., Département de génie chimique, École Polytechnique de Montréal, Montréal (Canada).
- CHAMPAGNE, M., MEGLEN, B., WOLD, S. et KETTANEH-WOLD, N. (2000), "The use of OSC and wavelets to improve NIR readings of pulp properties", *Control Systems 2000*, Victoria, B.C. (Canada).
- CHAO, H. et WICKSTROM, W. (1970), "The development of dynamic color control on a paper machine", *Automatica*, **6**, 5-18.
- DAYAL, B.S. et MACGREGOR, J.F. (1997), "Improved PLS algorithms", *Journal of Chemometrics*, **11**, 73-85.
- DAYAL, B.S., MACGREGOR, J.F., TAYLOR, P.A., KILDAW, R. et MARCIKIC, S. (1994), "Applications of feedforward neural networks and partial least squares regression for modelling kappa number in a continuous Kamyr digester", *Pulp & Paper Canada*, **94**(1), T7-T13.
- GELADI, P. et KOWALSKI, B.R. (1986), "Partial least-squares regression: a tutorial", *Analytica Chimica Acta*, **185**, 1-17.
- HARRIS, T.J. (1989), "Assessment of control loop performance", *Canadian Journal of Chemical Engineering*, **67**, 856-860.
- HODOUIN, D., MACGREGOR, J.F., HOU, M. et FRANKLIN, M. (1993), "Multivariate statistical analysis of mineral processing plant data", *CIM Bulletin*, **86**(975), 23-34.
- HOERL, A.E. et KENNARD, R.W. (1970), "Ridge regression: biased estimation for nonorthogonal problems", *Technometrics*, **12**(1), 55-67.

- HÖSKULDSSON, A. (1988), "PLS regression methods", *Journal of Chemometrics*, **2**, 211-228.
- IVANOV, I. (2000a), "Multivariate techniques for process monitoring and optimization at Tembec", 86^e congrès annuel de PAPTAC, Montréal (Canada).
- IVANOV, I. (2000b), "Optimization of paperboard production and prediction of end-use performance using multivariate analysis", Control Systems 2000, Victoria, B.C. (Canada).
- JACKSON, E.J. et MUDHOLKAR, G.S. (1979), "Control procedures for residuals associated with principal components analysis", *Technometrics*, **21**(3), 341-349.
- JACKSON, J.E. (1991), *A user's guide to principal components*, New York, John Wiley & Sons.
- JUDD, D.B. et WYSZECKI, G. (1975), *Color in business, science and industry*, 3^e édition, New York, John Wiley & Sons.
- KASPAR, M.H. et RAY, W.H. (1992), "Chemometric methods for process monitoring and high-performance controller design", *AIChE Journal*, **38**(10), 1593-1608.
- KASPAR, M.H. et RAY, W.H. (1993), "Dynamic PLS modelling for process control", *Chemical Engineering Science*, **48**(20), 3447-3461.
- KASPAR, M.H. et RAY, W.H. (1993), "Partial least squares modelling as successive singular value decompositions", *Computers & Chemical Engineering*, **17**(10), 985-989.
- KOURTI, T. et MACGREGOR, J.F. (1995), "Process analysis, monitoring and diagnosis, using multivariate projection methods", *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **28**, 3-21.
- KRESTA, J.V., MACGREGOR, J.F. et MARLIN, T.E. (1991), "Multivariate statistical monitoring of process operating performance", *Canadian Journal of Chemical Engineering*, **69**, 35-47.
- KRESTA, J.V., MARLIN, T.E. et MACGREGOR, J.F. (1994), "Development of inferential process models using PLS", *Computers & Chemical Engineering*, **18**(7), 597-611.

- LAKSHMINARAYANAN, S. (1997), *Process characterization and control using multivariate statistical techniques*, Thèse Ph.D., Department of Chemical and Materials Engineering, University of Alberta, Edmonton.
- LAKSHMINARAYANAN, S., SHAH, S.L. et NANDAKUMAR, K. (1997), "Modeling and control of multivariable processes: dynamic PLS approach", *AIChE Journal*, **43**(9), 2307-2322.
- LINDGREN, F., GELADI, P. et WOLD, S. (1993), "The kernel algorithm for PLS", *Journal of Chemometrics*, **7**, 45-59.
- LUPIEN, B., LAUZON, E. et DESROCHERS, C. (2000), "PLS modeling of strength and optical properties of newsprint at Papier Masson ltée", Control Systems 2000, Victoria, B.C. (Canada).
- MANDEL, J. (1982), "Use of the singular value decomposition in regression analysis", *The American Statistician*, **36**(1), 15-24.
- MASMOUDI, R.A. (1999), "Improved color and pH control using adaptive deadtime compensation", *TAPPI Journal*, **82**(7), 124-132.
- MILLER, P., SWANSON, R.E. et HECKLER, C.E. (1993), "Contribution plots: a missing link in multivariate quality control", 37th ASQC Annual conference, Rochester, NY.
- MINOLTA (1994), *Precise color communication - color control from feeling to instrumentation*.
- POPSON, S.J., MALTHOUSE, D.D., CRAWFORD, T.B., POPSON, M.T. et CRAWFORD, P.M. (1996), *Measurement and control of the optical properties of paper*, 2^e édition, NewAlbany, IN, Technidyne Corporation.
- RÄNNAR, S., GELADI, P., LINDGREN, F. et WOLD, S. (1994), "A PLS kernel algorithm for data sets with many variables and few objects - Part I: Theory and algorithm", *Journal of Chemometrics*, **8**, 111-125.
- RICKER, N.L. (1988), "The use of biased least-squares estimators for parameters in discrete-time pulse-response models", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **27**, 343-350.
- SHAKESPEARE, J. et SHAKESPEARE, T. (1998), "An optimizing color controller", *TAPPI Journal*, **81**(9), 171-179.

- SKAGERBERG, B., MACGREGOR, J.F. et KIPARISSIDES, C. (1992), "Multivariate data analysis applied to low-density polyethylene reactor", *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **14**, 341-356.
- STANFELJ, N., MARLIN, T.E. et MACGREGOR, J.F. (1993), "Monitoring and diagnosing process control performance: the single-loop case", *Ind. Eng. Chem. Res.*, **32**, 301-314.
- TENENHAUS, M. (1998), *La régression PLS - Théorie et pratique*, Paris, Éditions Technip.
- TESSIER, P. et BRODERICK, G. (2000), "Example of applications of multivariate statistical analysis in the pulp and paper industry", 86^e congrès annuel PAPTAC, Montréal, (Canada).
- UMETRICS (1998), *Multivariate process modelling - a short course on multivariate statistical methods for process analysis, monitoring and optimization*, Hamilton (Canada).
- VINCENT, J.-P., LEBEAU, B. et RAMAZ, A. (1974), "Coloration en continu - la commande en boucle fermée", *Revue A.T.I.P.*, **28**, 289-301.
- VINCENT, J.-P., NGUYEN-MINH, T., HEINEN, R., LEBEAU, B., DION, J.-M. et DUGARD, L. (1992), "Advanced control strategies for the dyeing of white and colored papers", *Control Systems '92*, Whistler, B.C. (Canada).
- WIKSTRÖM, C., ALBANO, C., ERIKSSON, L., FRIDÉN, H., JOHANSSON, E., NORDAHL, Å., RÄNNAR, S., SANDBERG, M., KETTANEH-WOLD, N. et WOLD, S. (1998a), "Multivariate process and quality monitoring applied to an electrolysis process - Part I. Process supervision with multivariate control charts", *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **42**, 221-231.
- WIKSTRÖM, C., ALBANO, C., ERIKSSON, L., FRIDÉN, H., JOHANSSON, E., NORDAHL, Å., RÄNNAR, S., SANDBERG, M., KETTANEH-WOLD, N. et WOLD, S. (1998b), "Multivariate process and quality monitoring applied to an electrolysis process - Part II. Multivariate time-series analysis of lagged latent variables", *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **42**, 233-240.
- WISE, B.M. et GALLAGHER, N.B. (1996), "The process chemometrics approach to process monitoring and fault detection", *Journal of Process Control*, **6**(6), 329-348.

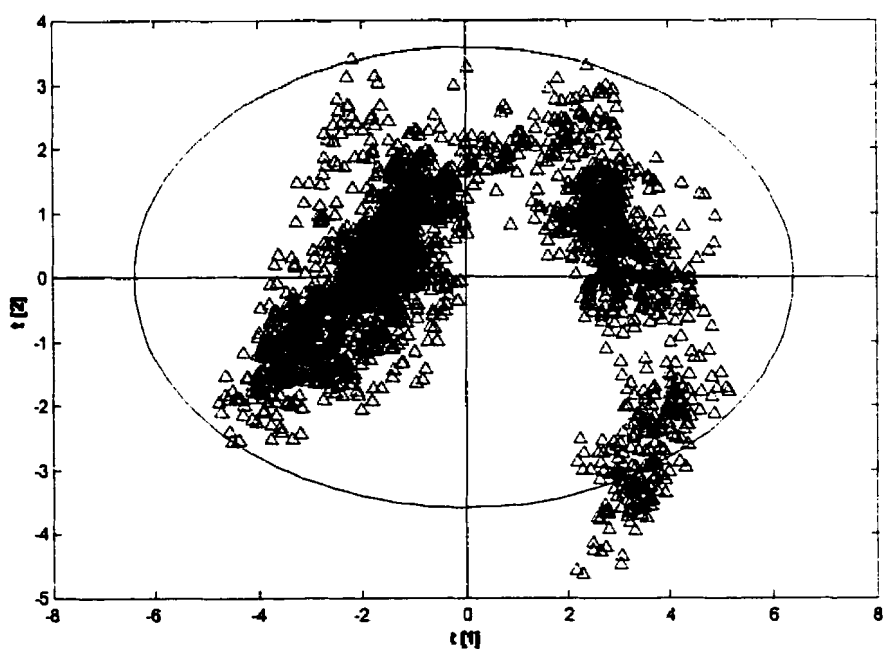
- WISE, B.M., RICKER, N.L., VELTKAMP, D.F. et KOWALSKI, B.R. (1990), "A theoretical basis for the use of principal component models for monitoring multivariate processes", *Process Control and Quality*, 1, 41-51.
- WOLD, S. (1978), "Cross-validatory estimation of the number of components in factor and principal components models", *Technometrics*, 20(4), 397-405.
- WOLD, S., ALBANO, C., DUNN III, W.J., EDLUND, U., ESBENSEN, K., GELADI, P., HELLBERG, S., JOHANSSON, E., LINDBERG, W. et SJÖRSTRÖM, M. (1983), "Multivariate analysis in chemistry", *Chemometrics - mathematics and statistics in chemistry*, Cosenza (Italie), Reidel Publishing.
- WYSZECKI, G. et STILLES, W.S. (1967), *Color science*, New York, John Wiley & Sons.
- X-RITE (1990), *Understanding color communication*.

ANNEXES

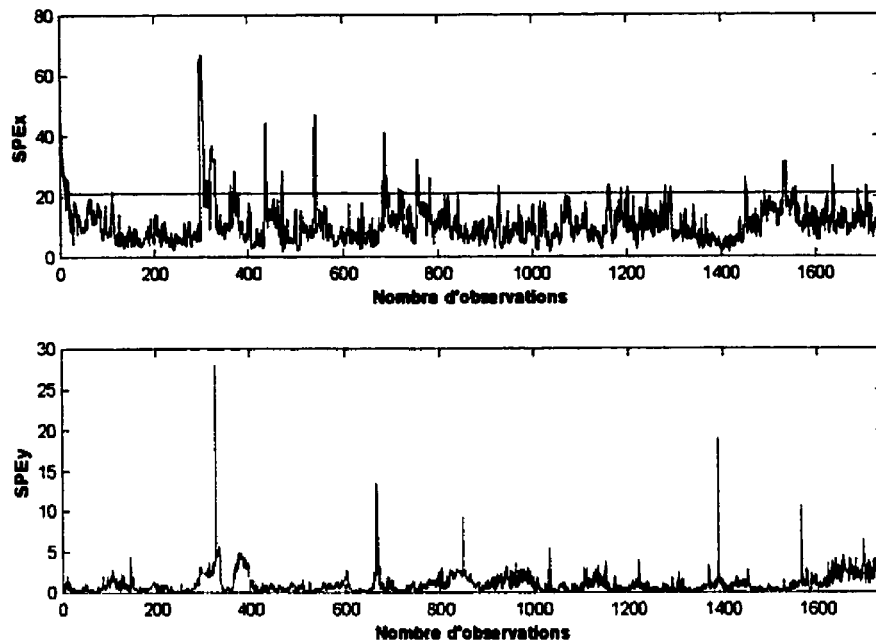
ANNEXE I - RÉSULTATS COMPLÉMENTAIRES

Résultats de modélisation, deuxième série de données, régression PLS statique

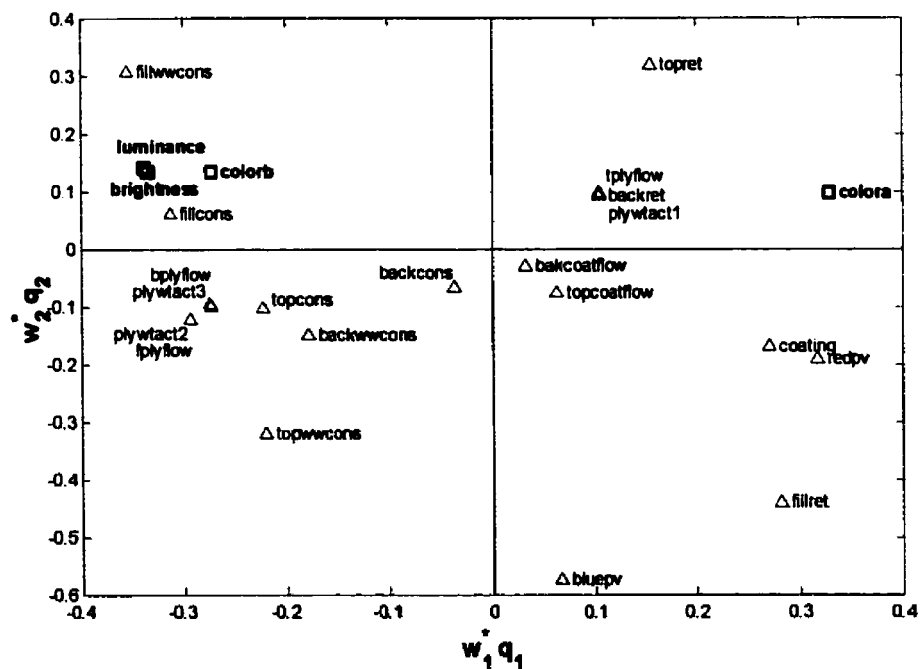
Var. lat.	R_x^2	$(R_x^2)_{cum}$	R_y^2	$(R_y^2)_{cum}$	Q^2	$(Q^2)_{cum}$
1	0.341	0.341	0.694	0.694	0.660	0.660
2	0.119	0.460	0.035	0.729	0.117	0.700



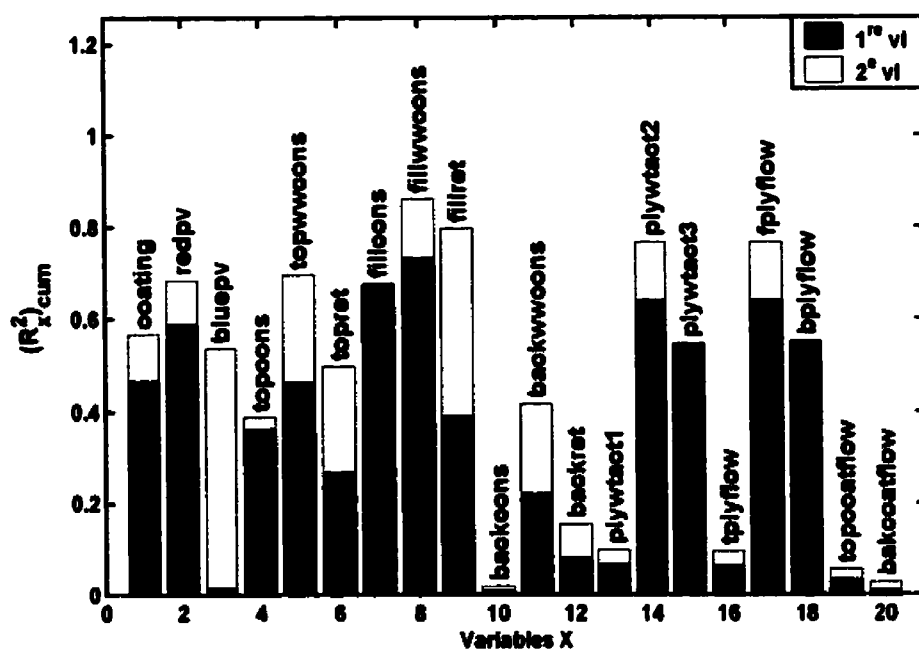
Scores des 2 dimensions du modèle, deuxième série de données, régression PLS statique



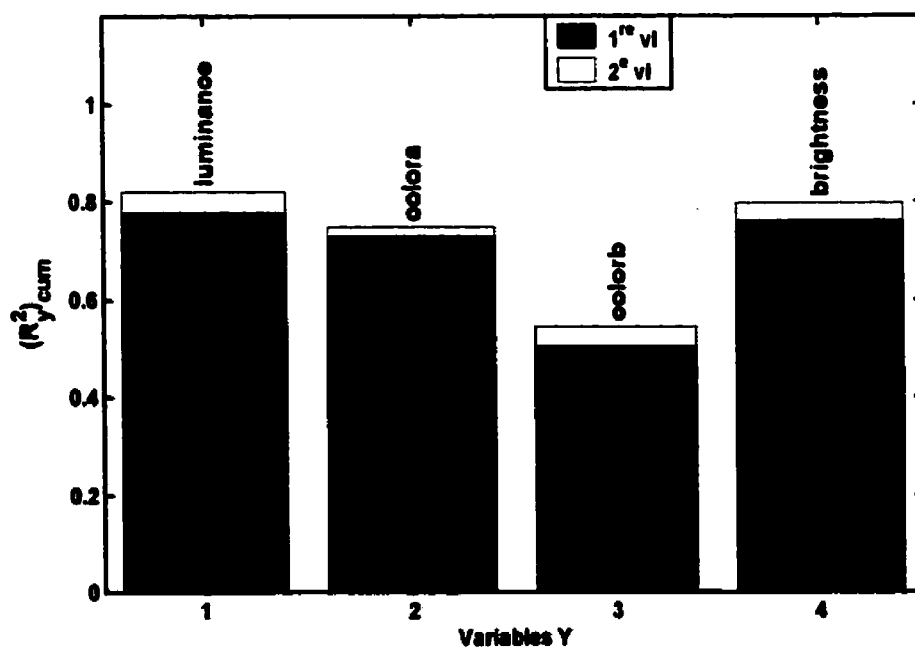
Indices SPEX et SPEY, deuxième série de données, régression PLS statique



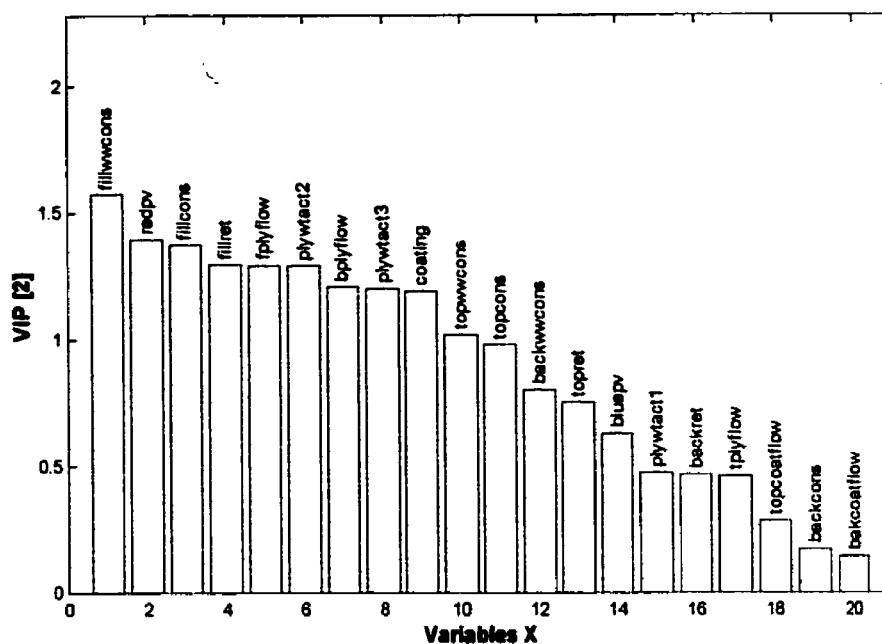
Charte de corrélation des variables latentes 1 et 2, deuxième série de données, régression PLS statique



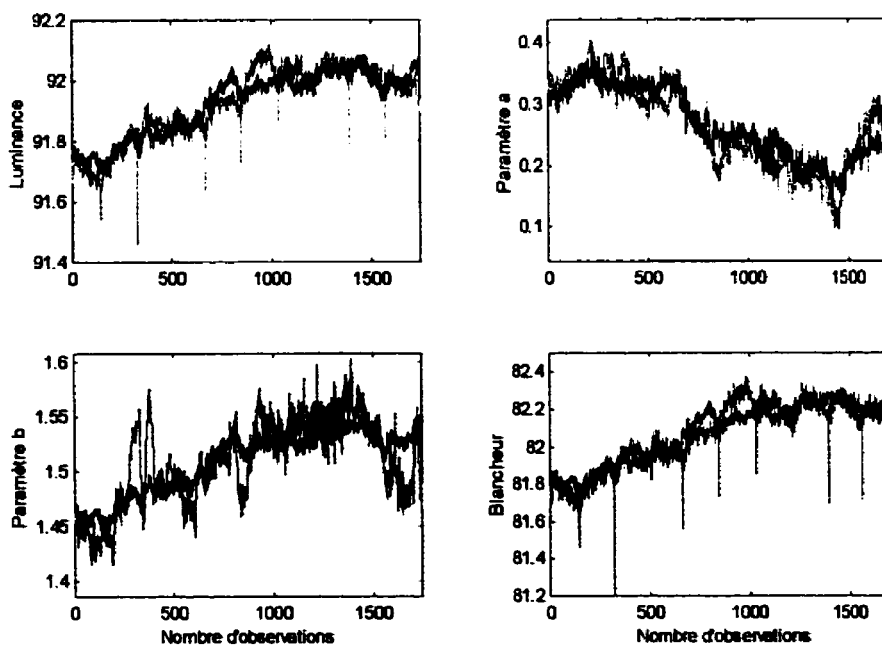
Variance de X expliquée par deux variables latentes, deuxième série de données, régression PLS statique



Variance de Y expliquée par deux variables latentes, deuxième série de données, régression PLS statique



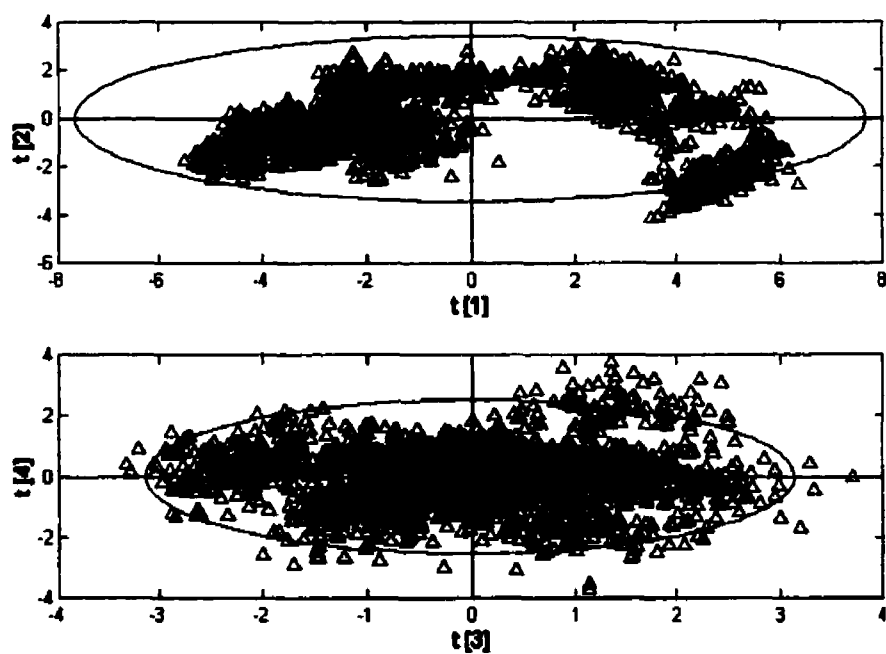
Indices VIP, deuxième série de données, régression PLS statique



Prédiction des données d'étalonnage, deuxième série de données, régression PLS statique (gris : données, noir : modèle)

Résultats de modélisation, deuxième série de données (augmentée)

Var. lat.	R_x^2	$(R_x^2)_{cum}$	R_y^2	$(R_y^2)_{cum}$	Q^2	$(Q^2)_{cum}$
1	0.4060	0.4060	0.7675	0.7675	0.741	0.741
2	0.1015	0.5076	0.0506	0.8181	0.199	0.793
3	0.0864	0.5940	0.0304	0.8485	0.158	0.826
4	0.0481	0.6420	0.0276	0.8760	0.158	0.853
5	0.0410	0.6830	0.0243	0.9003	0.137	0.873
6	0.0335	0.7165	0.0131	0.9134	0.095	0.885



Scores des 4 premières dimensions, deuxième série de données, régression PLS auto-régressive

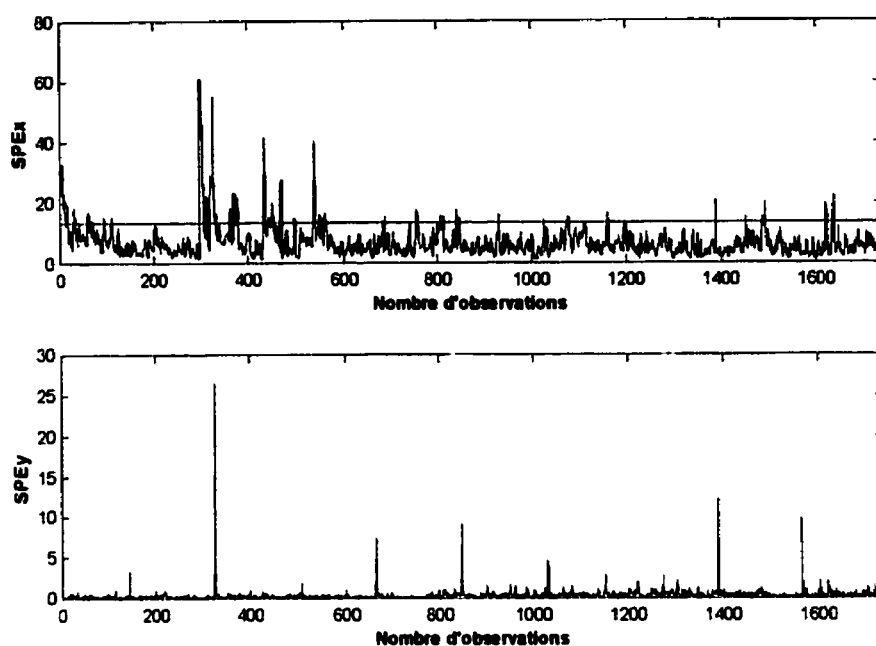
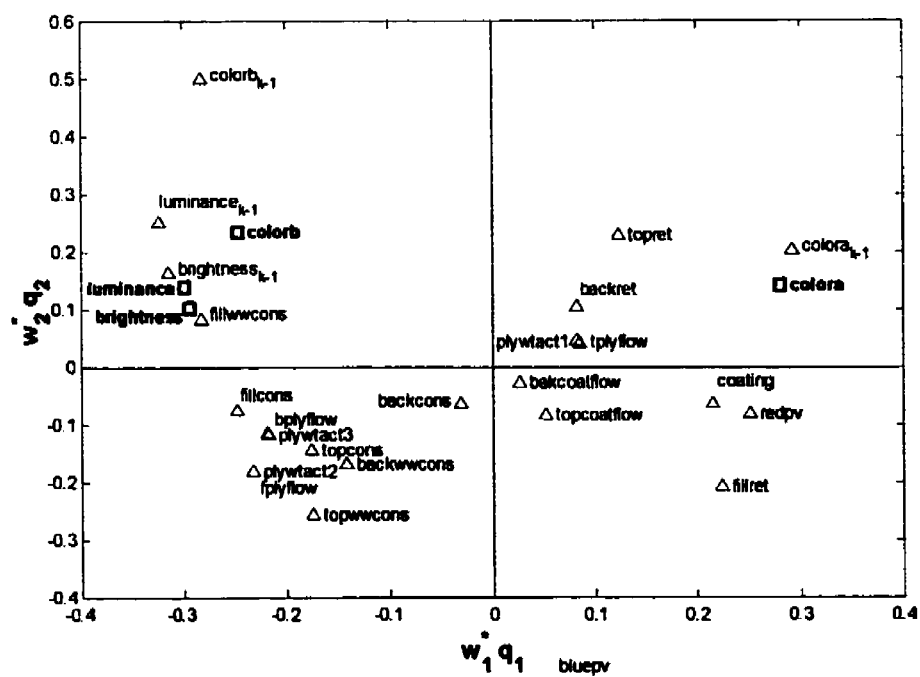
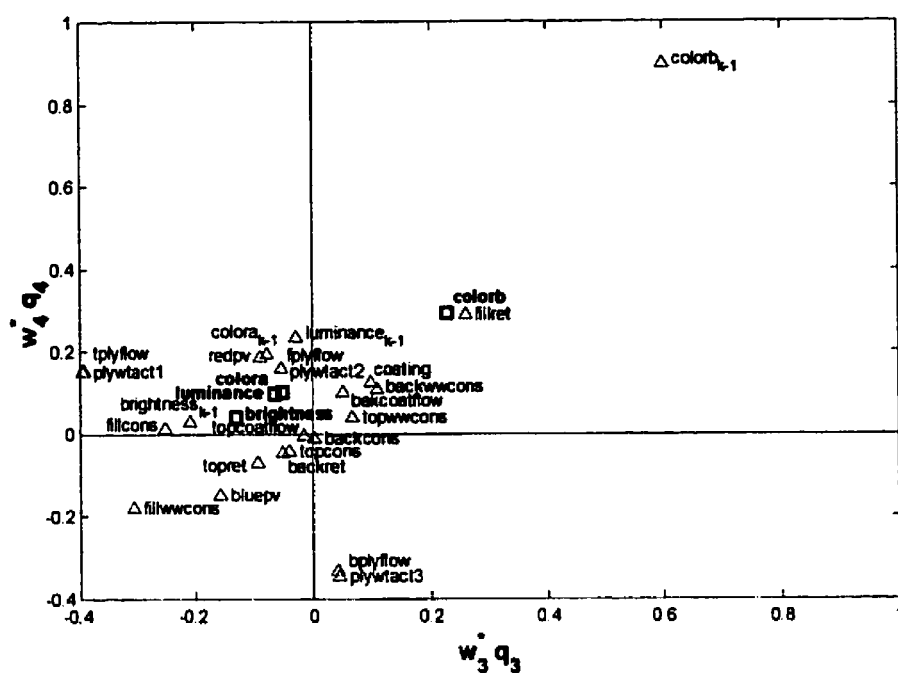


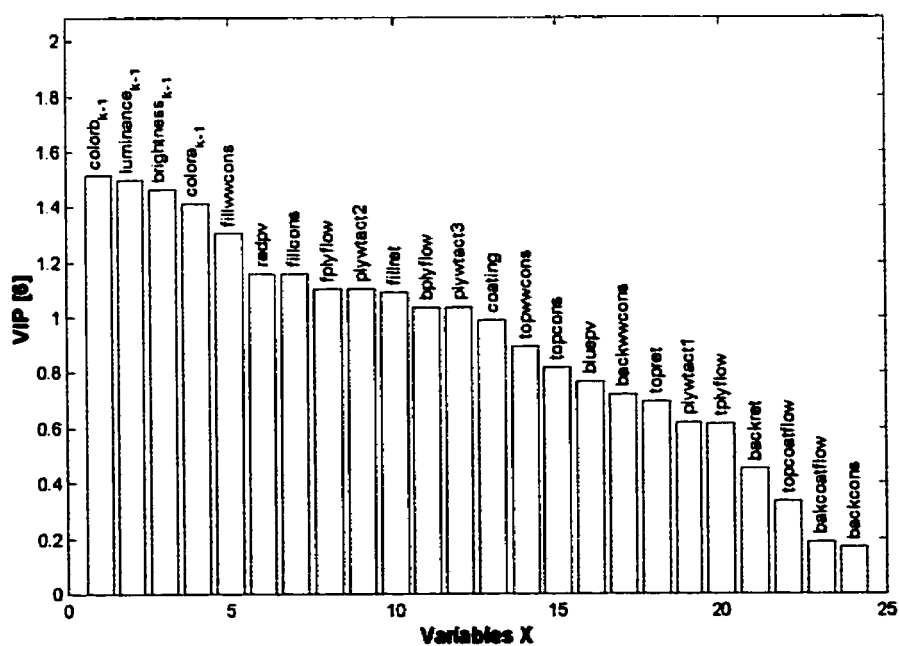
Figure 3.XXX Indices SPEX et SPEY, deuxième série de données, régression PLS auto-régressive



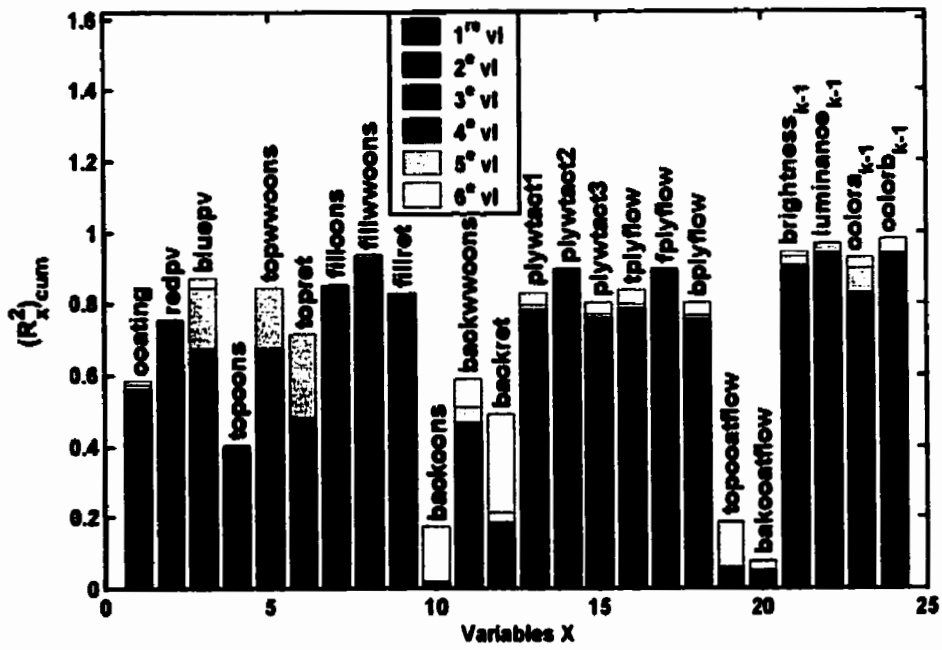
Charte de corrélation des variables latentes 1 et 2, deuxième série de données, régression PLS auto-régressive



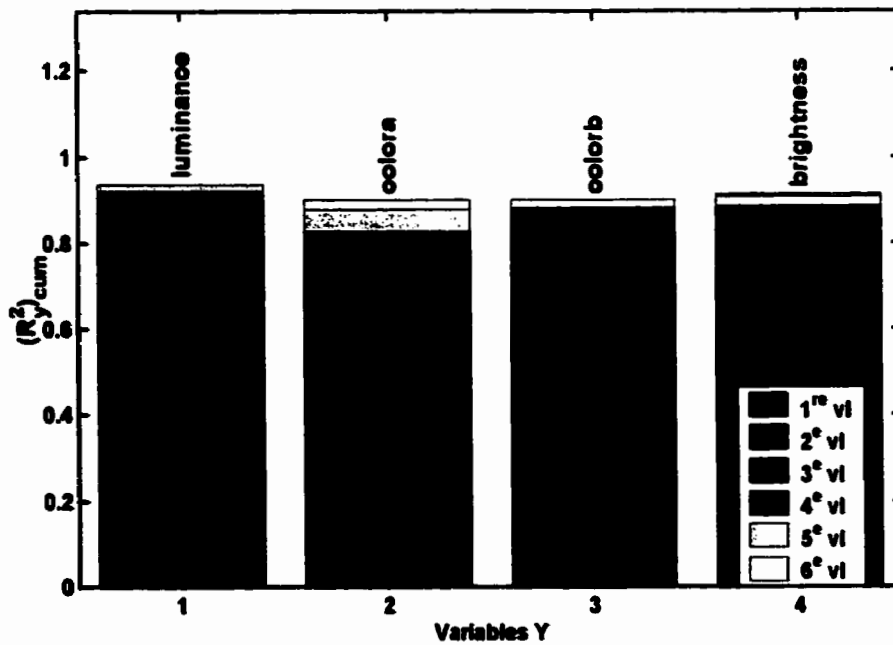
Charte de corrélation des variables latentes 3 et 4, deuxième série de données, régression PLS auto-régressive



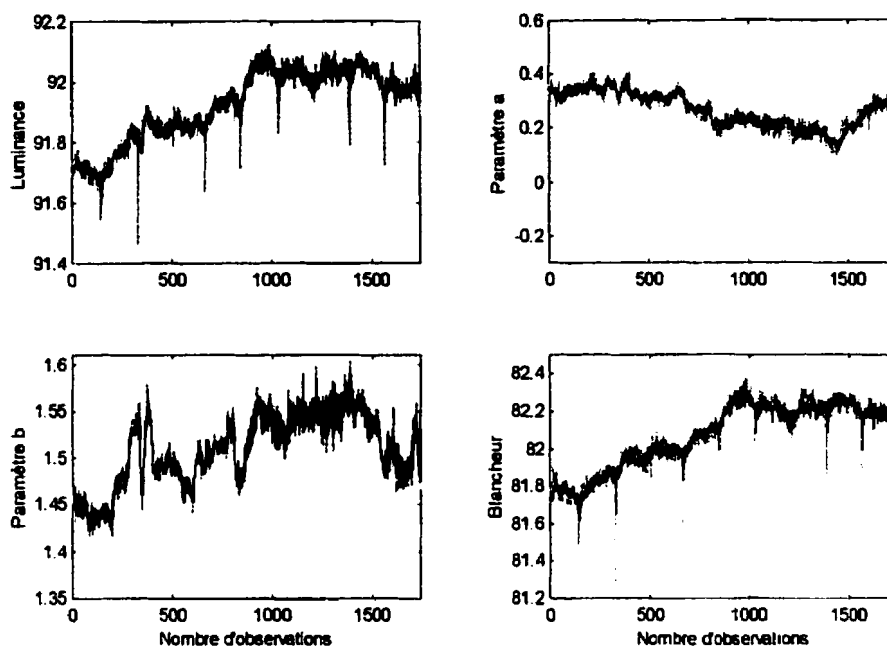
Indices VIP, deuxième série de données, régression PLS auto-régressive



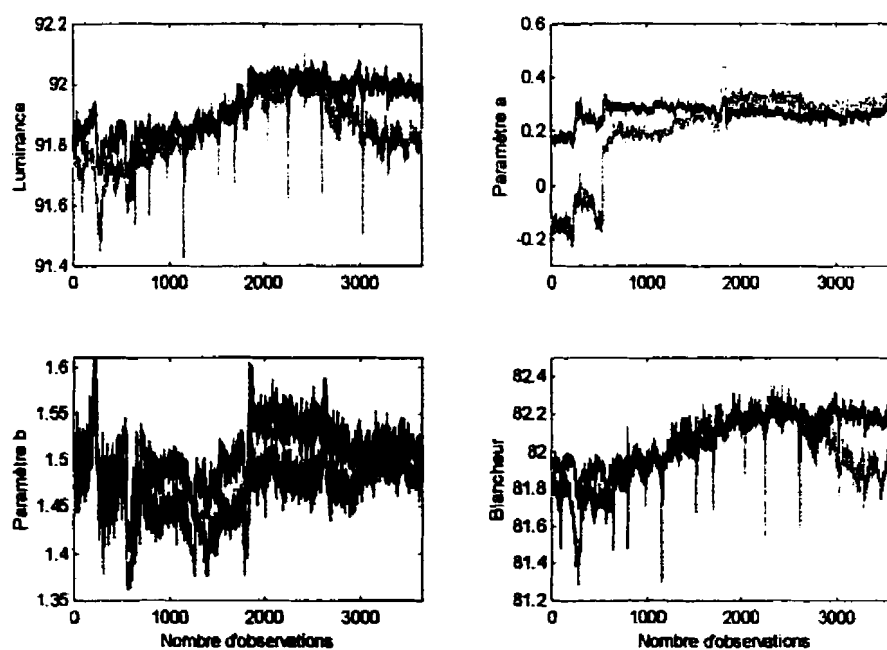
Variance de X expliquée par deux variables latentes, deuxième série de données, régression PLS auto-régressive



Variance de Y expliquée par deux variables latentes, deuxième série de données, régression PLS auto-régressive



Prediction des données d'étalonnage, deuxième série de données, régression PLS auto-régressive (gris : données, noir : modèle)



Prediction des données de la première série de données à l'aide des paramètres du 2^e modèle, méthode PLS auto-régressive (gris : données, noir : modèle)

ANNEXE II - PUBLICATION

MULTIVARIATE IDENTIFICATION OF A DYNAMIC MODEL FOR COLOUR IN MANUFACTURING OF A THREE-PLY PAPERBOARD*

Antoine Mongrain, Mohammed Elkadiri¹, Mouhsine Berrada¹, Michel Perrier

Department of Chemical Engineering
École Polytechnique de Montréal,
P.O. Box 6079, Station Centre-ville,
Montréal (Québec) H3C 3A7

¹Université du Québec en Abitibi-Témiscamingue

ABSTRACT

This paper presents a model to describe the influence of process variables on colour and brightness of a paperboard. Conventional identification and dynamic partial least squares (PLS) regression modeling technique are used for this purpose. Some process insight is gained. However, PLS models obtained showed poor predicting capability.

INTRODUCTION

Colour is an important feature of fine white coated cardboard. Uniformity is critical and reflects overall cardboard quality. High variability often results in returns from customers or in lower revenues due to off-specification product. However, colour is still controlled in an open-loop way, based on operator knowledge of the process. It is thus the aim of this project to develop a dynamic model to predict colour and to design a multivariable controller.

PROCESS OVERVIEW

Temboard, the industrial partner in this project, manufactures over 60 grades of three-ply white paperboard at its mill in Témiscaming, Quebec. This paperboard has many uses, such as cigarette packs and business cards. It is manufactured on a triple fourdrinier-type paper machine. The top and bottom plies are made from 100% virgin bleached kraft pulp. The filler ply is made from BCTMP produced on site and also contains broke and rejects from off-specification production. BCTMP induces a yellowish hue due to the remaining lignin in the pulp. The two outer plies do not totally mask the yellow hue of the filler ply, therefore introducing the need of a corrective action, with the addition of blue and red dyes in the pulp. At the time of data collection, this corrective action was done manually by adjusting dye flowrates to the filler ply-stock, based on operator knowledge of the process.

COLOUR SPACE DESCRIPTION

Colour perception is not a rational subject therefore varying from one individual to another. In order to reduce perception differences, colour spaces are used. In this project, the colour space is the Hunter L, a, b space (Fig. 1). Parameter L is the luminance, varying from 0 (black) to 100 (white). The a parameter is for the green-red hue and the b parameter is for the blue-yellow hue. L, a, b parameters are functions of spectral power distribution of illuminant, spectral reflectance of paperboard and appropriate colour matching functions [1].

* Recueil de prétrirés, conférence Control Systems 2000, Victoria, B.C. (Canada)

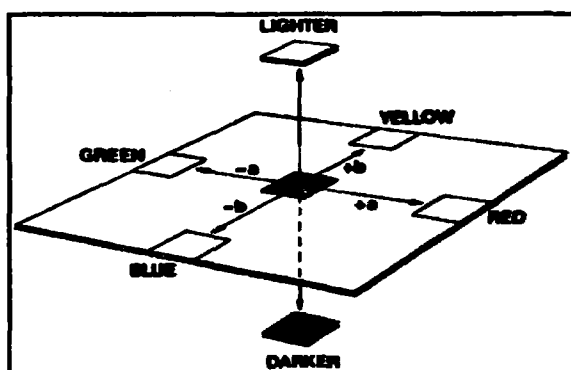


Fig. 1. Hunter L, a, b colour space

EFFECT OF FURNISH COMPOSITION

Colour can be influenced by many process variables. In a previous study [2, 3], some process variables were examined in order to determine their influence on colour and on brightness of the filler ply. This analysis was done using a statistical design of experiments. Four variables (pulp composition, cationic cofactor, AKD and starch) were found to have a significant influence on brightness, pulp composition influencing the most; a higher content of BCTMP giving a brighter pulp. Increased contents of cationic cofactor, AKD and starch had negative effects on brightness. For the luminance parameter, increases in one of the four significant variables had a positive effect. Finally, increases in one of these four variables accentuated the yellow hue of the filler ply. Although chemicals could not be used for the present study, consistencies and pulp flows could help in the analysis. The same study also showed that consistency had an influence on dye retention. Also, it has to be highlighted that the present study deals with the colour of the three plies together, at the end of the paper machine. Some effect highlighted in [2, 3] can then be attenuated by the top and back ply.

VARIABLES USED FOR MODELING

Process variables used for the analysis are presented in Table 1. Machine speed was also available, but was not included in the study since it did not vary. Process data were collected on a Measurex system, at each 20 seconds, while colour data were collected using a Measurex Precision PLUS colour sensor, model 2250, using illuminant C, observer 2°. Also, since the aim of this project is to develop a dynamic controller, many other potentially interesting variables could not be used, since they were collected from another acquisition system at too low a frequency or simply not available.

TABLE 1: PROCESS VARIABLES	
1- coating	total coat weight (g/m ²)
2- redpv	red dye flow (L/min)
3- bluepv	blue dye flow (L/min)
4- topcons	top ply consistency (%)
5- topwwocons	top ply white water consistency (%)
6- topret	top ply retention (%)
7 - fillcons	filler ply consistency (%)
8- fillwwocons	filler ply white water consistency (%)
9- fillret	filler ply retention (%)
10- backcons	back ply consistency (%)
11- backwwocons	back ply white water consistency (%)
12- backret	back ply retention (g/m ²)
13- plywtact1	top ply weight (g/m ²)
14- plywtact2	filler ply weight (g/m ²)
15- plywtact3	back ply weight (g/m ²)
16- tplyflow	top ply pulp flow (L/min)

17- fplyflow	filler ply pulp flow (L/min)
18- bplyflow	back ply pulp flow (L/min)
19- topcoatflow	top ply coating flow (L/min)
20- bakcoatflow	back ply coating flow (L/min)
21- luminance (Y)	Hunter L colour parameter (—)
22- colora (Y)	Hunter a colour parameter (—)
23- colorb (Y)	Hunter b colour parameter (—)
24- brightness (Y)	(% ISO)

DATA PROCESSING

X and Y data sets were autoscaled prior to analysis. Also, severe outliers were deleted for the analysis. These outliers usually occur when coater rolls are removed to be cleaned. Since this cleaning results in variations in colour that can't be compensated by adding dyes, these events were not taken into account for the modeling process and resulting data were thus considered as outliers. Data collected right after breaks were also discarded. Finally, problems in the data acquisition procedure and time constraints made it impossible to build a "good" data set for the modeling step. The following results will then have to be taken as "case specific" instead of being a good indicator of the overall behaviour of a specific grade.

PLS ALGORITHM

Process data are usually highly ill-conditioned. This is why the partial least squares (PLS) algorithm is used here to obtain a model. This technique summarises the data while maximising the correlation between X and Y blocks. X and Y are then expressed as

$$X = \sum_{i=1}^a t_i p_i^T + E = TP^T + E \quad (1)$$

$$Y = \sum_{i=1}^a u_i q_i^T + F = UQ^T + F \quad (2)$$

where t_i are latent vectors calculated sequentially using the NIPALS algorithm [4] and validated by cross validation [5]. The version of the classical NIPALS algorithm used is the one presented in [6]. The final model can be expressed by

$$\hat{Y} = X\beta + F \quad (3)$$

where [7]

$$\beta = W(P^T W)^{-1} Q^T \quad (4)$$

The method that is to be used is the dynamic version of the PLS as presented in [8]. This method uses a dynamic relation (ARX, for example) between the t 's and the u 's to predict dynamics as seen in Fig.2, where S_x^{-1} and S_y are diagonal scaling matrix, $G(z)$ is a diagonal matrices of dynamic relations relating t_i to u_i ($i=1, 2, \dots, a$ lv's) and $W^* = W(P^T W)^{-1}$.

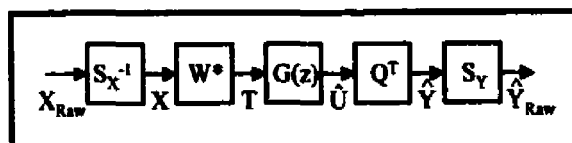


Fig. 2: Dynamic modeling strategy

Transfer functions are thus obtained by:

$$\frac{\Delta y_i(z)}{\Delta x_j(z)} = \frac{sy_i}{sx_j} \left(\sum_{k=1}^a Q_{ik} G_k(z) W_{jk}^* \right) \quad (5)$$

Thus, dynamic relations may or may not contribute to the resulting transfer function, depending on the magnitude of individual q and w^* . It is noteworthy that with this method, variables are do not need to be lagged when building the PLS model. Dynamics are included in the $G(z)$ matrix.

CONVENTIONAL IDENTIFICATION RESULTS

The following gain matrix presents process gains ($\Delta b/L/min$) between variations in a and b colour parameters and dye flowrates. The process was found to be nonlinear, so these gains are presented to give an idea of the respective amplitude of the effect of dye flowrates on colour a and b parameters.

$$\begin{bmatrix} \Delta b \\ \Delta a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2.7 & -0.86 \\ -1.4 & 2.47 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \text{blue dye} \\ \Delta \text{red dye} \end{bmatrix} \quad (6)$$

Regarding time delay, autocorrelation analysis gave a time delay of around five sampling periods, i.e. 1 min 40 s. This delay of course depends of dye flowrate, machine speed and pulp flowrate. For the study presented in this paper, based on the machine speed, the part of the delay which is known is 1 minute. Finally, time constants are between 0.5 and 1 minute.

PLS RESULTS

Interpretation of a model is a crucial step in modeling. PLS modeling permits such an interpretation, by examination of the model's underlying structure. A model was thus first developed using flowrates data lagged according to machine speed (three sampling periods), although no significant difference was observed in loadings and weights with no lag included. All variables on hand were considered in the modeling step, in order to have a first representation of the influence of each variables on Y . Four latent variables were able to explain 63% of sum of squares in the X block and 72% in the Y block. The number of variables was determined by cross-validation [5].

TABLE 2. % EXPLAINED SUM OF SQUARES				
LV #	X-Block		Y-Block	
	This LV	Total	This LV	Total
1	31.40	31.40	46.63	46.63
2	16.94	48.34	13.80	60.43
3	6.63	54.97	8.48	68.91
4	7.94	62.91	2.85	71.76

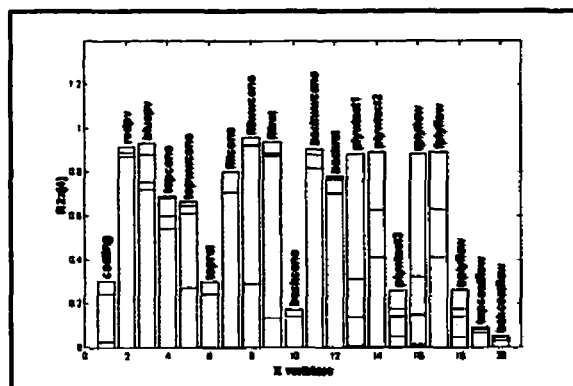


Fig. 3: Explained sum of squares for X variables (4 lvs model)

Looking at the w^*q plot (Fig. 5) can be helpful in interpreting the model. One can see the influence of X on Y variables by looking at the (w^*), representing the correlation between X variables in every dimension and the U-scores (Y, indirectly). It is also possible to know how X variables correlate with Y.

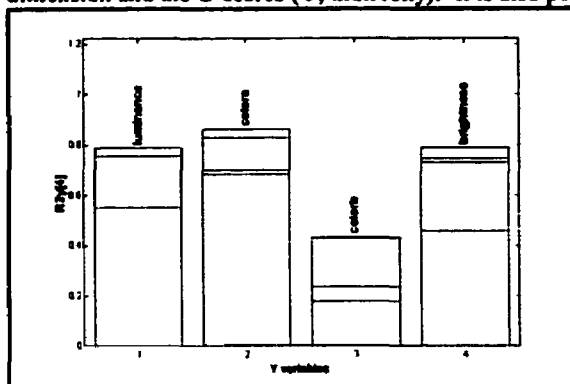


Fig. 4: Explained sum of squares for Y variables (4 lvs model)

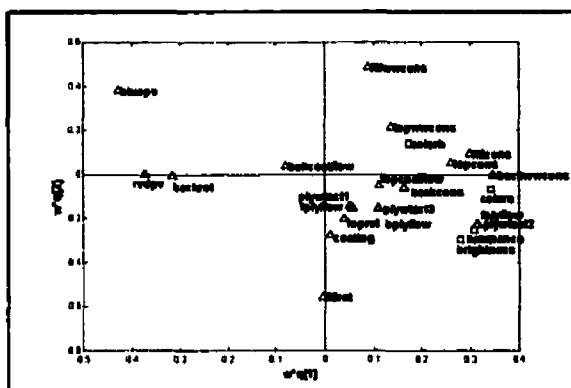


Fig. 5: w^*q plot of PLS model for 1st and 2nd dimension

In the first dimension, high w^* are given to “bluepv”, “redpv”, “fplyflow”, “plywact2”, “fillcons2”, “backret” and “backwwcons”. Considering blue and red dye flowrates, these can explain variation in colour parameters a and b, but should not influence brightness and luminance. We can see in Fig. 3, presenting the cumulative explained sum of squares for X variables, that dye flowrates variations are well explained by the first dimension. But seeing that only 17% of the variation in the blue-yellow hue (“colorb”, Fig. 4) is explained by the first PLS dimension indicates that something else is influencing the b parameter. Consistency variations might have an effect on colour, since it was shown in [2, 3] that consistency had an effect on blue dye retention.

One of the variables that might explain the variation in luminance and brightness might be fluctuations in the filler ply pulp flow (by influencing ply weight). By looking at various data sets, variations in pulp flowrates (thus ply weight) seemed to have an influence on brightness and luminance. This might be reflected in the fact that “plywtact2” has a moderate w^* in the first dimension. But this cannot be confirmed and variations in brightness and luminance seem to come from other variations, that can not be explained by the variables at hand (residual lignin content, for example). Coating should explain some variation in the brightness, but its contribution is negligible to the first PLS dimension and only moderate to the second PLS dimension. Finally, back ply white water consistency is quite prevalent in the first dimension, but this is questionable since the back ply is not seen from the colour scanner and

thus should not correlate with Y parameters. The last two dimensions of the model (not shown) show that the remaining sum of squares of colora and colorb are explained again by blue dye flowrate and variations in the top and filler ply flow.

Fig. 5 also shows a strange negative correlation between red dye flow and the a parameter. As seen above (eq. 6), they should cluster together since the transfer function has a positive steady-state gain. It was found by looking at process data that the blue dye flow seemed to have a greater influence on the a parameter than the red dye itself. We can then question the ability of obtaining good process gain signs by applying the PLS dynamic identification method for this particular data set. Indeed, if the underlying PLS structure is questionable, using this method with the present data should not give satisfying results. Further analysis, including variable pruning, might help in developing a more coherent model.

Prediction was attempted with this model on another run of the same grade, giving poor prediction. Investigation revealed that the predicted run was dominated by a variation in the first dimension in the filler ply consistency and filler pulp flow. This certainly explains why prediction is not very good and could be improved. In our case, the modelling process looks sensitive to what happens in a particular run. A model obtained with the help of a designed experiment might be less sensitive in this case

CONCLUSION

An attempt was made to develop a dynamic PLS model for the influence of process variables on colour L, a, b parameters and on brightness. A model was obtained, but showed poor prediction capability. This might be explained by some variables covering the influence of other variables. Due to this problem, dynamic modelling was not attempted, as a better model is needed beforehand to catch the dynamics of the system. This will be attempted by pruning some variables out of the model. Having more data might help as well. Then, transfer functions obtained from conventional identification and dynamic PLS will be compared.

ACKNOWLEDGEMENTS

Financial support from National Science and Engineering Research Council (NSERC), Tembec and Automatismes Syst-M inc. is acknowledged. Also, many thanks to Marc Champagne, Isabelle Ivanov and Daniel Monette of Tembec for fruitful discussions regarding PLS modeling.

REFERENCES

1. WYSZECKI, G., STILES, W.S., "Colour Science - Concepts and Methods, Quantitative Methods and Formulas", Wiley, New York (1967).
2. CABOS, L., "Influence des variables de la composition sur la couleur d'un carton trois couches", M.Sc.A. Thesis, École Polytechnique de Montréal, Montreal, QC, Canada (1998).
3. CABOS, L., BERRADA, M., PARIS, J., "Effect of Furnish Composition on the Colour of a Fine Three Ply Paperboard and Remediation", *Submitted to Tappi J* (1998).
4. GELADI, P., KOWALSKI, B.R., "Partial Least-Squares Regression: A Tutorial", *Analytica Chimica Acta* 185:1-17 (1986).
5. WOLD, S., "Cross-Validatory Estimation of the Number of Components in Factor and Principal Components Models", *Technometrics* 20(4):397-405 (1978).
6. LINDGREN, F., GELADI, P., WOLD, S., "The Kernel Algorithm for PLS", *J. Chemometrics* 7:45-59 (1993).
7. SKAGERBERG, B., MacGREGOR, J.F., KIPARISSIDES, C., "Multivariate Data Analysis Applied to Low-Density Polyethylene Reactors", *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 14:341-356 (1992).
8. LAKSHMINARAYANAN, S., SHAH, S.L., NANDAKUMAR, K., "Modeling and Control of Multivariable Processes: Dynamic PLS Approach", *AIChE J* 43(9):2307-2322 (1997).